	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2014-0057500 (43) 공개일자 2014년05월13일
(51) 국제특허분류(Int. Cl.) <i>C07D 235/18</i> (2006.01) <i>C07D 403/10</i> (2006.01) <i>C07D 409/04</i> (2006.01) <i>C07F 3/00</i> (2006.01) <i>H01L 51/50</i> (2006.01) (21) 출원번호 10-2013-7034890 (22) 출원일자(국제) 2012년06월21일 심사청구일자 없음 (85) 번역문제출일자 2013년12월30일 (86) 국제출원번호 PCT/US2012/043595 (87) 국제공개번호 WO 2012/177914 국제공개일자 2012년12월27일 (30) 우선권주장 13/166,246 2011년06월22일 미국(US)		(71) 출원인 닛토덴코 가부시키키가이샤 일본국 오사카후 이바라키시 시모호즈미 1-1-2 (72) 발명자 쟁 시준 미국 92129 캘리포니아주 샌디에이고 오렌지 헤이븐 플레이스 8309 마 리평 미국 92130 캘리포니아주 샌디에이고 버다 레인 6203 (뒷면에 계속) (74) 대리인 송승필, 강승욱

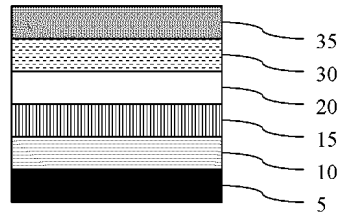
전체 청구항 수 : 총 23 항

(54) 발명의 명칭 폴리페닐렌 호스트 화합물

(57) 요약

폴리페닐렌 화합물, 예컨대 화학식 I로 표시되는 화합물은 유기 발광 장치와 같은 전자 장치에서 사용될 수 있다. 예를 들면, 상기 화합물은 발광층 중의 호스트 물질로서 사용될 수 있다.

대표도 - 도1



(72) 발명자

모치즈키 아마네

미국 92011 캘리포니아주 칼즈배드 멜라루카 애비뉴 961 아파트 L

레이 첸시

미국 92081 캘리포니아주 비스타 웰링톤 레인 #67 1946

칸 사자두르 라만

미국 92122 캘리포니아주 샌디에이고 팔밀라 드라이브 #2 7650

리 쉐

미국 92081 캘리포니아주 비스타 세쿼이아 크레스트 2075

하딩 브렛 티

미국 92009 캘리포니아주 칼즈배드 우루부 스트리트 6816

채 현식

미국 92122 캘리포니아주 샌디에이고 코스타 버드 불러바드 #3305 8840

로메로 레베카

미국 92025 캘리포니아주 에스콘디도 노스 픽 스트리트 638

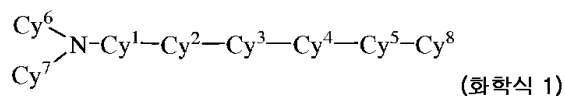
시스크 데이빗 티

미국 92128 캘리포니아주 샌디에이고 프로빈살 플레이스 11329

특허청구의 범위

청구항 1

화학식:



으로 표시되는 화합물로서,

상기 화학식 중, Cy^1 , Cy^2 , Cy^3 , Cy^4 및 Cy^5 는 독립적으로, C_{1-6} 알킬 및 F에서 독립적으로 선택되는 1개 또는 2개의 치환기로 임의로 치환된 *p*-페닐렌이고;

Cy^6 는 C_{1-6} 알킬 및 F에서 독립적으로 선택되는 1개, 2개 또는 3개의 치환기로 임의로 치환된 페닐이며;

Cy^7 은 C_{1-6} 알킬 및 F에서 독립적으로 선택되는 1개, 2개 또는 3개의 치환기로 임의로 치환된 나프탈렌-1-일이고;

Cy^8 은 C_{1-6} 알킬 및 F에서 독립적으로 선택되는 1개, 2개, 3개, 4개 또는 5개의 치환기로 임의로 치환된 1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일인 화합물.

청구항 2

제1항에 있어서, Cy^1 및 Cy^2 가 비치환된 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서, Cy^3 및 Cy^4 가 비치환된 화합물.

청구항 4

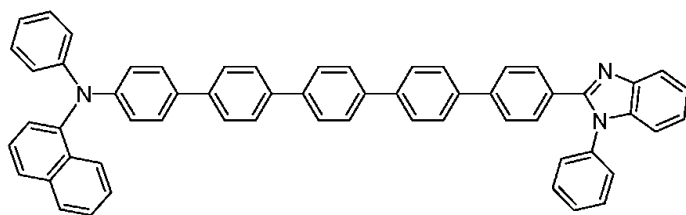
제1항에 있어서, Cy^5 및 Cy^8 이 비치환된 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서, Cy^6 및 Cy^7 이 비치환된 화합물.

청구항 6

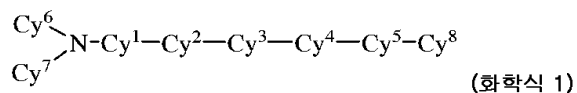
제1항에 있어서,



인 화합물.

청구항 7

화학식:



으로 표시되는 화합물로서,

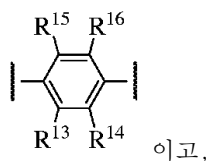
상기 화학식 중, Cy^1 , Cy^2 , Cy^3 , Cy^4 및 Cy^5 는 독립적으로 임의로 치환된 *p*-페닐렌이고; Cy^6 는 임의로 치환된 페닐이며;

Cy^7 은 임의로 치환된 페닐 또는 임의로 치환된 나프탈레닐이고, Cy^6 와 Cy^7 은 임의로 함께 결합하여, 이들이 부착된 N을 포함하는 축합 3환 고리계를 형성하며;

Cy^8 은 임의로 치환된 1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일인 화합물.

청구항 8

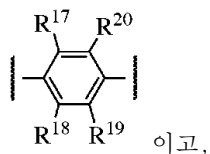
제7항에 있어서, Cy^1 이



상기 화학식 중, R^{13} , R^{14} , R^{15} 및 R^{16} 이 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필인 화합물.

청구항 9

제7항에 있어서, Cy^2 가



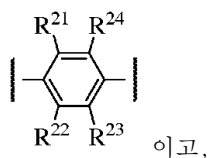
상기 화학식 중, R^{17} , R^{18} , R^{19} 및 R^{20} 가 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필인 화합물.

청구항 10

제7항에 있어서, Cy^1 과 Cy^2 가 결합 치환기를 공유하여, Cy^1 , Cy^2 및 그 결합 치환기가 축합 3환 고리계를 형성하는 화합물.

청구항 11

제7항에 있어서, Cy^3 가



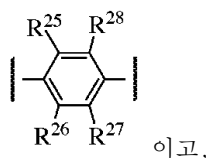
상기 화학식 중, R^{21} , R^{22} , R^{23} 및 R^{24} 가 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필인 화합물.

청구항 12

제7항에 있어서, Cy^2 와 Cy^3 가 결합 치환기를 공유하여, Cy^2 , Cy^3 및 그 결합 치환기가 축합 3환 고리계를 형성하는 화합물.

청구항 13

제7항에 있어서, Cy^4 가



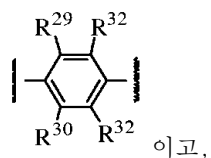
상기 화학식 중, R^{25} , R^{26} , R^{27} 및 R^{28} 이 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필인 화합물.

청구항 14

제7항에 있어서, Cy^3 와 Cy^4 가 결합 치환기를 공유하여, Cy^3 , Cy^4 및 그 결합 치환기가 축합 3환 고리계를 형성하는 화합물.

청구항 15

제7항에 있어서, Cy^5 가



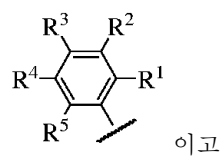
상기 화학식 중, R^{29} , R^{30} , R^{31} 및 R^{32} 가 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필인 화합물.

청구항 16

제7항에 있어서, Cy^4 와 Cy^5 가 결합 치환기를 공유하여, Cy^4 , Cy^5 및 그 결합 치환기가 축합 3환 고리계를 형성하는 화합물.

청구항 17

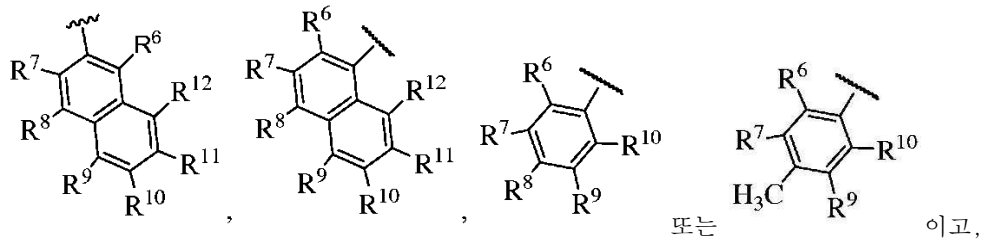
제7항에 있어서, Cy^6 이



상기 화학식 중, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 및 R^5 가 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필인 화합물.

청구항 18

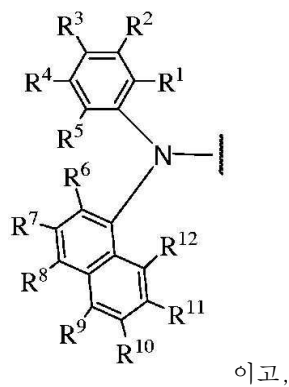
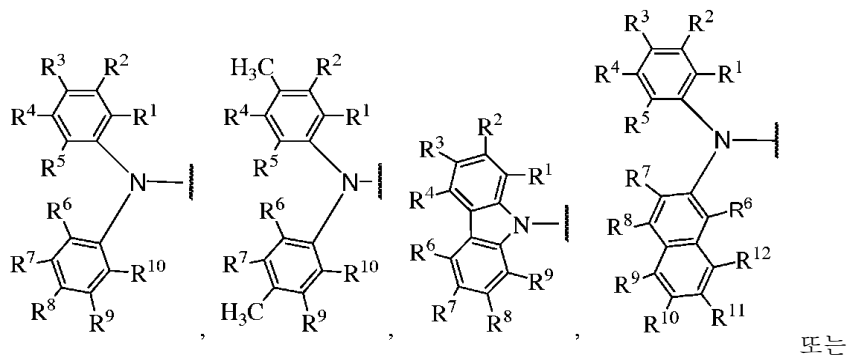
제7항에 있어서, Cy^7 이



상기 화학식 중, R^6 , R^7 , R^8 , R^9 , R^{10} , R^{11} 및 R^{12} 가 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필인 화합물.

청구항 19

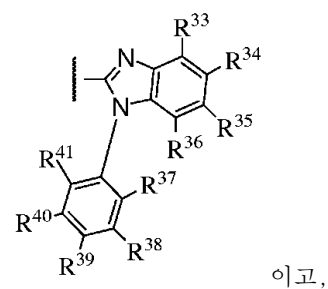
제7항에 있어서, Cy^6 및 Cy^7 가



상기 화학식 중, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 , R^7 , R^8 , R^9 , R^{10} , R^{11} 및 R^{12} 가 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필인 화합물.

청구항 20

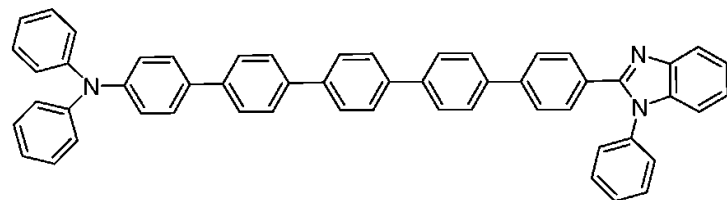
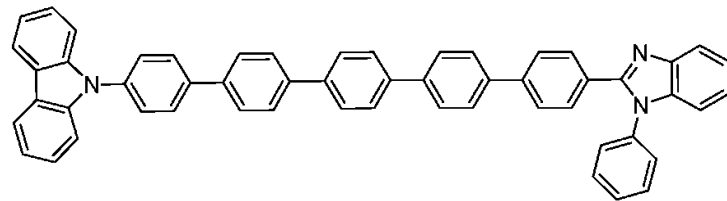
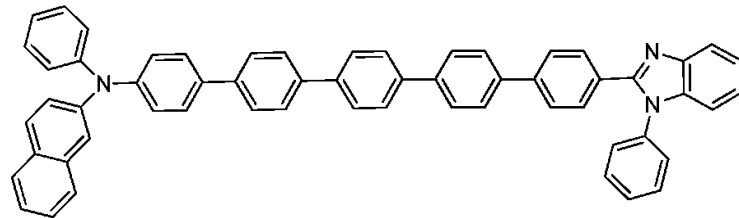
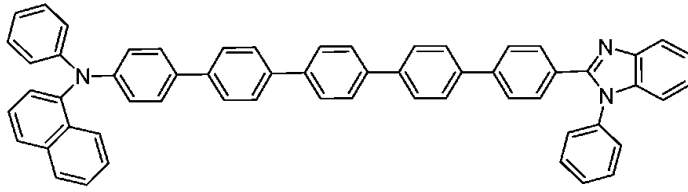
제7항에 있어서, Cy^8 이



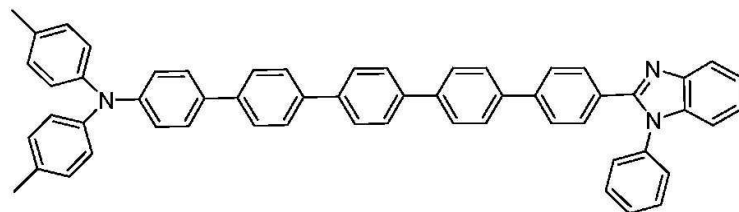
상기 화학식 중, R^{33} , R^{34} , R^{35} , R^{36} , R^{37} , R^{38} , R^{39} , R^{40} 및 R^{41} 이 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필인 화합물.

청구항 21

제7항에 있어서,



및



로 이루어진 군에서 선택되는 화합물.

청구항 22

제1항의 화합물을 포함하는 발광 장치.

청구항 23

제18항에 있어서, 상기 화합물이 발광층 중의 호스트인 발광 장치.

명세서

기술분야

관련 출원 상호 참조

[0001]

[0002] 이 출원은 2011년 6월 22일에 제출된 미국 특허 출원 제13/166,246호에 기초한 우선권을 주장하며, 그 개시 내용이 전부 본원에 참고로 인용되어 있다.

[0003] 기술 분야

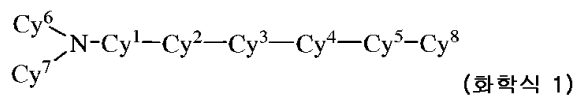
[0004] 본 실시양태는, 장치 내의 발광층용 호스트 화합물에 관한 것이다.

배경 기술

[0005] 유기 발광 장치(OLED)는 조명 및 디스플레이 분야에서 더욱더 중요해지고 있다. OLED는, 호스트 물질과 이 호스트 물질 내에 분산된 발광 성분을 포함하는 방출층 또는 발광층을 포함할 수 있다. OLED 중의 호스트 물질은, 낮은 안정성, 높은 전하 주입 장벽 및 불균형한 전하 주입과 이동도의 문제가 있을 수 있다. 호스트 물질로 인한 이 잠재적 단점들은, 이 호스트 물질을 포함하는 장치의 효율 저하 및 수명 단축을 야기할 수 있다.

발명의 내용

[0006] 일부 실시양태는 화학식 1:



[0007] 로 표시되는 화합물을 포함할 수 있으며, 상기 화학식 1에서 Cy^1 , Cy^2 , Cy^3 , Cy^4 및 Cy^5 는 독립적으로 임의로 치환된 *p*-페닐렌이고; Cy^6 는 임의로 치환된 페닐이며; Cy^7 은 임의로 치환된 페닐 또는 임의로 치환된 나프탈레닐이고, Cy^6 와 Cy^7 은 임의로 함께 결합하여, 이들이 부착된 N을 포함하는 제3 고리(a third ring)를 형성하며; Cy^8 은 임의로 치환된 1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일이다.

[0009] 화학식 1에 있어서, 일부 실시양태에서는, Cy^1 , Cy^2 , Cy^3 , Cy^4 및 Cy^5 가 독립적으로, C_{1-6} 알킬 및 F에서 독립적으로 선택되는 1개 또는 2개의 치환기로 임의로 치환된 *p*-페닐렌이고; Cy^6 는 C_{1-6} 알킬 및 F에서 독립적으로 선택되는 1개, 2개 또는 3개의 치환기로 임의로 치환된 페닐이며; Cy^7 은 C_{1-6} 알킬 및 F에서 독립적으로 선택되는 1개, 2개 또는 3개의 치환기로 임의로 치환된 나프탈렌-1-일이고; Cy^8 은 C_{1-6} 알킬 및 F에서 독립적으로 선택되는 1개, 2개, 3개, 4개 또는 5개의 치환기로 임의로 치환된 1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일이다.

[0010] 일부 실시양태는, 임의로 치환된 1-(1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)-[4[°]-페닐(나프탈렌-1-일)아미노]펜타(*para*-페닐레닐)를 포함한, 임의로 치환된 펜타(*para*-페닐레닐) 화합물; 임의로 치환된 1-(1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)-[4[°]-(카르바졸-9-일)아미노]펜타(*para*-페닐레닐); 임의로 치환된 1-(1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)-[4[°]-디페닐아미노]펜타(*para*-페닐레닐); 임의로 치환된 1-(1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)-[4[°]-페닐(나프탈렌-2-일)아미노]펜타(*para*-페닐레닐); 임의로 치환된 1-(1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)-[4[°]-디(4-메틸페닐)아미노]펜타(*para*-페닐레닐); 등을 포함한다.

[0011] 일부 실시양태는, 본원에 기술된 화합물을 포함하는 발광 장치를 포함한다.

[0012] 이들 및 다른 실시양태들을 본원에 더 상세히 기술한다.

도면의 간단한 설명

[0013] 도 1은 본원에 개시된 화합물을 포함하는 OLED의 실시양태의 개략도이다.

도 2는 본원에 개시된 화합물을 포함하는 장치의 전장발광 스펙트럼이다.

도 3은 본원에 개시된 화합물을 포함하는 OLED의 실시양태에 대한 구동 전압의 함수로서의 전류 밀도 및 휘도의 플롯이다.

도 4는 본원에 개시된 화합물을 포함하는 OLED의 실시양태에 대한 휘도의 함수로서의 전류 효율 및 전력 효율의

플롯이다.

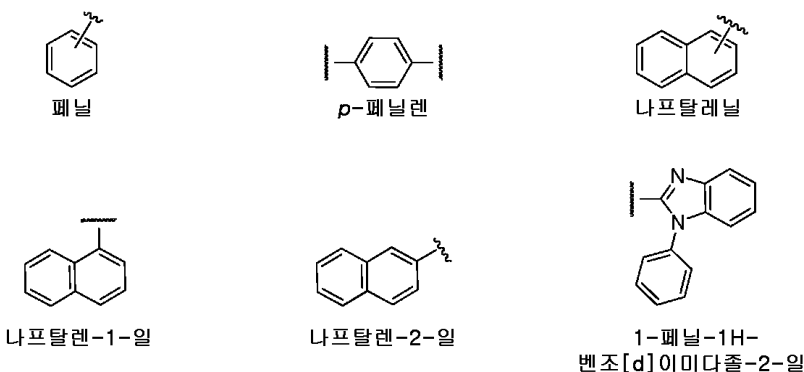
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0014]

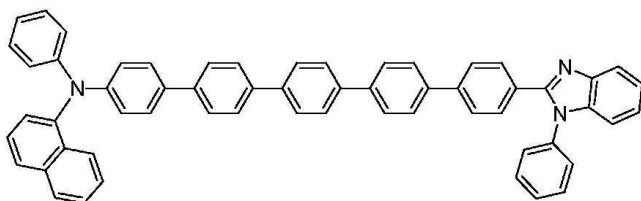
달리 명시하지 않은 한, 아릴과 같은 화학 구조적 특징기(feature) 또는 화합물이 "임의로 치환된"으로 일컬어지는 경우, 이는 상기 특징기가 치환기를 갖지 않거나(즉, 비치환됨), 하나 이상의 치환기를 가질 수 있음을 의미한다. "치환된" 특징기는 하나 이상의 치환기를 갖는다. 용어 "치환기"는, 당업자에게 공지된 통상적 의미를 갖는다. 일부 실시양태에서, 치환기는, 분자량(예컨대, 치환기의 원자의 원자 질량의 합)이 15 g/mol ~ 50 g/mol, 15 g/mol ~ 100 g/mol, 15 g/mol ~ 200 g/mol, 15 g/mol ~ 300 g/mol 또는 15 g/mol ~ 500 g/mol 인, 당업계에 공지된 통상의 유기 성분일 수 있다. 일부 실시양태에서, 치환기는, 0~30개, 0~20개, 0~10개 또는 0~5개의 탄소 원자; 및 N, O, S, Si, F, Cl, Br 또는 I에서 독립적으로 선택되는 0~30개, 0~20개, 0~10개 또는 0~5개의 헤테로 원자를 포함하며; 단, 치환기는 C, N, O, S, Si, F, Cl, Br 또는 I에서 선택되는 하나 이상의 원자를 포함한다. 치환기의 예로는, 알킬, 알케닐, 알키닐, 헤테로알킬, 헤테로알케닐, 헤테로알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 히드록시, 알콕시, 아릴옥시, 아실, 아실옥시, 알킬카르복실레이트, 티올, 알킬티오, 시아노, 할로, 티오키아보닐, 0-카르바밀, N-카르바밀, 0-티오키아보닐, N-티오키아보닐, C-아미도, N-아미도, S-술폰아미도, N-술폰아미도, 이소시아네이트, 티오시아네이트, 이소티오시아네이트, 니트로, 실릴, 술폰, 술폰, 술폰, 할로알킬, 할로알콕실, 트리할로메탄술폰, 트리할로메탄술폰아미도, 아미노 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다. 일부 실시양태에서, 두 치환기가 결합하여 고리를 형성할 수 있다. 일부 실시양태에서, 치환기는 2 이상의 구조적 특징기에 부착되는 결합기(linking group)일 수 있으며, 예컨대, 치환기가 결합 치환기이면, 본원에 보다 상세히 기술한 바와 같이 Cy¹, Cy² 및 이 결합 치환기(예컨대, 알킬, -O-, -NH- 등)가 축합 3환 고리계를 형성할 수 있다.

[0015]

본원에서 언급되는 화학명 중 일부와 관련된 구조들을 이하에 나타낸다. 이들 구조는 하기 도시한 바와 같이 비치환되거나, 또는 치환기가 독립적으로, 구조의 비치환시에 통상 수소 원자가 차지하는 임의의 위치에 있을 수 있다.



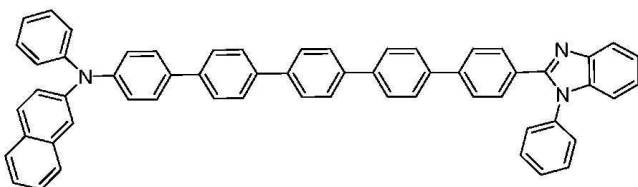
[0016]



[0017]

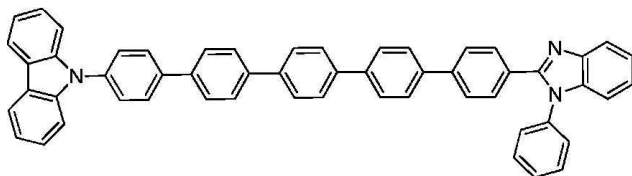
[0018]

1-(1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)-[4'-페닐(나프탈렌-1-일)아미노] 펜타(para-페닐레닐)



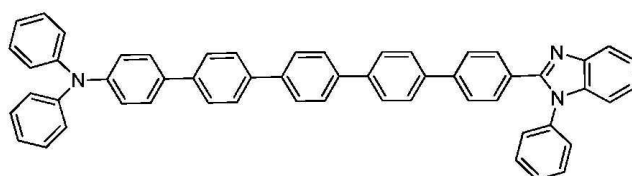
[0019]

[0020] 1-(1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)-[4^e-페닐(나프탈렌-2-일)아미노]펜타(*para*-페닐레닐)



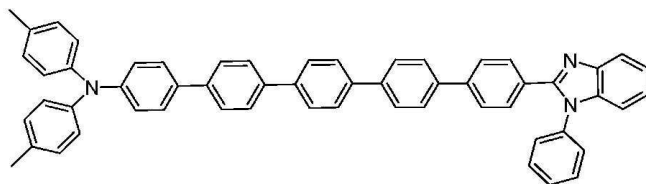
[0021]

[0022] 1-(1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)-[4^e-(카르바졸-9-일)아미노]펜타(*para*-페닐레닐)



[0023]

[0024] 1-(1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)-[4^e-디페닐아미노]펜타(*para*-페닐레닐)



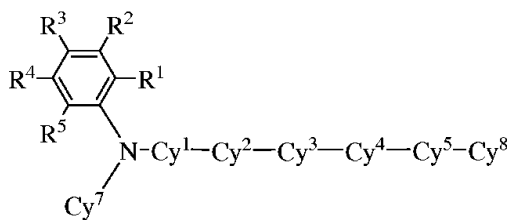
[0025]

[0026] 1-(1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)-[4^e-디(4-메틸페닐)아미노]펜타(*para*-페닐레닐)

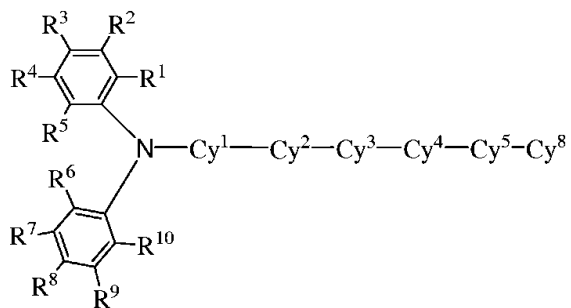
[0027] 본원에서 사용되는 바와 같이, 용어 "알킬"은 업계에서 일반적으로 이해하는 통상적 의미를 가지며, 2중 또는 3중 결합을 함유하지 않는 탄소 및 수소로 구성된 부분을 포함할 수 있다. 알킬은 선형 알킬, 분지형 알킬, 시클로알킬, 또는 이들의 조합일 수 있고, 일부 실시양태에서는 1~35개의 탄소 원자를 함유할 수 있다. 일부 실시양태에서, 알킬은 C₁₋₁₀ 선형 알킬, 예컨대 메틸(-CH₃), 에틸(-CH₂CH₃), n-프로필(-CH₂CH₂CH₃), n-부틸(-CH₂CH₂CH₂CH₃), n-펜틸(-CH₂CH₂CH₂CH₂CH₃), n-헥실(-CH₂CH₂CH₂CH₂CH₂CH₃) 등; C₃₋₁₀ 분지형 알킬, 예컨대 C₃H₇(예컨대 이소프로필), C₄H₉(예컨대 분지형 부틸 이성질체), C₅H₁₁(예컨대 분지형 펜틸 이성질체), C₆H₁₃(예컨대 분지형 헥실 이성질체), C₇H₁₅(예컨대 헵틸 이성질체) 등; C₃₋₁₀ 시클로알킬, 예컨대 C₃H₅(예컨대 시클로프로필), C₄H₇(예를 들어 시클로부틸 이성질체, 예컨대 시클로부틸, 메틸시클로프로필 등), C₅H₉(예를 들어 시클로펜틸 이성질체, 예컨대 시클로펜틸, 메틸시클로부틸, 디메틸시클로프로필 등), C₆H₁₁(예컨대 시클로헥실 이성질체), C₇H₁₃(예컨대 시클로헵틸 이성질체) 등; 등을 포함할 수 있다. 일부 실시양태에서, 알킬은 2 이상의 구조적 특징기에 부착된 결합기일 수 있으며, 예컨대 알킬이 결합 치환기이면, 이하에 더욱 상세히 기술하는 바와 같이 Cy₁, Cy₂ 및 이 결합 치환기가 축합 3환 고리계를 형성할 수 있다.

[0028] 본원에서 사용하는 바와 같이, 용어 "알콕시"는 -O-알킬, 예컨대 -OCH₃, -OC₂H₅, -OC₃H₇(예를 들어 프로폭시 이성질체, 예컨대 이소프로폭시, n-프로폭시 등), -OC₄H₉(예컨대 부티옥시 이성질체), -OC₅H₁₁(예컨대 펜톡시 이성질체), -OC₆H₁₃(예컨대 헥옥시 이성질체), -OC₇H₁₅(예컨대 헵톡시 이성질체) 등을 포함한다.

[0029] 화학식 1은, 화학식 2~24로 나타내는 것과 같은 화합물들을 포함한다.

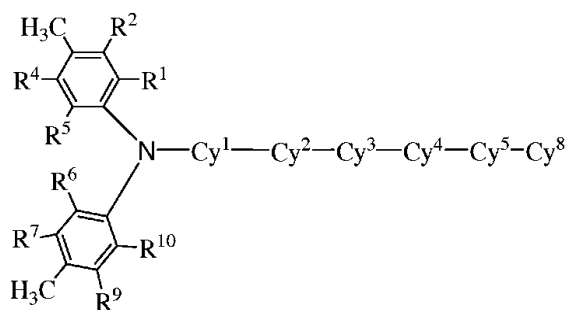


화학식 2

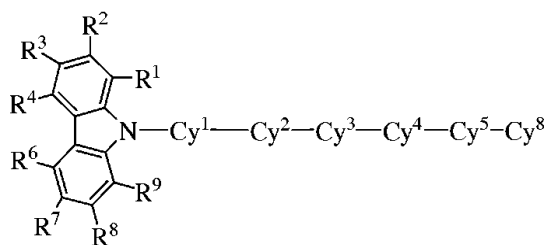


화학식 3

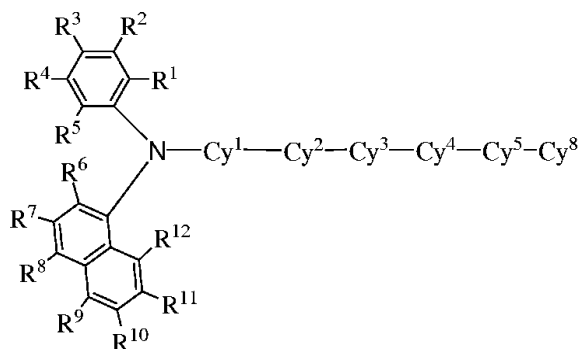
[0030]



화학식 4

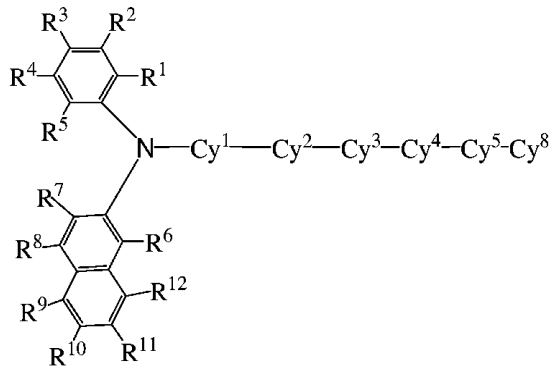


화학식 5

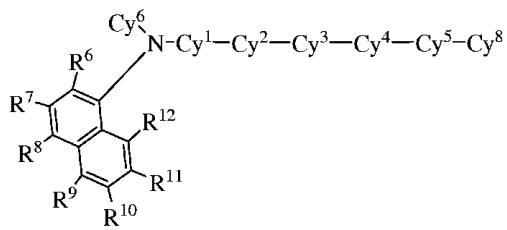


화학식 6

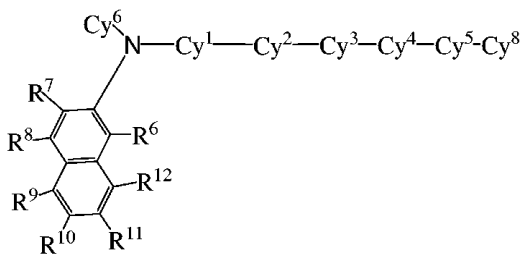
[0031]



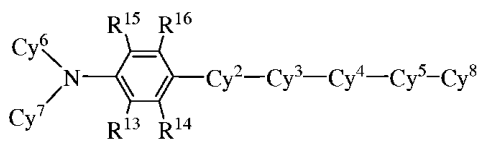
화학식 7



화학식 8

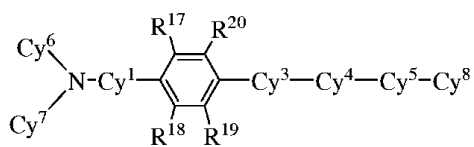


화학식 9

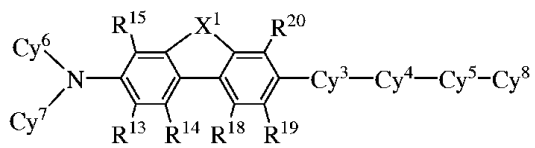


화학식 10

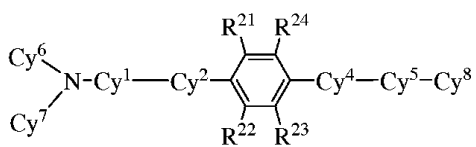
[0032]



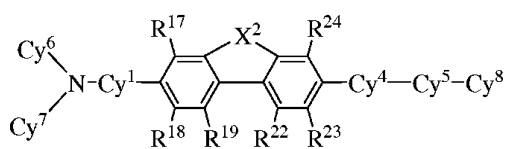
화학식 11



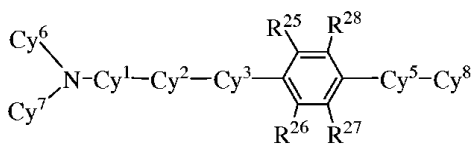
화학식 12



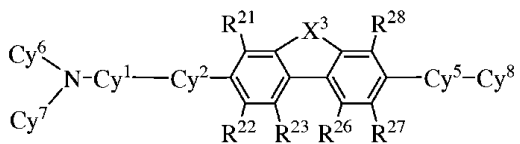
화학식 13



화학식 14

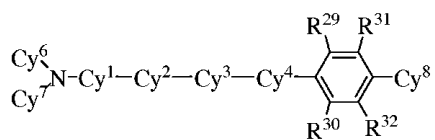


화학식 15

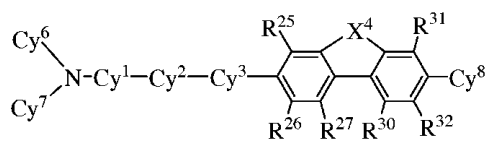


화학식 16

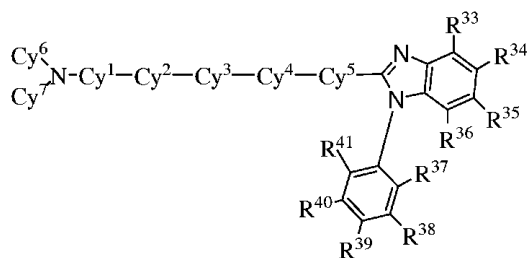
[0033]



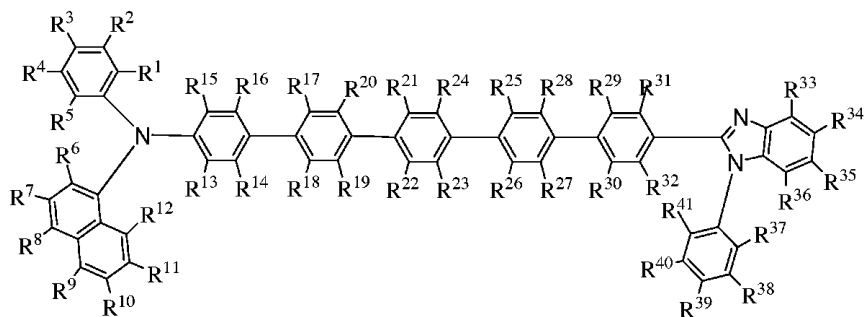
화학식 17



화학식 18

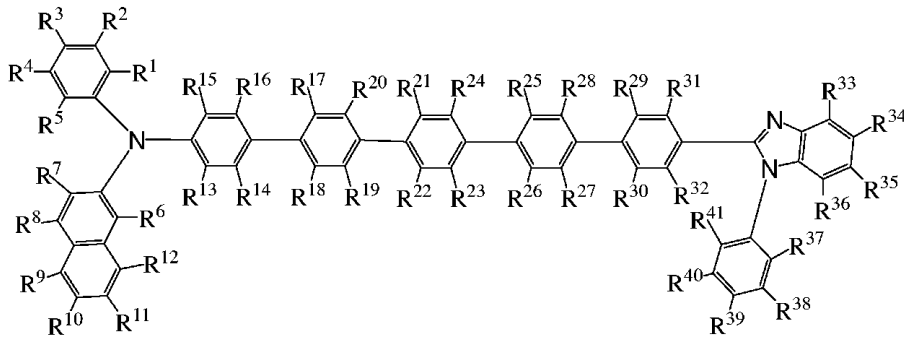


화학식 19

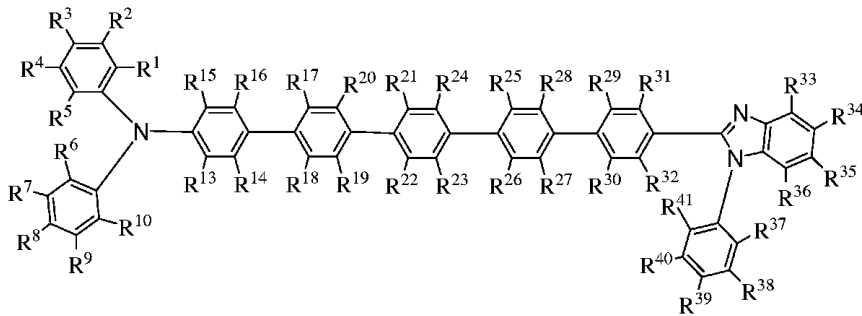


화학식 20

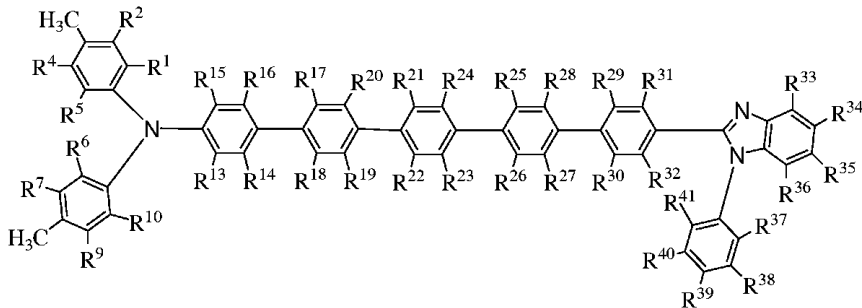
[0034]



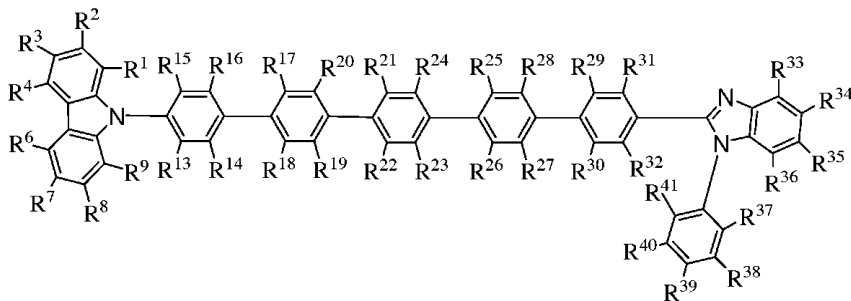
화학식 21



화학식 22



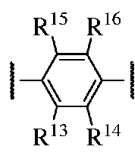
화학식 23



화학식 24

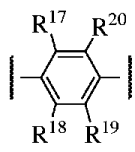
본원에서 임의의 관련 화학식 또는 구조 설명에 있어서, Cy^1 , Cy^2 , Cy^3 , Cy^4 및 Cy^5 는 독립적으로, 임의로 치환된 *p*-페닐렌일 수 있다. 당업자들은, 인접한 5개의 *p*-페닐렌 부분을 갖는 화합물의 합성이, 확실한 이득도 없이 상당한 기술적 및 합성적 어려움을 보임을 쉽게 인식할 것이다. 따라서, 본원에 제공된 지침을 배제하고, 당업자들은 이러한 분자 구성을 회피하는 경향이 있다. 일부 실시양태에서, *p*-페닐렌이 치환되는 경우, 이는 1개,

2개, 3개 또는 4개의 치환기를 가질 수 있다. 일부 실시양태에서, *p*-페닐렌 상의 치환기 일부 또는 전부는: 0개 ~ 10개의 탄소 원자와, O, N, S, F, Cl, Br 및 I에서 독립적으로 선택되는 0개 ~ 10개의 헤테로 원자; 및/또는 15 g/mol ~ 500 g/mol의 분자량을 가질 수 있다. 예를 들면, 상기 치환기는 C₁₋₁₀ 알킬, 예컨대 CH₃, C₂H₅, C₃H₇, 환형 C₃H₅, C₄H₉, 환형 C₄H₇, C₅H₁₁, 환형 C₅H₉, C₆H₁₃, 환형 C₆H₁₁ 등; C₁₋₁₀ 알콕시; 할로, 예컨대 F, Cl, Br, I; OH; CN; NO₂; C₁₋₆ 플루오로알킬, 예컨대 CF₃, CF₂H, C₂F₅ 등; C₁₋₁₀ 에스테르, 예컨대 -O₂CCH₃, -CO₂CH₃, -O₂CC₂H₅, -CO₂C₂H₅, -O₂C-페닐, -CO₂-페닐 등; C₁₋₁₀ 케톤, 예컨대 -COCH₃, -COC₂H₅, -COC₃H₇, -CO-페닐 등; 또는 C₁₋₁₀ 아민, 예컨대 NH₂, NH(CH₃), N(CH₃)₂, N(CH₃)C₂H₅ 등일 수 있다. 일부 실시양태에서, *p*-페닐렌은 C₁₋₆ 알킬 및 F에서 독립적으로 선택되는 1개 또는 2개의 치환기로 임의로 치환된다.



[0038] 일부 실시양태에서, Cy¹은: 일 수 있다.

[0039] 일부 실시양태에서, Cy¹은 비치환된다.

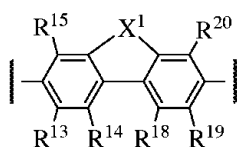


[0040] 일부 실시양태에서, Cy²는: 일 수 있다.

[0041] 일부 실시양태에서, Cy²는 비치환된다.

[0042] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조적 특징기, 예컨대 화학식 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 13, 15, 16, 17, 18 및 19에 있어서, 일부 실시양태에서는 Cy¹ 및 Cy²가 비치환된다.

[0043] 일부 실시양태에서, Cy¹과 Cy²가 결합 치환기를 공유하여, Cy¹, Cy² 및 그 결합 치환기가 축합 3환 고리계를 형성할 수 있다. 예를 들면, -Cy¹-Cy²-는:

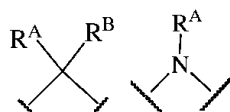


[0044]

[0045] 일 수 있다.

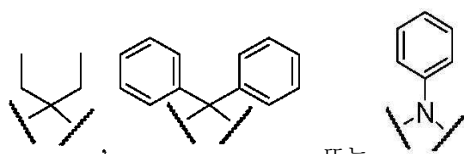
[0046] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조 설명에 있어서, X¹은 Cy¹을 Cy²에 결합시키는 임의의 치환기일 수 있다. 일부 실시양태에서, Cy¹을 Cy²에 결합시키는 치환기는: 0개 ~ 15개의 탄소 원자와, O, N, S, F, Cl, Br 및 I에서 독립적으로 선택되는 0개 ~ 10개의 헤테로 원자; 및/또는 15 g/mol ~ 500 g/mol의 분자량을 가질 수 있다.

[0047] 일부 실시양태에서, X¹은:

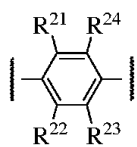


[0048] , -O- 또는 -S-일 수 있다.

[0049] 일부 실시양태에서, X¹은:



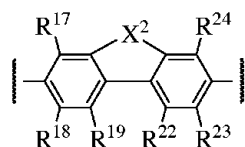
[0050] 또는 일 수 있다.



[0051] 일부 실시양태에서, Cy³는: 일 수 있다.

[0052] 일부 실시양태에서, Cy³는 비치환된다.

[0053] 일부 실시양태에서, Cy²와 Cy³가 결합 치환기를 공유하여, Cy², Cy³ 및 그 결합 치환기가 축합 3환 고리계를 형성할 수 있다. 예를 들면, -Cy²-Cy³-는:

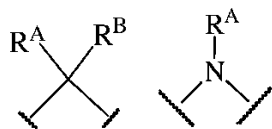


[0054]

[0055] 일 수 있다.

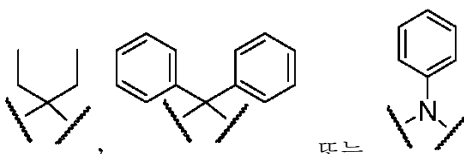
[0056] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조 설명에 있어서, X²는 Cy²를 Cy³에 결합시키는 임의의 치환기일 수 있다. 일부 실시양태에서, Cy²를 Cy³에 결합시키는 치환기는: 0개 ~ 15개의 탄소 원자와, O, N, S, F, Cl, Br 및 I에서 독립적으로 선택되는 0개 ~ 10개의 헤테로 원자; 및/또는 15 g/mol ~ 500 g/mol의 분자량을 가질 수 있다.

[0057] 일부 실시양태에서, X²는:

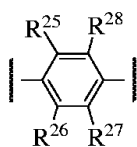


[0058] , -O- 또는 -S-일 수 있다.

[0059] 일부 실시양태에서, X²는:



[0060] 또는 일 수 있다.



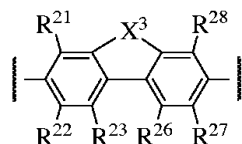
[0061] 일부 실시양태에서, Cy⁴는: 일 수 있다.

[0062] 일부 실시양태에서, Cy⁴는 비치환된다.

[0063] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조적 특징기, 예컨대 화학식 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 17 및 19에 있어서, 일부 실시양태에서는 Cy³ 및 Cy⁴가 비치환된다.

[0064] 일부 실시양태에서, Cy³와 Cy⁴가 결합 치환기를 공유하여, Cy³, Cy⁴ 및 그 결합 치환기가 축합 3환 고리계를 형

성할 수 있다. 예를 들면, $-\text{Cy}^3-\text{Cy}^4-$ 는:



[0065]

일 수 있다.

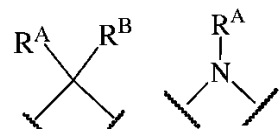
[0066]

상기 임의의 관련 화학식 또는 구조 설명에 있어서, X^3 는 Cy^3 를 Cy^4 에 결합시키는 임의의 치환기일 수 있다. 일부 실시양태에서, Cy^3 를 Cy^4 에 결합시키는 치환기는: 0개 ~ 15개의 탄소 원자와, O, N, S, F, Cl, Br 및 I에서 독립적으로 선택되는 0개 ~ 10개의 헤테로 원자; 및/또는 15 g/mol ~ 500 g/mol의 분자량을 가질 수 있다.

[0067]

일부 실시양태에서, X^3 는:

[0068]

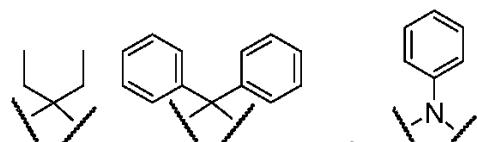


[0069]

, -O- 또는 -S-일 수 있다.

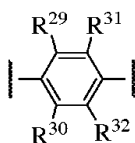
일부 실시양태에서, X^3 는:

[0070]



[0071]

또는 일 수 있다.



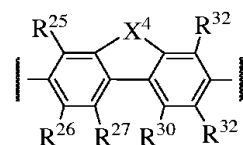
[0072]

일부 실시양태에서, Cy^5 는: 일 수 있다.

일부 실시양태에서, Cy^5 는 비치환된다.

[0073]

일부 실시양태에서, Cy^4 와 Cy^5 가 결합 치환기를 공유하여, Cy^4 , Cy^5 및 그 결합 치환기가 축합 3환 고리계를 형성할 수 있다. 예를 들면, $-\text{Cy}^4-\text{Cy}^5-$ 는:



[0075]

일 수 있다.

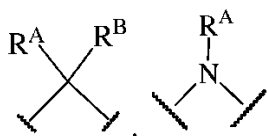
[0076]

상기 임의의 관련 화학식 또는 구조 설명에 있어서, X^4 는 Cy^4 를 Cy^5 에 결합시키는 치환기일 수 있다. 일부 실시양태에서, Cy^4 를 Cy^5 에 결합시키는 치환기는: 0개 ~ 15개의 탄소 원자와, O, N, S, F, Cl, Br 및 I에서 독립적으로 선택되는 0개 ~ 10개의 헤테로 원자; 및/또는 15 g/mol ~ 500 g/mol의 분자량을 가질 수 있다.

[0077]

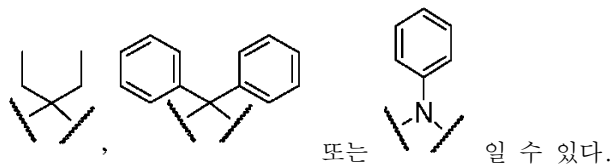
일부 실시양태에서, X^4 는:

[0078]



[0079] , -O- 또는 -S-일 수 있다.

[0080] 일부 실시양태에서, X^4 는:



[0081] 일 수 있다.

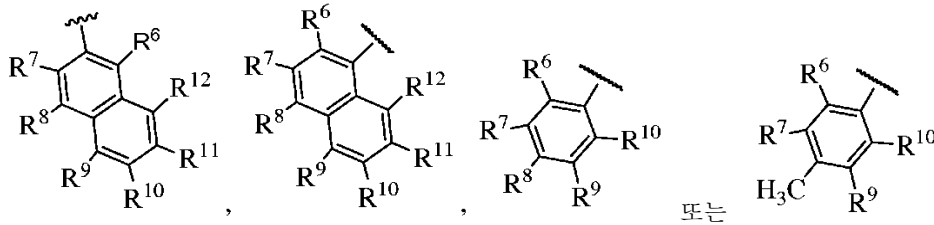
[0082] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조 설명에 있어서, Cy^6 는 임의로 치환된 페닐일 수 있다. 일부 실시양태에서, 페닐이 치환되는 경우, 이는 1개, 2개, 3개, 4개 또는 5개의 치환기를 가질 수 있다. 임의의 치환기가 페닐 상에 포함될 수 있다. 일부 실시양태에서, 페닐 상의 치환기 일부 또는 전부는: 0개 ~ 15개의 탄소 원자와, O, N, S, F, Cl, Br 및 I에서 독립적으로 선택되는 0개 ~ 10개의 헤테로 원자; 및/또는 15 g/mol ~ 500 g/mol의 분자량을 가질 수 있다. 예를 들면, 상기 치환기는 C_{1-10} 알킬, 예컨대 CH_3 , C_2H_5 , C_3H_7 , 환형 C_3H_5 , C_4H_9 , 환형 C_4H_7 , C_5H_{11} , 환형 C_5H_9 , C_6H_{13} , 환형 C_6H_{11} 등; C_{1-10} 알콕시; 할로, 예컨대 F, Cl, Br, I; OH; CN; NO_2 ; C_{1-6} 플루오로알킬, 예컨대 CF_3 , CF_2H , C_2F_5 등; C_{1-10} 에스테르, 예컨대 $-O_2CCH_3$, $-CO_2CH_3$, $-O_2CC_2H_5$, $-CO_2C_2H_5$, $-O_2C$ -페닐, $-CO_2$ -페닐 등; C_{1-10} 케톤, 예컨대 $-COCH_3$, $-COC_2H_5$, $-COC_3H_7$, $-CO$ -페닐 등; 또는 C_{1-10} 아민, 예컨대 NH_2 , $NH(CH_3)$, $N(CH_3)_2$, $N(CH_3)C_2H_5$, NH-페닐 등일 수 있다. 일부 실시양태에서, 페닐은 C_{1-6} 알킬 및 F에서 독립적으로 선택되는 1개, 2개 또는 3개의 치환기로 임의로 치환된다. 일부 실시양태에서, Cy^6 은 비치환된다.



[0083] 일부 실시양태에서, Cy^6 은: 일 수 있다.

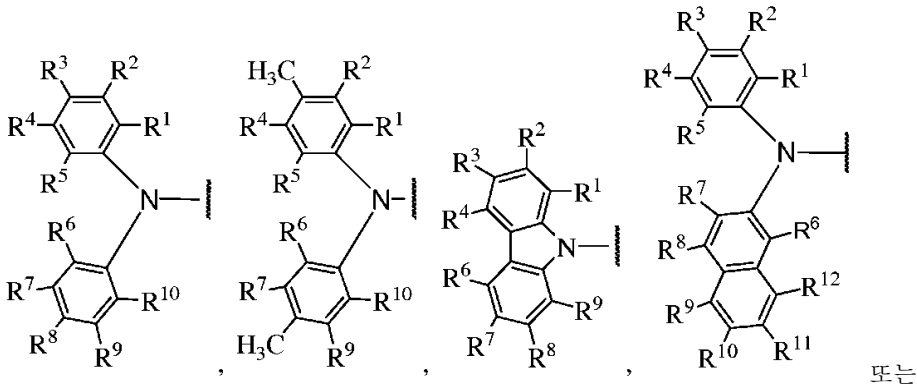
[0084] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조 설명에 있어서, Cy^7 은 임의로 치환된 페닐 또는 임의로 치환된 나프탈레닐일 수 있으며, 여기서 Cy^6 과 Cy^7 이 임의로 함께 결합하여 N을 포함하는 축합 3환 고리계를 형성할 수 있다. 일부 실시양태에서, 페닐이 치환되는 경우, 이는 1개, 2개, 3개, 4개 또는 5개의 치환기를 가질 수 있다. 일부 실시양태에서, 나프탈레닐이 치환되는 경우, 이는 1개, 2개, 3개, 4개, 5개, 6개 또는 7개의 치환기를 가질 수 있다. 임의의 치환기가 페닐 또는 나프탈레닐 상에 포함될 수 있다. 일부 실시양태에서, 페닐 또는 나프탈레닐 상의 치환기 일부 또는 전체는: 0개 ~ 15개의 탄소 원자와, O, N, S, F, Cl, Br 및 I에서 독립적으로 선택되는 0개 ~ 10개의 헤테로 원자; 및/또는 15 g/mol ~ 500 g/mol의 분자량을 가질 수 있다. 예를 들면, 상기 치환기는 C_{1-10} 알킬, 예컨대 CH_3 , C_2H_5 , C_3H_7 , 환형 C_3H_5 , C_4H_9 , 환형 C_4H_7 , C_5H_{11} , 환형 C_5H_9 , C_6H_{13} , 환형 C_6H_{11} 등; C_{1-10} 알콕시; 할로, 예컨대 F, Cl, Br, I; OH; CN; NO_2 ; C_{1-6} 플루오로알킬, 예컨대 CF_3 , CF_2H , C_2F_5 등; C_{1-10} 에스테르, 예컨대 $-O_2CCH_3$, $-CO_2CH_3$, $-O_2CC_2H_5$, $-CO_2C_2H_5$, $-O_2C$ -페닐, $-CO_2$ -페닐, 등; C_{1-10} 케톤, 예컨대 $-COCH_3$, $-COC_2H_5$, $-COC_3H_7$, $-CO$ -페닐 등; 또는 C_{1-10} 아민, 예컨대 NH_2 , $NH(CH_3)$, $N(CH_3)_2$, $N(CH_3)C_2H_5$ 등일 수 있다. 일부 실시양태에서, 페닐 또는 나프탈레닐은 C_{1-6} 알킬 및 F에서 독립적으로 선택되는 1개, 2개 또는 3개의 치환기로 임의로 치환된다. 일부 실시양태에서, Cy^7 은 비치환된다.

[0085] 일부 실시양태에서, Cy^7 은:



일 수 있다.

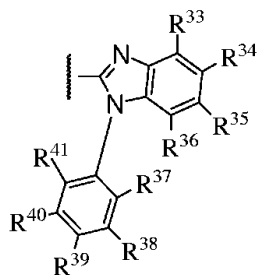
일부 실시양태에서, 은:



일 수 있다.

상기 임의의 관련 화학식 또는 구조적 특성기, 예컨대 화학식 1, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18 및 19에 있어서, 일부 실시양태에서는 Cy^6 및 Cy^7 이 비치환된다.

상기 임의의 관련 화학식 또는 구조 설명에 있어서, Cy^8 은 임의로 치환된 1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일일 수 있다. 일부 실시양태에서, 1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-일이 치환되는 경우, 이는 1개, 2개, 3개, 4개, 5개, 6개, 7개, 8개 또는 9개의 치환기를 가질 수 있다. 임의의 치환기가 포함될 수 있다. 일부 실시양태에서, 페닐상의 치환기 일부 또는 전부는: 0개 ~ 10개의 탄소 원자와, O, N, S, F, Cl, Br 및 I에서 독립적으로 선택되는 0개 ~ 10개의 헤테로 원자; 및/또는 15 g/mol ~ 500 g/mol의 분자량을 가질 수 있다. 예를 들면, 상기 치환기는 C_{1-10} 알킬, 예컨대 CH_3 , C_2H_5 , C_3H_7 , 환형 C_3H_5 , C_4H_9 , 환형 C_4H_7 , C_5H_{11} , 환형 C_5H_9 , C_6H_{13} , 환형 C_6H_{11} 등; C_{1-10} 알콕시; 할로, 예컨대 F, Cl, Br, I; OH; CN; NO_2 ; C_{1-6} 플루오로알킬, 예컨대 CF_3 , CF_2H , C_2F_5 등; C_{1-10} 에스테르, 예컨대 $-O_2CCH_3$, $-CO_2CH_3$, $-O_2CC_2H_5$, $-CO_2C_2H_5$, $-O_2C$ -페닐, $-CO_2$ -페닐 등; C_{1-10} 케톤, 예컨대 $-COCH_3$, $-COC_2H_5$, $-COC_3H_7$, $-CO$ -페닐 등; 또는 C_{1-10} 아민, 예컨대 NH_2 , $NH(CH_3)$, $N(CH_3)_2$, $N(CH_3)C_2H_5$ 등일 수 있다. 일부 실시양태에서, Cy^8 은 C_{1-6} 알킬 및 F에서 독립적으로 선택되는 1개, 2개 또는 3개의 치환기로 임의로 치환된다. 일부 실시양태에서, Cy^8 은 비치환된다.



[0093] 일부 실시양태에서, Cy^8 은: 일 수 있다.

[0094] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조적 특성기, 예컨대 화학식 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15 및 16에 있어서, 일부 실시양태에서는 Cy^5 및 Cy^8 이 비치환된다.

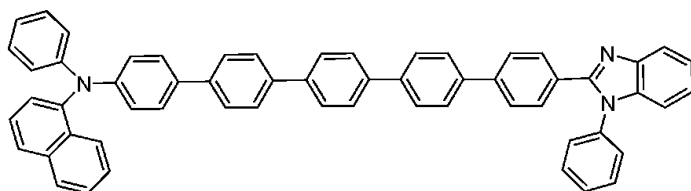
[0095] 본원에서 임의의 관련 화학식 또는 구조 설명에 있어서, 각각의 R^A 는 독립적으로, H; C_{1-3} 알킬, 할로, OH 또는 C_{1-3} 알콕시에서 선택되는 1개, 2개, 3개, 4개 또는 5개의 치환기로 임의로 치환된 페닐; 또는 화학식 C_aH_{2a+1} (여기서, a는 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 또는 12임), 예컨대 CH_3 , C_2H_5 , C_3H_7 , C_4H_9 , C_5H_{11} , C_6H_{13} , C_7H_{15} , C_8H_{17} , C_9H_{19} , $C_{10}H_{21}$ 등을 갖는 선형 또는 분지형 알킬, 또는 화학식 C_bH_{2b-1} (여기서, b는 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 또는 12임), 예컨대 C_3H_5 , C_4H_7 , C_5H_9 , C_6H_{11} , C_7H_{13} , C_8H_{15} , C_9H_{17} , $C_{10}H_{19}$ 등을 갖는 시클로알킬을 포함하는 C_{1-12} 알킬일 수 있다.

[0096] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조 설명에 있어서, 각각의 R^B 는 독립적으로, H; C_{1-3} 알킬, 할로, OH 또는 C_{1-3} 알콕시에서 선택되는 1개, 2개, 3개, 4개 또는 5개의 치환기로 임의로 치환된 페닐; 또는 화학식 C_aH_{2a+1} [여기서, a는 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 또는 12임], 예컨대 CH_3 , C_2H_5 , C_3H_7 , C_4H_9 , C_5H_{11} , C_6H_{13} , C_7H_{15} , C_8H_{17} , C_9H_{19} , $C_{10}H_{21}$ 등을 갖는 선형 또는 분지형 알킬, 또는 화학식 C_bH_{2b-1} [여기서, b는 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 또는 12임], 예컨대 C_3H_5 , C_4H_7 , C_5H_9 , C_6H_{11} , C_7H_{13} , C_8H_{15} , C_9H_{17} , $C_{10}H_{19}$ 등을 갖는 시클로알킬을 포함하는 C_{1-12} 알킬일 수 있다.

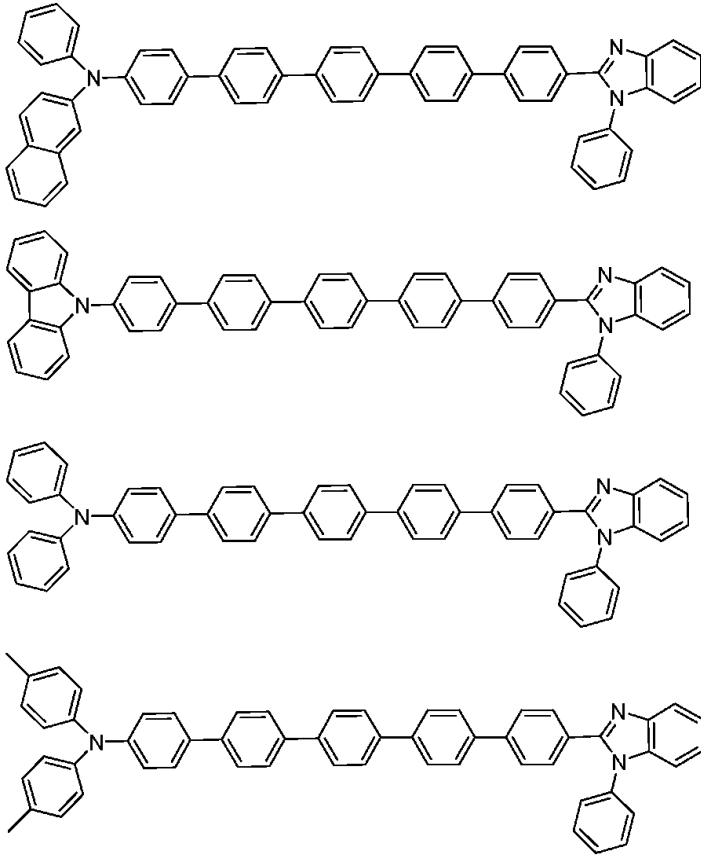
[0097] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조 설명에 있어서, $R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}, R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22}, R^{23}, R^{24}, R^{25}, R^{26}, R^{27}, R^{28}, R^{29}, R^{30}, R^{31}, R^{32}, R^{33}, R^{34}, R^{35}, R^{36}, R^{37}, R^{38}, R^{39}$ 및 R^{41} ("R¹⁻⁴¹")는 독립적으로, H 또는 임의의 치환기, 예컨대 0개 ~ 6개의 탄소 원자와, O, N, S, F, Cl, Br 및 I에서 독립적으로 선택되는 0개 ~ 5개의 헤테로 원자를 갖는 치환기(여기서, 치환기는 15 g/mol ~ 300 g/mol의 분자량을 가짐)일 수 있다. R^{1-41} 중 어느 하나의 몇몇 비제한 예는 독립적으로 R^A , F, Cl, CN, OR^A , CF_3 , NO_2 , $NR^A R^B$, COR^A , CO_2R^A , $OCOR^A$ 등을 포함할 수 있다. 일부 실시양태에서, R^{1-41} 중 어느 하나는 독립적으로 H, C_{1-6} 알킬, 예컨대 메틸, 에틸, 프로필 이성질체, 시클로프로필, 부틸 이성질체, 시클로부틸 이성질체, 펜틸 이성질체, 시클로펜틸 이성질체, 헥실 이성질체, 시클로헥실 이성질체 등, 또는 C_{1-6} 알콕시, 예컨대 -O-메틸, -O-에틸, -O-프로필의 이성질체, -O-시클로프로필, -O-부틸의 이성질체, -O-시클로부틸의 이성질체, -O-펜틸의 이성질체, -O-시클로펜틸의 이성질체, -O-헥실의 이성질체, -O-시클로헥실의 이성질체 등일 수 있다. 일부 실시양태에서, R^{1-41} 중 어느 하나는 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필일 수 있다. 일부 실시양태에서, R^{1-41} 중 어느 하나는 H일 수 있다. 일부 실시양태에서, R^{1-41} 중 어느 하나는 독립적으로, 2 이상의 구조적 특성기에 부착되는 결합기일 수 있으며, 예컨대, R^{1-41} 중 어느 하나가 결합 치환기이면, 이하에 더욱 상세히 기술하는 바와 같이 Cy^1, Cy^2 및 이 결합 치환기가 축합 3환 고리계를 형성할 수 있다.

[0098] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조적 특성기, 예컨대 화학식 2, 3, 6, 7, 20, 21 및 22에 있어서, 일부 실시양태에서는 R^1, R^2, R^3, R^4 및 R^5 가 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필이다. 일부 실시양태에서 R^1, R^2, R^3, R^4 및 R^5 는 H이다.

- [0099] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조적 특성기, 예컨대 화학식 4 및 23에 있어서, 일부 실시양태에서는 R^1 , R^2 , R^4 및 R^5 가 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필이다. 일부 실시양태에서 R^1 , R^2 , R^4 및 R^5 는 H이다.
- [0100] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조적 특성기, 예컨대 화학식 6, 7, 8, 9, 20 및 21에 있어서, 일부 실시양태에서는 R^6 , R^7 , R^8 , R^9 , R^{10} , R^{11} 및 R^{12} 가 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필이다. 일부 실시양태에서 R^6 , R^7 , R^8 , R^9 , R^{10} , R^{11} 및 R^{12} 는 H이다.
- [0101] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조적 특성기, 예컨대 화학식 6, 7, 20 및 21에 있어서, 일부 실시양태에서는 R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 , R^7 , R^8 , R^9 , R^{10} , R^{11} 및 R^{12} 가 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필이다. 일부 실시양태에서, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 , R^7 , R^8 , R^9 , R^{10} , R^{11} 및 R^{12} 는 H이다.
- [0102] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조적 특성기, 예컨대 화학식 3 및 22에 있어서, 일부 실시양태에서는 R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^6 , R^7 , R^8 , R^9 및 R^{10} 이 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필이다. 일부 실시양태에서 R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^6 , R^7 , R^8 , R^9 및 R^{10} 은 H이다.
- [0103] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조적 특성기, 예컨대 화학식 10, 20, 21, 22, 23 및 24에 있어서, 일부 실시양태에서는 R^{13} , R^{14} , R^{15} 및 R^{16} 이 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필이다. 일부 실시양태에서 R^{13} , R^{14} , R^{15} 및 R^{16} 는 H이다.
- [0104] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조적 특성기, 예컨대 화학식 11, 20, 21, 22, 23 및 24에 있어서, 일부 실시양태에서는 R^{17} , R^{18} , R^{19} 및 R^{20} 가 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필이다. 일부 실시양태에서 R^{17} , R^{18} , R^{19} 및 R^{20} 는 H이다.
- [0105] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조적 특성기, 예컨대 화학식 13, 20, 21, 22, 23 및 24에 있어서, 일부 실시양태에서는 R^{21} , R^{22} , R^{23} 및 R^{24} 가 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필이다. 일부 실시양태에서 R^{21} , R^{22} , R^{23} 및 R^{24} 는 H이다.
- [0106] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조적 특성기, 예컨대 화학식 15, 20, 21, 22, 23 및 24에 있어서, 일부 실시양태에서는 R^{25} , R^{26} , R^{27} 및 R^{28} 이 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필이다. 일부 실시양태에서 R^{25} , R^{26} , R^{27} 및 R^{28} 은 H이다.
- [0107] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조적 특성기, 예컨대 화학식 17, 20, 21, 22, 23 및 24에 있어서, 일부 실시양태에서는 R^{29} , R^{30} , R^{31} 및 R^{32} 가 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필이다. 일부 실시양태에서 R^{29} , R^{30} , R^{31} 및 R^{32} 는 H이다.
- [0108] 상기 임의의 관련 화학식 또는 구조적 특성기, 예컨대 화학식 19, 20, 21, 22, 23 및 24에 있어서, 일부 실시양태에서는 R^{33} , R^{34} , R^{35} , R^{36} , R^{37} , R^{38} , R^{39} , R^{40} 및 R^{41} 이 독립적으로 H, F, 메틸, 에틸, 프로필 또는 이소프로필이다. 일부 실시양태에서 R^{33} , R^{34} , R^{35} , R^{36} , R^{37} , R^{38} , R^{39} , R^{40} 및 R^{41} 은 H이다.
- [0109] 일부 실시양태는 하기 화합물 중 하나를 포함할 수 있다:



[0110]



[0111]

[0112] 일부 실시양태는, 화학식 1~24 중 어느 하나의 화합물 또는 본원에 나타내거나 명명한 임의의 특정 화합물(이하, "주제 화합물"로 일컬음)을 포함하는 조성물을 포함한다. 주제 화합물을 포함하는 조성물은, 형광 화합물 또는 인광 화합물을 더 포함할 수 있으며, 유기 발광 장치와 같은 장치에서 발광에 유용할 수 있다.

[0113] 일부 실시양태에서, 유기 발광 장치는 주제 화합물을 포함한다. 예를 들면, 주제 화합물을 포함하는 발광층이 애노드와 캐소드 사이에 배치될 수 있다. 상기 장치는, 전자가 캐소드로부터 발광층으로 이동될 수 있고 정공이 애노드로부터 발광층으로 이동될 수 있도록 구성된다.

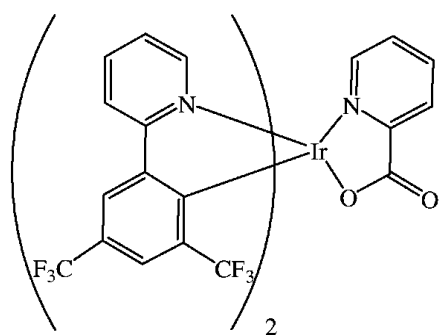
[0114] 주제 화합물은, 유기 발광 장치에서 높은 광안정성 및 열안정성을 가질 수 있다. 주제 화합물은 또한, 균형잡힌 정공 및 전자 주입률과 이동성을 가질 수 있다. 이는 OLED 장치에 높은 효율 및/또는 긴 수명을 제공할 수 있다. 주제 화합물은 또한, 화합물의 필름 형성을 용이하게 할 수 있는 비정질 고체를 형성할 수 있다.

[0115] 애노드는, 종래의 재료, 예컨대 금속, 혼합 금속, 합금, 금속 산화물 또는 혼합 금속 산화물, 전도성 폴리머 및/또는 무기 물질, 예컨대 탄소 나노튜브(CNT)를 포함하는 층일 수 있다. 적합한 금속의 예로는, 1족 금속, 4족, 5족, 6족의 금속, 및 8족 ~ 10족 전이 금속이 있다. 애노드층을 광전송성(light-transmitting)으로 하는 경우, 10족 및 11족의 금속, 예컨대 Au, Pt 및 Ag, 또는 이들의 합금; 또는 12족, 13족 및 14 금속의 혼합 금속 산화물, 예컨대 인듐-주석-산화물(ITO), 인듐-아연-산화물(IZO) 등이 사용될 수 있다. 일부 실시양태에서, 애노드층은 폴리아닐린과 같은 유기 물질일 수 있다. 폴리아닐린의 사용은 문헌["Flexible light-emitting diodes made from soluble conducting polymer," Nature, vol. 357, pp. 477-479 (1992년 6월 11일)]에 기술되어 있다. 일부 실시양태에서, 애노드층은 약 1 nm ~ 약 1000 nm 범위의 두께를 가질 수 있다.

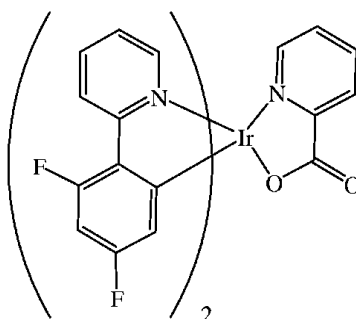
[0116] 캐소드는, 애노드층보다 낮은 일함수를 갖는 물질을 포함하는 층일 수 있다. 캐소드층에 적합한 재료의 예로는, 1족의 알칼리 금속; 2족 금속; 희토류 원소, 란타나이드 및 악티나이드를 포함하는 12족 금속; 알루미늄, 인듐, 칼슘, 바륨, 사마륨 및 마그네슘과 같은 물질; 및 이들의 조합에서 선택되는 것들이 있다. 동작 전압을 낮추기 위해서, Li 함유 유기 금속 화합물, LiF 및 Li₂O도 유기층과 캐소드층 사이에 배치될 수 있다. 적합한 낮은 일함수 금속에는 Al, Ag, Mg, Ca, Cu, Mg/Ag, LiF/Al, CsF, CsF/Al 또는 이들의 합금이 있으나, 이에 한정되지 않는다. 일부 실시양태에서, 캐소드층은 약 1 nm ~ 약 1000 nm 범위의 두께를 가질 수 있다.

[0117] 일부 실시양태에서, 발광층은 발광 성분 및 호스트로서의 주체 화합물을 포함할 수 있다. 발광층 중의 호스트의 양은 변화할 수 있다. 한 실시양태에서, 발광층 중의 호스트의 양은 발광층의 약 1 중량% ~ 약 99.9 중량%의 범위이다. 다른 실시양태에서, 발광층 중의 호스트의 양은 발광층의 약 90 중량% ~ 약 99 중량%의 범위이다. 다른 실시양태에서, 발광층 중의 호스트의 양은 발광층의 약 97 중량%이다. 일부 실시양태에서, 발광 성분의 질량은 발광층의 약 0.1% ~ 약 10%, 약 1% ~ 약 5%, 또는 약 3%이다. 발광 성분은 형광 화합물 및/또는 인광 화합물일 수 있다.

[0118] 발광 성분은 이리듐 배위 화합물, 예컨대: 비스-[2-[3,5-비스(트리플루오로메틸)페닐]피리디나토-N,C2'}이리듐(III)-피콜리네이트; 비스(2-[4,6-디플루오로페닐]피리디나토-N,C2')이리듐(III) 피콜리네이트; 비스(2-[4,6-디플루오로페닐]피리디나토-N,C2')이리듐(아세틸아세토네이트); 이리듐(III) 비스(4,6-디플루오로페닐피리디나토)-3-(트리플루오로메틸)-5-(피리딘-2-일)-1,2,4-트리아졸레이트; 이리듐(III) 비스(4,6-디플루오로페닐피리디나토)-5-(피리딘-2-일)-1H-테트라졸레이트; 비스[2-(4,6-디플루오로페닐)피리디나토-N,C^{2'}]이리듐(III)테트라(1-피라졸릴)보레이트; 비스[2-(2'-벤조티에닐)-피리디나토-N,C3']이리듐(III)(아세틸아세토네이트); 비스[2-(2-페닐퀴놀릴)-N,C2']이리듐(III)(아세틸아세토네이트); 비스[(1-페닐이소퀴놀리나토-N,C2')]이리듐(III)(아세틸아세토네이트); 비스[(디벤조[f, h]퀴녹살리노-N,C2')]이리듐(III)(아세틸아세토네이트); 트리스(2,5-비스-2'-(9',9'-디헥실플루오렌)피리딘)이리듐(III); 트리스[1-페닐이소퀴놀리나토-N,C2']이리듐(III); 트리스[2-(2'-벤조티에닐)-피리디나토-N,C3']이리듐(III); 트리스[1-티오펜-2-일이소퀴놀리나토-N,C3']이리듐(III); 트리스[1-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)이소퀴놀리나토-(N,C3')]이리듐(III); 비스(2-페닐피리디나토-N,C2')이리듐(III)(아세틸아세토네이트) [Ir(ppy)₂(acac)]; 비스(2-(4-톨릴)피리디나토-N,C2')이리듐(III)(아세틸아세토네이트) [Ir(mppy)₂(acac)]; 비스(2-(4-tert-부틸)피리디나토-N,C2')이리듐(III)(아세틸아세토네이트) [Ir(t-Buppy)₂(acac)]; 트리스(2-페닐피리디나토-N,C2')이리듐(III) [Ir(ppy)₃]; 비스(2-페닐옥사졸리나토-N,C2')이리듐(III)(아세틸아세토네이트) [Ir(op)₂(acac)]; 트리스(2-(4-톨릴)피리디나토-N,C2')이리듐(III) [Ir(mppy)₃]; 비스[2-페닐벤조티아졸레이트-N,C2']이리듐(III)(아세틸아세토네이트); 비스[2-(4-tert-부틸페닐)벤조티아졸레이트-N,C2']이리듐(III)(아세틸아세토네이트); 비스[(2-(2'-티에닐)피리디나토-N,C3')]이리듐(III)(아세틸아세토네이트); 트리스[2-(9,9-디메틸플루오렌-2-일)피리디나토-(N,C3')]이리듐(III); 트리스[2-(9,9-디메틸플루오렌-2-일)피리디나토-(N,C3')]이리듐(III); 비스[5-트리플루오로메틸-2-[3-(N-페닐카르브졸릴)피리디나토-N,C2']]이리듐(III)(아세틸아세토네이트); (2-PhPyCz)₂Ir(III)(acac); 등을 포함할 수 있다.

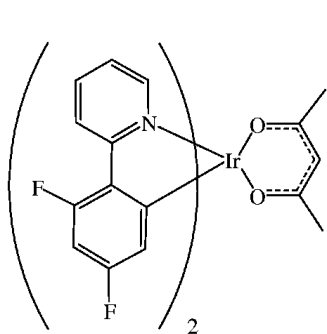


비스-[2-[3,5-비스
(트리플루오로메틸)페닐]
피리디나토-N,C2'}이리듐(III)-
피콜리네이트(Ir(CF₃ppy)₂(Pic)

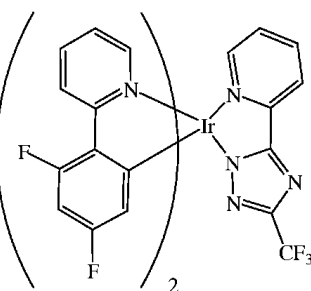


비스(2-[4,6-디플루오로페닐]피리디
나토-N,C2')이리듐(III) 피콜리네이트
[FIrPic]

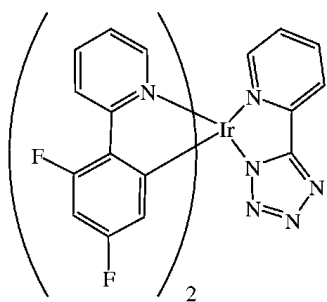
[0119]



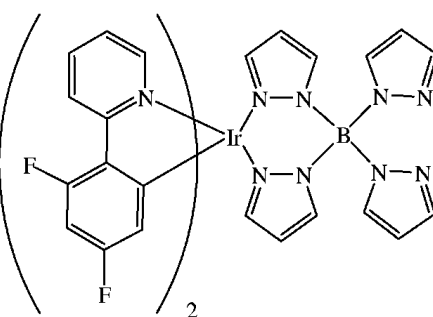
비스(2-[4,6-디플루오로페닐]피리디나토-N,C2')이리듐(아세틸아세토네이트)
[FIr(acac)]



이리듐 (III) 비스(4,6-디플루오로페닐피리디나토)-3-(트리플루오로메틸)-5-(피리딘-2-일)-1,2,4-트리아졸레이트 (Firtaz)

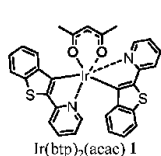


이리듐 (III) 비스(4,6-디플루오로페닐피리디나토)-5-(피리딘-2-일)-1H-테트라졸레이트 (Firn4)

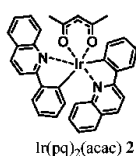


비스[2-(4,6-디플루오로페닐)피리디나토-N,C2']이리듐(III)테트라(1-피라졸릴)보레이트 (Fir6)

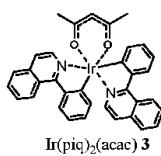
[0120]



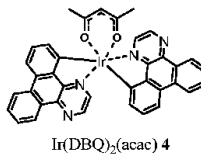
Ir(btp)₂(acac) 1



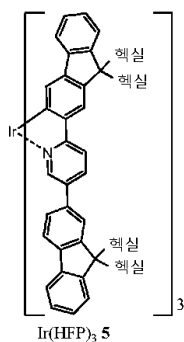
Ir(pq)₂(acac) 2



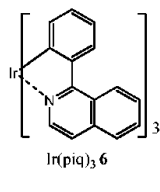
Ir(piq)₂(acac) 3



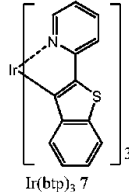
Ir(DBQ)₂(acac) 4



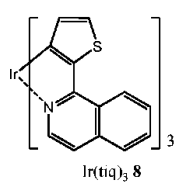
Ir(HFP)₃ 5



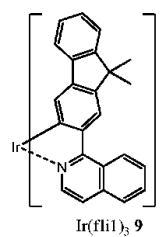
Ir(pi q)₃ 6



Ir(btp)₃ 7



Ir(ti q)₃ 8



Ir(fli)₃ 9

[0121]

[0122]

[0123]

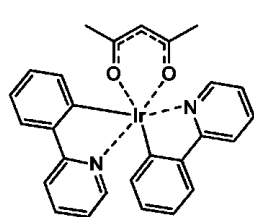
[0124]

[0125]

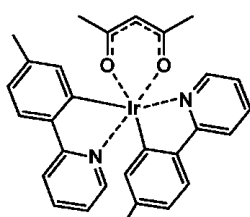
[0126]

1. (Btp)₂Ir(III)(acac); 비스[2-(2'-벤조티에닐)-피리디나토-N,C3'] 이리듐 (III)(아세틸아세토네이트)
2. (Pq)₂Ir(III)(acac); 비스[(2-페닐퀴놀릴)-N,C2']이리듐 (III) (아세틸아세토네이트)
3. (Piq)₂Ir(III)(acac); 비스[(1-페닐이소퀴놀리나토-N,C2')]
4. (DBQ)₂Ir(acac); 비스[(디벤조[f, h]퀴녹살리노-N,C2')]
5. [Ir(HFP)₃], 트리스(2,5-비스-2'-(9',9'-디헥실플루오렌)피리딘)이리듐 (III)

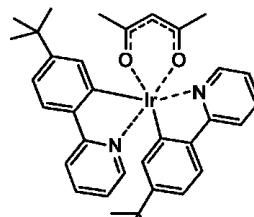
- [0127] 6. $\text{Ir}(\text{piq})_3$; 트리스[1-페닐이소퀴놀리나토-N,C2']이리듐 (III)
- [0128] 7. $\text{Ir}(\text{btp})_3$; 트리스-[2-(2'-벤조티에닐)-피리디나토-N,C3'] 이리듐 (III)
- [0129] 8. $\text{Ir}(\text{tiq})_3$, 트리스[1-티오펜-2-일이소퀴놀리나토-N,C3'] 이리듐 (III)
- [0130] 9. $\text{Ir}(\text{fliq})_3$; 트리스[1-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)이소퀴놀리나토-(N,C3')]이리듐 (III))



$\text{Ir}(\text{ppy})_2(\text{acac})$

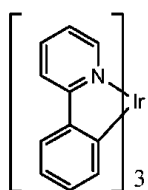


$\text{Ir}(\text{mppy})_2(\text{acac})$

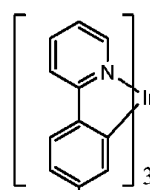


$\text{Ir}(\text{t-Buppy})_2(\text{acac})$

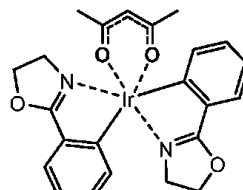
[0131]



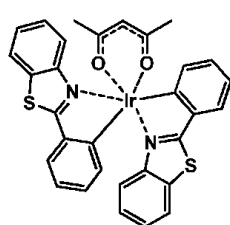
$\text{Ir}(\text{ppy})_3$



$\text{Ir}(\text{mppy})_3$

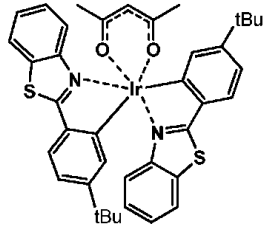


$\text{Ir}(\text{op})_2(\text{acac})$



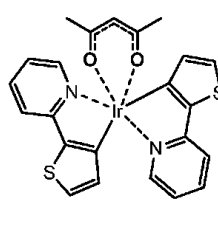
$(\text{bt})_2\text{Ir}(\text{III})(\text{acac})$

비스[2-페닐벤조
티아졸레이드-N,C2']
이리듐(III)(아세틸
아세토네이트)



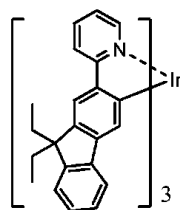
$(\text{t-bt})_2\text{Ir}(\text{III})(\text{acac})$

비스[2-(4-tert-부틸페닐)
벤조티아졸레이드-N,C2']
이리듐(III)(아세틸아세토네이트)



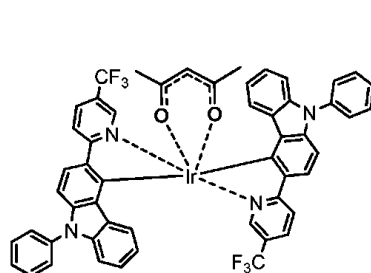
$(\text{thp})_2\text{Ir}(\text{III})(\text{acac})$

비스[(2-(2'-티에닐)
피리디나토-N,C3']
이리듐 (III)
(아세틸아세토네이트)



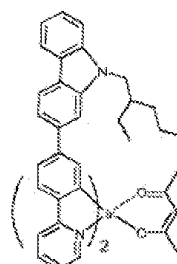
$[\text{Ir}(\text{Flpy})_3]$

트리스[2-(9,9-디메틸
플루오렌-2-일)
피리디나토-(N,C3')]
이리듐 (III)



$(\text{Cz-CF}_3)\text{Ir}(\text{III})(\text{acac})$

비스[5-트리플루오로메틸-2-
[3-(N-페닐카르보졸릴)피리디
나토-N,C2']이리듐(III)(아세틸
아세토네이트)



$(\text{2-PhPyCz})_2\text{Ir}(\text{III})(\text{acac})$

[0132]

- [0133] 발광층의 두께는 변화할 수 있다. 한 실시양태에서, 발광층은 약 1 nm ~ 약 150 nm 또는 약 200 nm의 범위의 두께를 갖는다.
- [0134] 일부 실시양태는 도 1에 의해 개략적으로 나타낸 바와 같은 구조를 가질 수 있다. 발광층(20)은 애노드(5)와 캐소드(35) 사이에 배치된다. 선택적인 전자 수송층(30)이 발광층(20)과 캐소드(35) 사이에 배치될 수 있다. 선택적인 정공 주입층(10)이 발광층(20)과 애노드(5) 사이에 배치될 수 있고, 선택적인 정공 수송층(15)이 정공 주입층(10)과 발광층(20) 사이에 배치될 수 있다.
- [0135] 정공 수송층은 하나 이상의 정공 수송 물질을 포함할 수 있다. 정공 수송 물질은, 방향족 치환 아민, 카르바졸, 폴리비닐카르바졸(PVK), 예컨대 폴리(9-비닐카르바졸); 폴리플루오렌; 폴리플루오렌 공중합체; 폴리(9,9-디-n-옥틸플루오렌-alt-벤조티아디아졸); 폴리(*para*페닐렌); 폴리[2-(5-시아노-5-메틸헥실옥시)-1,4-페닐렌]; 벤지딘; 페닐렌디아민; 프탈로시아닌 금속 착물; 폴리아세틸렌; 폴리티오펜; 트리페닐아민; 옥사디아졸; 구리 프탈로시아닌; 1,1-비스(4-비스(4-메틸페닐) 아미노페닐) 시클로헥산; 2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린; 3,5-비스(4-*tert*-부틸-페닐)-4-페닐[1,2,4]트리아졸; 3,4,5-트리페닐-1,2,3-트리아졸; 4,4',4'-트리스(3-메틸페닐페닐아미노)트리페닐아민(MTDATA); N,N'-비스(3-메틸페닐)N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD); 4,4'-비스[N-(나프탈렌)-N-페닐-아미노]비페닐(α -NPD); 4,4',4"-트리스(카르바졸-9-일)-트리페닐아민(TCTA); 4,4'-비스[N,N'-(3-톨릴)아미노]-3,3'-디메틸비페닐(HMTDP); 4,4'-N,N'-디카르바졸-비페닐(CBP); 1,3-N,N-디카르바졸-벤젠(mCP); 비스[4-(p,p'-디톨릴-아미노)페닐]디페닐실란(DTASi); 2,2'-비스(4-카르바졸릴페닐)-1,1'-비페닐(4CzBPB); N,N,N"-1,3,5-트리카르바졸로일벤젠(tCP); N,N'-비스(4-부틸페닐)-N,N'-비스(페닐)벤지딘; 등을 포함할 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0136] 정공 주입층은 임의의 적합한 정공 주입 물질을 포함할 수 있다. 적합한 정공 주입 물질의 예로는: 산화몰리브덴(MoO₃), 폴리티오펜 유도체, 예컨대 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜(PEDOT)/폴리스티렌 술폰산(PSS), 벤지딘 유도체, 예컨대 N,N,N',N'-테트라페닐벤지딘, 폴리(N,N'-비스(4-부틸페닐)-N,N'-비스(페닐)벤지딘), 트리페닐 아민 또는 페닐렌디아민 유도체, 예컨대 N,N'-비스(4-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)-1,4-페닐렌디아민, 4,4',4"-트리스(N-(나프탈렌-2-일)-N-페닐아미노)트리페닐아민, 옥사디아졸 유도체, 예컨대 1,3-비스(5-(4-디페닐아미노)페닐-1,3,4-옥사디아졸-2-일)벤젠, 폴리아세틸렌 유도체, 예컨대 폴리(1,2-비스-벤질티오-아세틸렌), 및 프탈로시아닌 금속 착물 유도체, 예컨대 프탈로시아닌 구리에서 선택되는 임의로 치환된 화합물이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0137] 전자 수송층은 하나 이상의 전자 수송 물질을 포함할 수 있다. 전자 수송 물질의 예로는, 2-(4-비페닐일)-5-(4-*tert*-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸(PBD); 1,3-비스(N,N-t-부틸-페닐)-1,3,4-옥사디아졸(OXD-7), 1,3-비스[2-(2,2'-비피리딘-6-일)-1,3,4-옥사디아조-5-일]벤젠; 3-페닐-4-(1'-나프탈레닐)-5-페닐-1,2,4-트리아졸(TAZ); 2,9-디메틸-4,7-디페닐-페난트롤린(바토쿠프로인 또는 BCP); 알루미늄 트리스(8-히드록시퀴놀레이트)(Alq₃); 및 1,3,5-트리스(2-N-페닐벤즈이미다졸릴)벤젠; 1,3-비스[2-(2,2'-비피리딘-6-일)-1,3,4-옥사디아조-5-일]벤젠(BPY-OXD); 3-페닐-4-(1'-나프탈레닐)-5-페닐-1,2,4-트리아졸(TAZ), 2,9-디메틸-4,7-디페닐-페난트롤린(바토쿠프로인 또는 BCP); 및 1,3,5-트리스[2-N-페닐벤즈이미다졸-z-일]벤젠(TPBI)을 들 수 있으나, 이에 한정되지 않는다. 한 실시양태에서, 전자 수송층은 알루미늄 퀴놀레이트(Alq₃), 2-(4-비페닐일)-5-(4-*tert*-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸(PBD), 페난트롤린, 퀴놀살린, 1,3,5-트리스[N-페닐벤즈이미다졸-z-일] 벤젠(TPBI), 또는 이들의 유도체 또는 조합물이다.
- [0138] 필요할 경우, 부가층이 발광 장치에 포함될 수 있다. 이들 부가층은 캐소드와 발광층 사이에 전자 주입층(EIL), 애노드와 발광층 사이에 정공 차단층(HBL), 및/또는 발광층과 애노드 및/또는 캐소드 사이에 여기자(exciton) 차단층(EBL)을 포함할 수 있다. 분리층 이외에, 이들 물질의 일부가 단일층으로 조합될 수 있다.
- [0139] 일부 실시양태에서, 발광 장치는 캐소드층과 발광층 사이에 전자 주입층을 포함할 수 있다. 전자 주입층에 포함될 수 있는 적합한 물질의 예로는: 불화리튬(LiF), 알루미늄 퀴놀레이트(Alq₃), 2-(4-비페닐일)-5-(4-*tert*-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸(PBD), 페난트롤린, 퀴놀살린, 1,3,5-트리스[N-페닐벤즈이미다졸-z-일] 벤젠(TPBI), 트리아진, 8-히드록시퀴놀린의 금속 킬레이트, 예컨대 트리스(8-히드록시퀴놀리네이트) 알루미늄, 및 금속 티옥시노이드 화합물, 예컨대 비스(8-퀴놀린티올레이트) 아연에서 선택되는 임의로 치환된 화합물이 있으나, 이에 한정되지 않는다. 한 실시양태에서, 전자 주입층은 알루미늄 퀴놀레이트(Alq₃), 2-(4-비페닐일)-5-(4-*tert*-부틸페

닐)-1,3,4-옥사디아졸(PBD), 페난트롤린, 퀴녹살린, 1,3,5-트리스[N-페닐벤즈이미다졸-z-일] 벤젠(TPBI), 또는 이들의 유도체 또는 조합물이다.

[0140] 일부 실시양태에서, 장치는, 예컨대 캐소드와 발광층 사이에 정공 차단층을 포함할 수 있다. 정공 차단층에 포함될 수 있는 여러 가지 적합한 정공 차단 물질이 당업자에게 공지되어 있다. 적합한 정공 차단 물질로는: 바토쿠프로인(BCP), 3,4,5-트리페닐-1,2,4-트리아졸, 3,5-비스(4-*tert*-부틸-페닐)-4-페닐-[1,2,4] 트리아졸, 2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린 및 1,1-비스(4-비스(4-메틸페닐)아미노페닐)-시클로헥산에서 선택되는 임의로 치환된 화합물이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

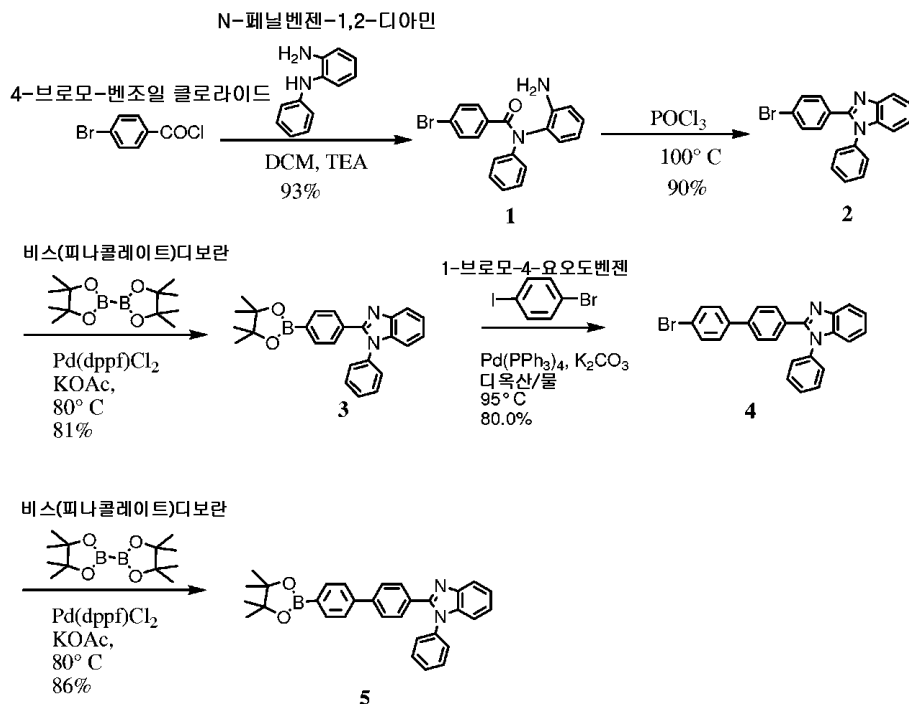
[0141] 일부 실시양태에서, 발광 장치는, 예컨대 발광층과 애노드 사이에 여기자 차단층을 포함할 수 있다. 실시양태에서, 여기자 차단층을 포함하는 물질의 밴드 갭(band gap)은, 여기자의 확산을 실질적으로 방지하기에 충분히 크다. 여기자 차단층에 포함될 수 있는 다수의 적합한 여기자 차단 물질이 당업자에게 공지되어 있다. 여기자 차단층을 구성할 수 있는 물질의 예로는: 알루미늄 퀴놀레이트(Alq₃), 4,4'-비스[N-(나프탈레닐)-N-페닐-아미노]비페닐(α -NPD), 4,4'-N,N'-디카르바졸-비페닐(CBP) 및 바토쿠프로인(BCP)과, 여기자의 확산을 실질적으로 방지하기에 충분히 큰 밴드 갭을 갖는 임의의 기타 물질에서 선택되는 임의로 치환된 화합물이 있다.

[0142] 주제 화합물을 포함하는 발광 장치는, 본원에 제공된 지도 사항으로 안내된 바와 같이, 당업계에 공지된 기술을 이용하여 제작할 수 있다. 예를 들어, 애노드의 역할을 할 수 있는 ITO와 같은 높은 일함수 금속으로 유리 기판을 코팅할 수 있다. 애노드층을 패터닝한 후, 발광 성분을 포함하는 발광층을 애노드 상에 침착할 수 있다. 일부 실시양태에서, 추가의 선택적인 층, 예컨대 정공 수송층, 정공 주입층 및/또는 여기자 차단층을, 증기 침착, 스퍼터링 또는 스핀 코팅과 같은 방법으로 발광층과 애노드 사이에 침착할 수 있다. 이어서, 낮은 일함수 금속(예컨대, Mg:Ag)을 포함하는 캐소드층을, 예컨대 증기 침착, 스퍼터링 또는 스핀 코팅으로 발광층 상에 침착할 수 있다. 일부 실시양태에서, 추가의 선택적인 층, 예컨대 전자 수송층, 전자 주입층 및/또는 여기자 차단층을, 적합한 기술, 예컨대 증기 침착, 스퍼터링 또는 스핀 코팅을 이용하여 장치에 첨가할 수 있다.

[0143] 일부 실시양태에서, 주제 화합물을 포함하는 장치는, 시판의 화합물에 비해 현저히 증가된 장치 수명을 제공할 수 있다. 일부 실시양태에서, 상기 장치는 적어도 약 125 시간, 150 시간, 175 시간, 185 시간 및/또는 200 시간의, 10000 니트(nit)에서의 T50(h) 수명을 제공할 수 있다. 일부 실시양태에서, 예컨대 약 13.2 mm²의 활성 방출 표면적(active emissive surface area)을 갖는 장치에 있어서, 장치에 106 mA의 정전류(약 10000 cd/m²에 상당함)를 가한 후, cd/m²로 발광도를 측정하여, 장치의 발광도/방출 감퇴를 시험함으로써 소정의 수명을 측정할 수 있다.

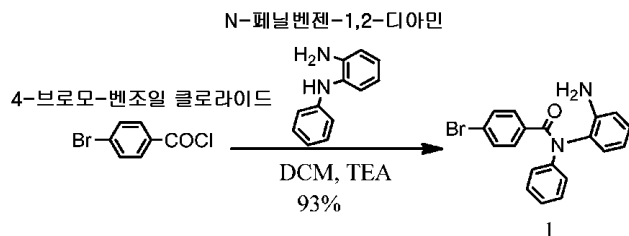
[0144] 합성에

[0145] 실시예 1.1



[0146]

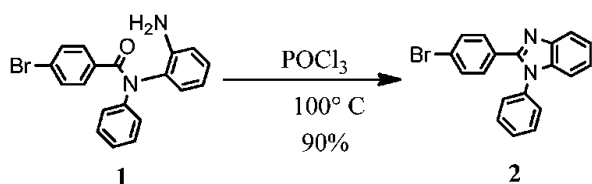
[0147] 실시예 1.1.1



[0148]

[0149] 4-브로모-N-(2-(페닐아미노)페닐)벤즈아미드 (1): 무수 디클로로메탄(DCM)(100 ml) 중 4-브로모-벤조일 클로라이드(11 g, 50 mmol)의 용액에, N-페닐벤젠-1,2-디아민(10.2 g, 55 mmol)에 이어서, 트리에틸아민(TEA)(17 ml, 122 mmol)을 서서히 첨가하였다. 그 전체를 실온(RT)에서 하룻밤 동안 교반하였다. 여과하여 백색 고체 1(6.5 g)을 얻었다. 여과액을 물(300 ml)로 워시업한 다음, DCM(300ml)으로 3회 추출하였다. 유기상을 수거하고, MgSO₄로 건조하고, 농축하고, DCM/헥산 중에서 재결정하여 백색 고체 1의 다른 부분(10.6 g)을 얻었다. 생성물 1의 총량은 93% 수율로 17.1 g이다.

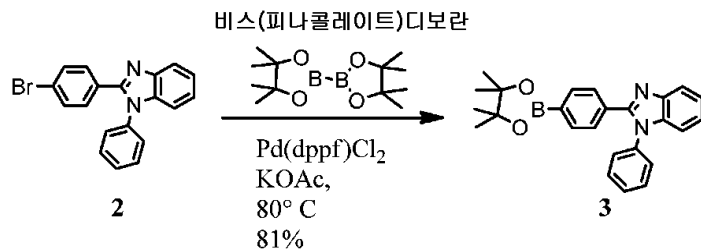
[0150] 실시예 1.1.2



[0151]

[0152] 2-(4-브로모페닐)-1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸 (2): 무수 1,4-디옥산(100 mL) 중 아미드 1(9.6 g, 26 mmol)의 현탁액에, 옥시염화인(POCl₃)(9.2 mL, 100 mmol)을 서서히 첨가하였다. 이어서, 그 전체를 100°C에서 하룻밤 동안 가열하였다. 실온까지 냉각한 후, 그 혼합물을 교반하면서 얼음(200 g)에 부었다. 여과한 다음, DCM/헥산 중에서 재결정화하여 연회색 고체 2(90% 수율로 8.2 g)를 얻었다.

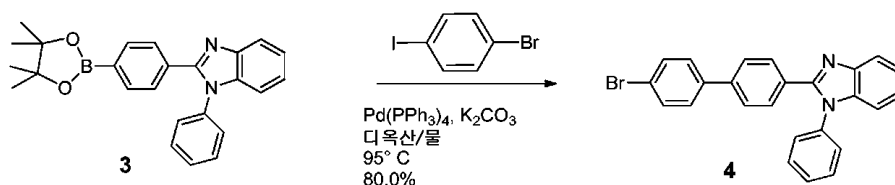
[0153] 실시예 1.1.3



[0154]

[0155] 1-페닐-2-(4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)-1H-벤조[d]이미다졸 (3): 1,4-디옥산(20 ml) 중 화합물 2(0.70 g, 2 mmol), 비스(피나콜레이트)디보란(0.533 g, 2.1 mmol), 비스(디페닐포스피노)페로센]디클로로팔라듐(Pd(dppf)Cl₂)(0.060 g, 0.08 mmol) 및 무수 아세트산칼륨(KOAc)(0.393 g, 4 mmol)의 혼합물을 아르콘 하에 80°C에서 하룻밤 동안 가열하였다. 실온까지 냉각한 후, 그 전체를 아세트산에틸(80 ml)로 희석한 다음, 여과하였다. 그 용액을 실리카 겔 상에 흡수시킨 다음, 컬럼 크로마토그래피(헥산/아세트산에틸 5:1 ~ 3:1)로 정제하여 백색 고체 3(81% 수율로 0.64 g)을 얻었다.

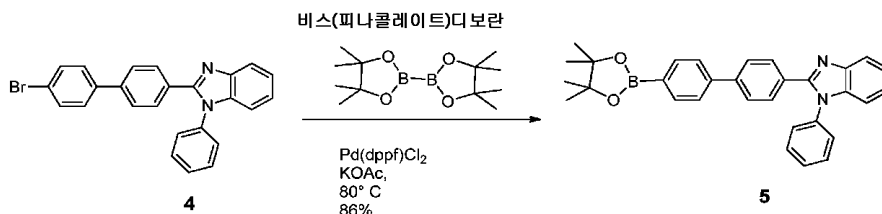
[0156] 실시예 1.1.3



[0157]

[0158] 2-(4'-브로모-[1,1'-비페닐]-4-일)-1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸 (4): 디옥산/물(60 ml/10 ml) 중 화합물 3(4.01 g, 10.1 mmol), 1-브로모-4-요오도벤젠(5.73 g, 20.2 mmol), Pd(PPh₃)₄(0.58 g, 0.5 mmol) 및 탄산칼륨(4.2 g, 30 mmol)의 혼합물을 탈기하고, 95°C에서 하룻밤 동안 가열하였다. 실온까지 냉각한 후, 그 혼합물을 아세트산에틸(250 ml)에 붓고, 염수로 세정하고, Na₂SO₄로 건조한 다음, 실리카 겔 상에 장입하고, 플래시 컬럼(헥산 내지 헥산/아세트산에틸 4:1)으로 정제하여 연황색 고체를 얻었으며, 이를 메탄올로 세정하고, 공기 중에서 건조하였다(80% 수율로 3.39 g).

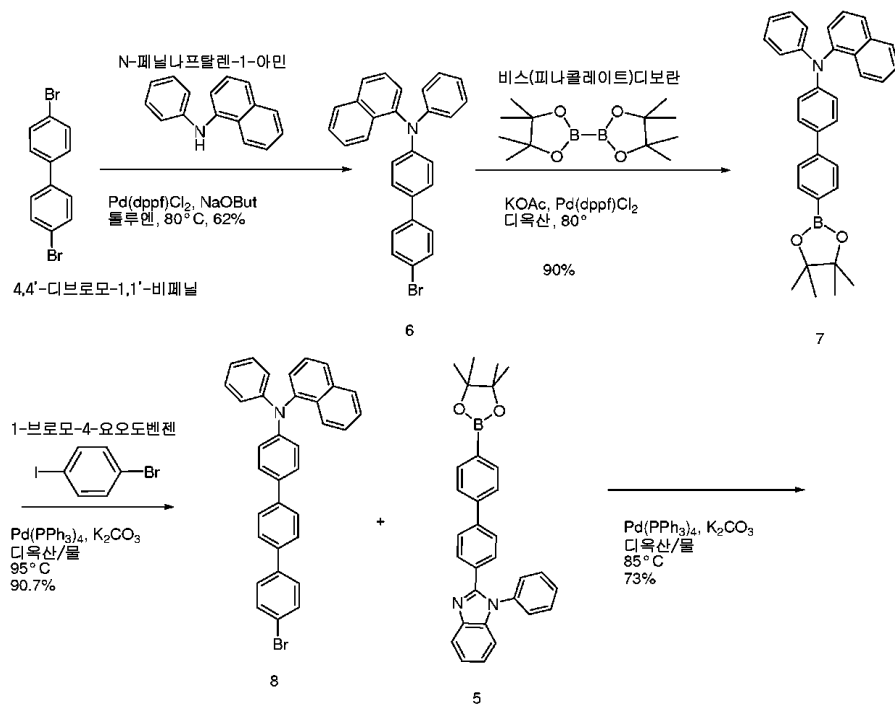
[0159] 실시예 1.1.4



[0160]

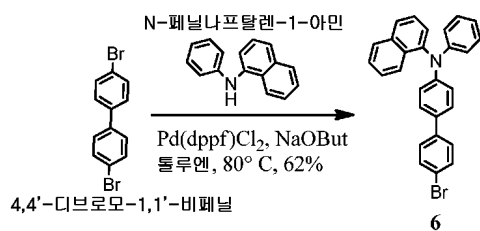
[0161] 1-페닐-2-(4'-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-[1,1'-비페닐]-4-일)-1H-벤조[d]이미다졸 (5): 1,4-디옥산(45 ml) 중 화합물 4(1.2 g, 2.82 mmol), 비스(피나콜레이트)디보란(0.72 g, 2.82 mmol), 비스(디페닐포스피노)페로센]디클로로팔라듐(Pd(dppf)Cl₂)(0.10 g, 0.14 mmol) 및 무수 아세트산칼륨(KOAc)(2.0 g, 20 mmol)의 혼합물을 아르콘 하에 80°C에서 하룻밤 동안 가열하였다. 실온까지 냉각한 후, 그 전체를 아세트산에틸(150 ml)로 희석한 다음, 여과하였다. 그 용액을 실리카 겔 상에 흡수시킨 다음, 컬럼 크로마토그래피(헥산/아세트산에틸 5:1 ~ 3:1)로 정제하여 백색 고체 5(86% 수율로 1.14 g)를 얻었다.

[0162] 실시예 1.2



[0163]

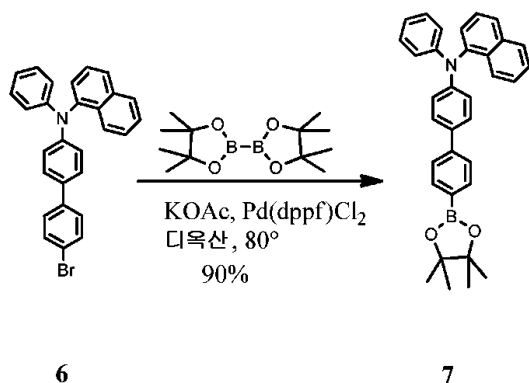
[0164] 실시예 1.2.1



[0165]

[0166] N-(4'-브로모-[1,1'-비페닐]-4-일)-N-페닐나프탈렌-1-아민 (6): 무수 톨루엔(100 ml) 중 N-페닐나프탈렌-1-아민(4.41 g, 20 mmol), 4,4'-디브로모-1,1'-비페닐(15 g, 48 mmol), 나트륨 tert-부톡시드(4.8 g, 50 mmol) 및 Pd(dppf)Cl_2 (0.44 g, 0.6 mmol)의 혼합물을 탈기하고, 80°C에서 10 시간 동안 가열하였다. 실온까지 냉각한 후, 그 혼합물을 디클로로메탄(400 ml)에 붓고, 30 분간 교반한 다음, 염수(100 ml)로 세정하였다. 유기상을 수거하고, Na_2SO_4 로 건조하고, 실리카 겔 상에 장입하고, 플래시 컬럼(헥산 내지 헥산/아세트산에틸 90:1)으로 정제하여 고체를 얻었으며, 이를 메탄올로 세정하고, 공기 중에서 건조하여 백색 고체 4(62% 수율로 5.58 g)를 얻었다.

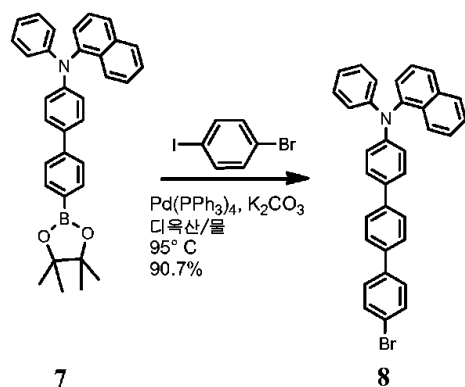
[0167] 실시예 1.2.2



[0168]

[0169] N-페닐-N-(4'-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-[1,1'-비페닐]-4-일)나프탈렌-1-아민 (7): 무수 디옥산(60 ml) 중 화합물 **6**(5.5 g, 12.2 mmol), 비스(피나콜레이트)디보란(3.10 g, 12.2 mmol), Pd(dppf)Cl₂(0.446 mg, 0.6 mmol) 및 KOAc(5.5 g, 56 mmol)의 혼합물을 탈기하고, 80°C에서 하룻밤 동안 가열 하였다. 실온까지 냉각한 후, 그 혼합물을 아세트산에틸(200 ml)에 붓고, 염수(150 ml)로 세정하였다. 그 유기 용액을 Na₂SO₄로 건조하고, 실리카 겔 상에 장입하고, 플래시 컬럼(헥산 내지 헥산/아세트산에틸 30:1)으로 정제 하여 주요 분획을 수거하였다. 용매를 제거한 후, 고형분을 메탄올로 세정하고, 여과하고, 공기 중에서 건조하여 백색 고체 **7**(90% 수율로 5.50 g)을 얻었다.

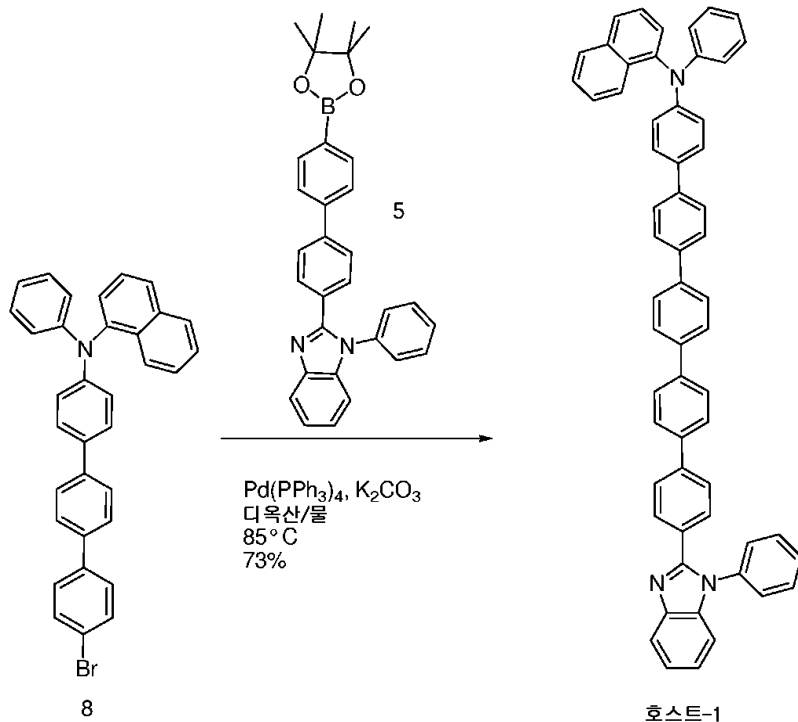
[0170] 실시예 1.2.3



[0171]

[0172] N-(4''-브로모-[1,1':4',1''-테르페닐]-4-일)-N-페닐나프탈렌-1-아민 (8): 디옥산/물(150 ml/30 ml) 중 화합물 **7**(4.5 g, 9.0 mmol), 1-브로모-4-요오도벤젠(5.12 g, 18 mmol), Pd(PPh₃)₄(0.52 g, 0.45 mmol) 및 탄산칼륨 (4.436 g, 32 mmol)의 혼합물을 탈기하고, 95°C에서 하룻밤 동안 가열하였다. 실온까지 냉각한 후, 그 혼합물을 디클로로메탄(300 ml)에 붓고, 염수로 세정하고, Na₂SO₄로 건조한 다음, 실리카 겔 상에 장입하고, 플래시 컬럼 (헥산 내지 헥산/아세트산에틸 20:1)으로 정제하여 연황색 고체 **8**(90.7 수율로 4.30 g)을 얻었다.

실시예 1.2.4



[0174]

[0175]

호스트-1: 디옥산/물(60 ml/10 ml) 중 화합물 **8**(1.50 g, 2.47 mmol), 화합물 **5**(1.11 g, 2.35 mmol), Pd(PPh₃)₄(0.16 g, 0.14 mmol) 및 탄산칼륨(1.38 g, 10 mmol)의 혼합물을 탈기하고, 85°C에서 18 시간 동안 가열하였다. 실온까지 냉각한 후, 그 혼합물을 여과하였다. 고형분 및 여과액을 개별적으로 수거하였다. 첫 번째 여과로부터의 고형분을 디클로로메탄(100 ml)에 재용해시키고, 실리카 겔 상에 장입하고, 플래시 컬럼(디클로로메탄 내지 디클로로메탄/아세트산에틸 9:1)으로 정제하여 소정의 분획을 수거하고, 농축하였다. 백색 침전물을 여과하고, 공기 중에서 건조하여 연황색 고체, 즉, **호스트-1**(1.35 g)을 얻었다. 전체 수율은 73%이다. LCMS 데이터: C₅₉H₄₂N₃(M+H)의 계산치: 792.3; 실측치 m/e = 792.

[0176]

8-2. OLED 장치 구성 및 성능의 예

[0177]

실시예 2.1(장치-A) - 발광 장치의 제작:

[0178]

다음과 유사한 방식으로 장치(장치 A)를 제작하였다. 시트 저항이 약 14 ohm/sq인 ITO 기판을, 세제, 물, 아세톤에 이어, 이소프로필 알코올(IPA)에서 초음파적으로 및 연속적으로 클리닝한 다음, 주위 환경 하에, 오븐에서 80℃로 약 30 분간 건조하였다. 이어서, 주위 환경 하에, 기판을 약 200℃에서 약 1 시간 동안 소성한 다음, 약 30 분간 UV-오존 처리하였다. 이어서, PEDOT:PSS(정공 주입 물질)를 열처리된 기판 상에 약 4000 rpm으로 약 30 초간 스핀코팅하였다. 이어서, 코팅된 층을 주위 환경 하에, 약 100℃에서 30 분간 소성한 다음, 글로브 박스(N₂ 환경) 내에서 200℃로 30 분간 소성하였다. 이어서, 4,4'-비스[N-(나프탈레닐)-N-페닐-아미노]비페닐(NPB)을 약 2×10^{-7} torr의 기저 압력 하에 약 0.1 nm/s의 속도로 진공 침착하는 진공실에 기판을 옮겼다. 비스(1-페닐이소퀴놀린)(아세틸아세토네이트)이리듐 (III)("Ir(piq)₂acac")(6 중량%)를 발광층으로서, **호스트-1** 호스트 물질과 함께, 각각 약 0.01 nm/s 및 약 0.10 nm/s로 공동 침착하여, 적절한 두께 비율을 얻었다.

[0179]

이어서, 1,3,5-트리스(1-페닐-1H-벤즈이미다졸-2-일)벤젠(TPBI)을, 발광층 상에 약 0.1 nm/s의 속도로 침착하였다. 불화리튬(LiF)(전자 주입 물질) 층을 약 0.005 nm/s의 속도로 침착한 다음, 알루미늄(Al)으로 된 캐소드를 약 0.3 nm/s의 속도로 침착하였다. 전형적인 장치 구조는: ITO(약 150 nm 두께)/PEDOT:PSS(약 30 nm 두께)/NPB(약 40 nm 두께)/**호스트-1**: Ir(piq)₂acac(약 30 nm 두께)/TPBI(약 30 nm 두께)/LiF(약 0.5 nm 두께)/Al(약 120 nm 두께)였다. 이어서, 습기, 산화 또는 기계적 손상으로부터 보호하기 위해, 장치를 게터(getter) 부착 유리캡으로 포매하여 OLED 장치의 발광부를 피복하였다.

[0180]

각 개개 장치는 면적이 약 13.2 mm^2 였다.

실시예 3: 장치 성능

실시예 3.1

모든 스펙트럼은 PR670 분광복사기(Photo Research, Inc, Chatsworth, CA, USA)로 측정하였고, I-V-L 특성은 Keithley 2612 SourceMeter(Keithley Instruments, Inc., Cleveland, OH, USA)로 확인하였다. 모든 장치 조장은 질소 충전 글로브 박스 내에서 실시하였다. 장치 A, 즉, **호스트-1**: Ir(piq)₂acac를 포함하며 실시예 2.1에 따라 제작한 적색 발광 장치를 시험하여, 도 2에 도시된 바와 같이 구동 전압의 함수로서의 전류 밀도 및 휘도를 조사함으로써, 장치의 방출 품질을 판단하였다. 장치의 켜짐 전압(turn-on voltage)은 약 2.5 볼트였으며, 휘도는 약 6V에서 13.2 mm² 면적의 장치로 약 8,000 cd/m²였다.

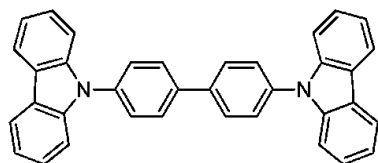
표 1

장치	PE(Lm/w)	LE(cd/A)
장치 A	9.8	10.4

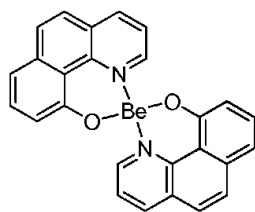
이렇게, 유기 발광 장치 내의 호스트 물질로서의 **화합물 호스트-1**의 유효성이 입증되었다.

실시예 3.2

장치 A, 즉, **호스트-1**: Ir(piq)₂acac를 포함하며 실시예 2.1에 따라 제작한 발광 장치를 시험하여, 장치의 수명(10,000 니트에서의 T₅₀(h))을 구하였다. 다른 장치(비교 장치 X[Bebq₂] 및 비교 장치 Y[CBP])를, 각각의 장치에 있어서, 비교 **화합물 X**[비스(10-히드록시벤조[h]퀴놀리나토)베릴륨(Bebq₂)(94%) 및 비스(1-페닐이소퀴놀린)(아세틸아세토네이트)이리듐 (III)("Ir(piq)₂acac")(6%)], 및 비교 **화합물 Y**[4,4'-비스(카르바졸-9-일)비페닐 CBP(94%) 및 비스(1-페닐이소퀴놀린)(아세틸아세토네이트)이리듐 (III)("Ir(piq)₂acac")(6%)]를, 각각, NPB 위에 공동 침착하여 30 nm 두께의 발광층(20)을 형성시킨 것 이외에는, 실시예 2.1에 따라 제작하였다:



CBP



Bebq₂

모든 스펙트럼은 PR670 분광복사기(Photo Research, Inc., Chatsworth, CA, USA)로 측정하였고, I-V-L 특성은 Keithley 2612 SourceMeter(Keithley Instruments, Inc., Cleveland, OH, USA)로 확인하였다. 모든 장치 조장은, 포매 없이, 질소 충전 글로브 박스 내에서 실시하였다.

표 2는 실시예 2.2 및 2.3에 따라 제작한 장치의 장치 수명을 제시한다.

표 2

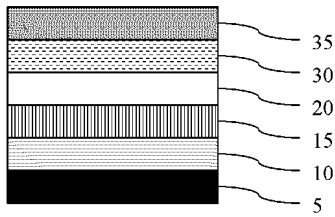
장치	10000 니트에서의 T50(h)
장치 A	200
비교 장치 X	100
비교 장치 Y	6

[0192] 이렇게, 적어도 유기 발광 장치 내에서 오래 지속되는 화합물로서의 호스트-1의 유효성이 입증되었다.

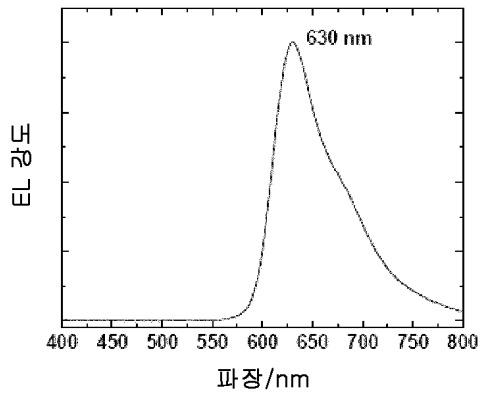
[0193] 특정의 바람직한 실시양태 및 실시예의 맥락에서 청구 사항을 기술하였으나, 본 청구 범위가, 구체적으로 개시된 실시양태를 넘어서 다른 대안적인 실시양태 및/또는 용도와, 이의 명백한 변형 및 상당 내용까지 포괄함을 당업자는 이해할 것이다.

도면

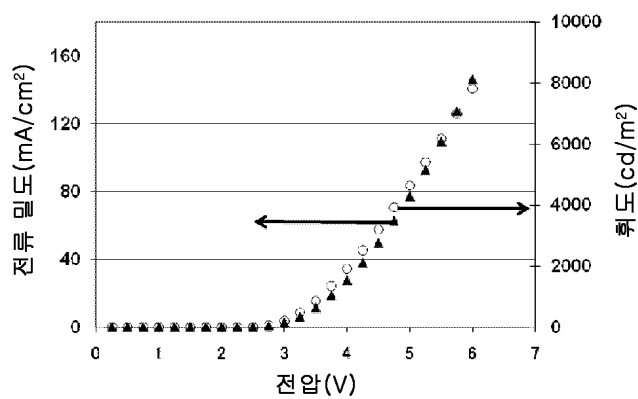
도면1



도면2



도면3



도면4

