



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2018년01월26일  
(11) 등록번호 10-1822668  
(24) 등록일자 2018년01월22일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C07F 1/08* (2006.01) *C09K 11/06* (2006.01)  
*H01L 51/00* (2006.01) *H05B 33/14* (2006.01)

(21) 출원번호 10-2012-7015896  
(22) 출원일자(국제) 2010년11월18일  
    심사청구일자 2015년05월19일  
(85) 번역문제출일자 2012년06월19일  
(65) 공개번호 10-2012-0085917  
(43) 공개일자 2012년08월01일  
(86) 국제출원번호 PCT/US2010/057169  
(87) 국제공개번호 WO 2011/063083  
    국제공개일자 2011년05월26일  
(30) 우선권주장  
    12/948,396 2010년11월17일 미국(US)  
    (뒷면에 계속)  
(56) 선행기술조사문헌  
    KR1020070050859 A\*  
    (뒷면에 계속)

(73) 특허권자  
**유니버시티 오브 써던 캘리포니아**  
미국 90015-2477 캘리포니아주 로스앤젤레스 스웻  
2300 사우스 올리브 스트리트 1150 유에스씨 스티  
븐스 센터 포 이노베이션

(72) 발명자  
**톰슨 마크**  
미국 92087 캘리포니아주 애너하임 페퍼 크릭 웨  
이 4447

**주로비치 피터**  
미국 90802 캘리포니아주 롱 비치 이스트 세컨드  
스트리트 1/2 1723

**크릴로바 발렌티나**  
미국 90066 캘리포니아주 로스 앤젤러스 매터슨  
애브뉴 12627 #203

(74) 대리인  
김진희

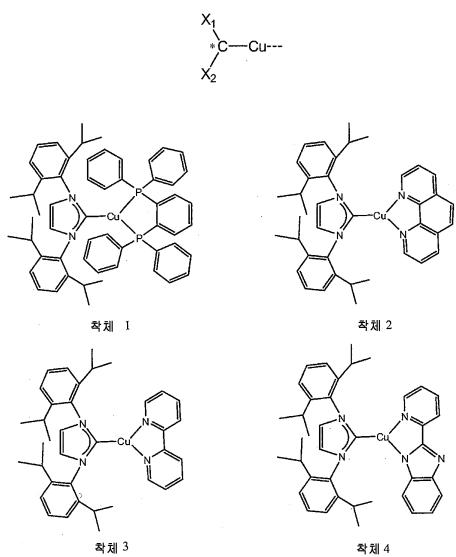
### 심사관 :      심귀임

(54) 발명의 명칭 3-배위 구리(I)-카르بن 칙체

(57) 요약

신규한 인광 삼각 구리 카르벤 착체가 제공된다. 이 착체는 3-배위 구리 원자에 배위된 카르벤 리간드를 포함한다. 그 착체는 유기 발광 장치에 사용될 수 있다. 특히, 착체는 조명 용도에 사용되는 OLED에 매우 유용할 수 있다.

대표도 - 도3



(56) 선행기술조사문현

J. AM. CHEM. SOC., Vol. 125, pp. 12237-12245,  
2003

WO2005019373 A2

US5627164 A

US20040192664 A1

\*는 심사관에 의하여 인용된 문현

(30) 우선권주장

61/262,804 2009년11월19일 미국(US)

61/301,362 2010년02월04일 미국(US)

61/398,808 2010년07월01일 미국(US)

61/402,989 2010년09월09일 미국(US)

---

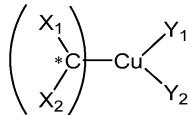
## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

3-배위 구리 원자(three coordinate copper atom)에 배위된 카르벤 리간드(carbene ligand)를 포함하는 인광 착체(phosphorescent complex)로서, 하기 화학식을 가지는 인광 착체:

[화학식]



식 중에서,

$^*C$ 는 1가 구리 원자 Cu에 배위된 2가 탄소 원자이고;

$X_1$  및  $X_2$ 는 알킬, 아민, 포스핀, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로부터 독립적으로 선택된 치환기이며;

$X_1$  및  $X_2$ 는 추가로 치환될 수 있고;

$X_1$  및  $X_2$ 는 임의적으로 연결되어 고리를 형성하며;

$Y_1$  및  $Y_2$ 는 알킬, 헤�테로알킬, 아릴 및 헤�테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되는 치환기이고;

$Y_1$  및  $Y_2$ 는 추가로 치환될 수 있으며;

각각의  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 Cu와 함께 결합을 형성하며;

$Y_1-Y_2$ 는 두 자리(bidentate) 리간드 또는 2개의 한 자리 리간드( $Y_1$  및  $Y_2$ )를 나타내고,

제1 결합은 Cu와 치환기  $Y_1$  내의 원자  $Y'_1$  사이에 형성되고, 제2 결합은 Cu와 치환기  $Y_2$  내의 원자  $Y'_2$  사이에 형성되며;

(i)  $Y'_1$ 은 N이고,  $Y'_2$ 는 N, C, P, O, S 및 Se로 이루어진 군으로부터 선택되거나, (ii)  $Y'_1$ 은 C이고,  $Y'_2$ 는 C, P 및 O로 이루어진 군으로부터 선택되거나, (iii)  $Y'_1$  및  $Y'_2$ 는 P이고;

카르벤 리간드는 한 자리 리간드이다.

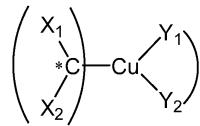
#### 청구항 2

제1항에 있어서, 각각의  $X_1$  및  $X_2$ 는 독립적으로  $^*C$ 와 결합을 형성하며; 제1 결합은  $^*C$ 와 치환기  $X_1$  내의 원자  $X'_1$  사이에 형성되고; 제2 결합은  $^*C$ 와 치환기  $X_2$  내의 원자  $X'_2$  사이에 형성되며;  $X'_1$  및  $X'_2$ 는 독립적으로 C, N, O, S 및 P로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 착체.

#### 청구항 3

제1항에 있어서, 하기 화학식 3을 가지는 착체:

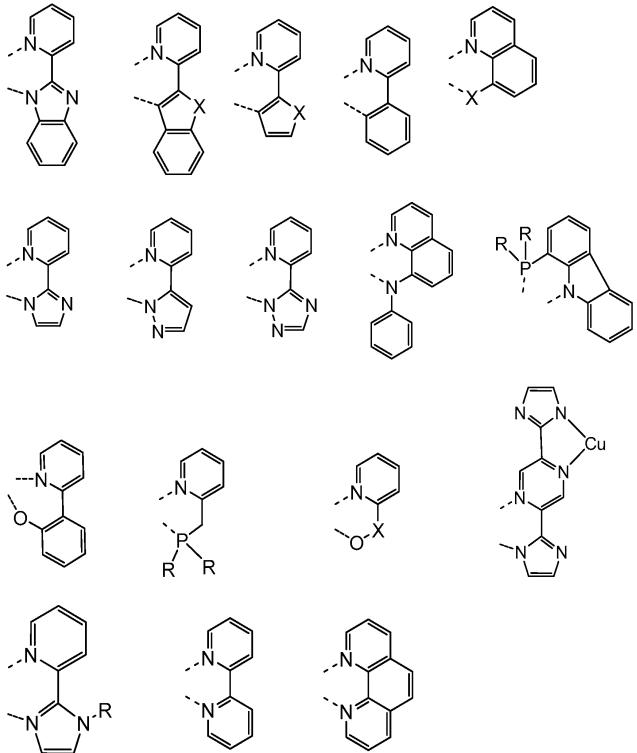
[화학식 3]

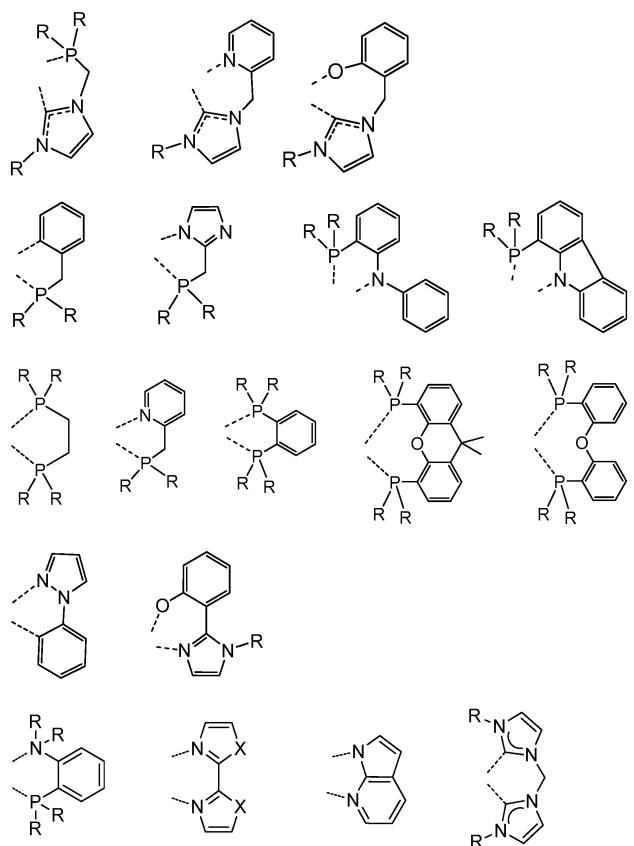


식 중에서,  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 연결된다.

청구항 4

제3항에 있어서,  $Y_1-Y_2$ 는 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 쪽체:





식 중에서,

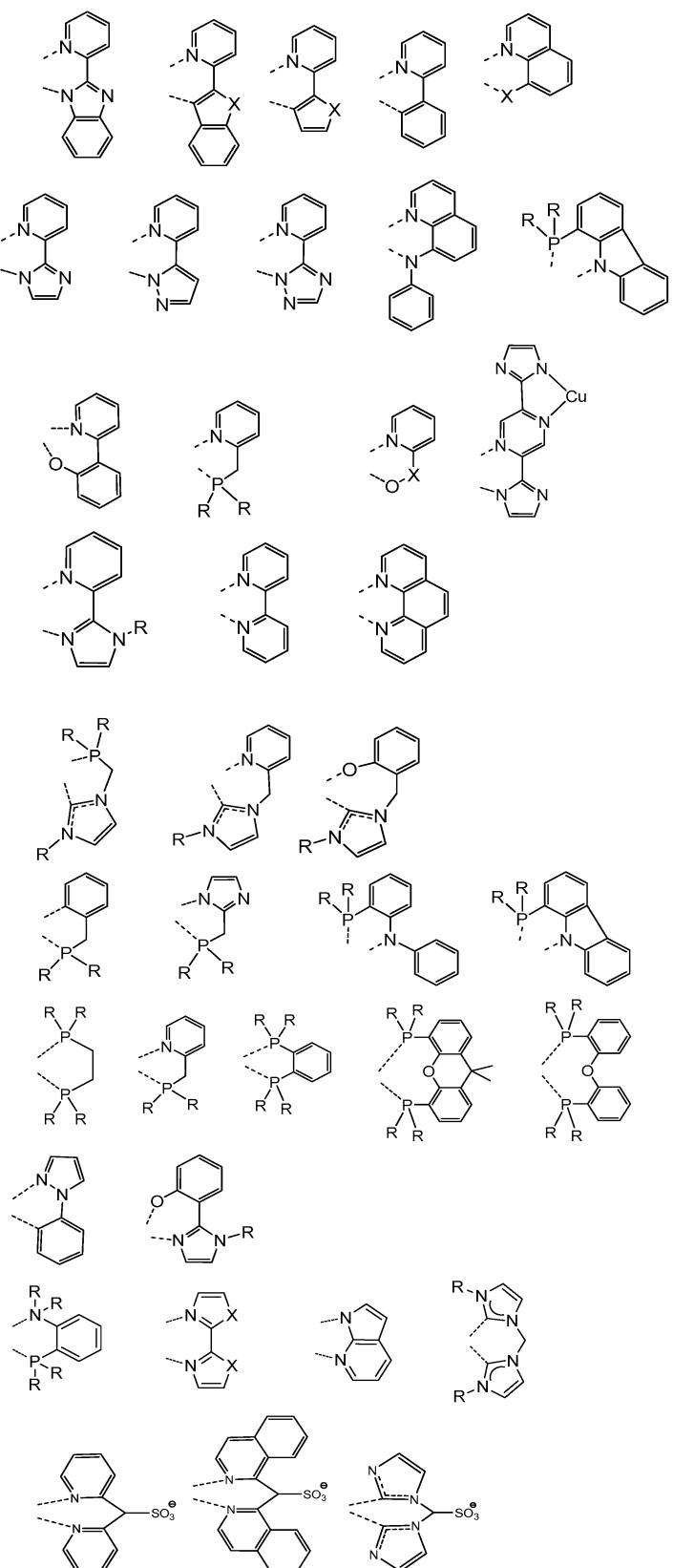
X는 NR, O, S, Se, CR<sub>2</sub> 및 CO로 이루어진 군으로부터 선택되고;

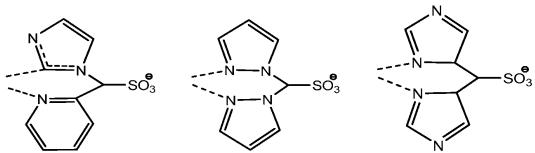
각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되며;

각 환은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 치환기에 의해 추가로 치환된다.

## 청구항 5

제3항에 있어서,  $Y_1-Y_2$ 는 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 착체:





식 중에서,

X는 NR, O, S, Se, CR<sub>2</sub> 및 CO로 이루어진 군으로부터 선택되고;

각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되며;

각 환은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 치환기에 의해 추가로 치환된다.

#### 청구항 6

제1항에 있어서, Y<sub>1</sub>-Y<sub>2</sub>는 BY<sub>4</sub><sup>-</sup>, SO<sub>3</sub>Y<sup>-</sup>, CY<sub>4</sub><sup>-</sup>, SiO<sub>4</sub><sup>-</sup>, OY<sub>2</sub><sup>-</sup> 또는 SY<sub>2</sub><sup>-</sup>를 함유하는 비공액 1가 음이온성 리간드이고,

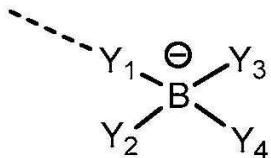
각 Y은 수소, 알킬, 아릴, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되는 것인 착체.

#### 청구항 7

제6에 있어서, 리간드 Y<sub>1</sub>-Y<sub>2</sub>는 2개의 한 자리 리간드를 포함하고, 이중 하나는 BY<sub>4</sub><sup>-</sup>인 것인 착체.

#### 청구항 8

제7항에 있어서, BY<sub>4</sub><sup>-</sup>는 하기 화학식을 갖는 것인 착체:



식 중에서,

Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 피리딜, 피리미딜, 피라지닐, 피리다지닐, 트리아지닐, 테트라지닐, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 피라졸릴, 이미다졸릴, 벤즈이미다졸릴, 옥사졸릴, 티아졸릴, 벤족사졸릴, 벤조티아졸릴 및 포스핀으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되고;

Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 융합에 의해 임의적으로 연장되며;

Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 알킬, 아릴, 도너 또는 억셉터 기에 의해 임의적으로 추가로 치환되고;

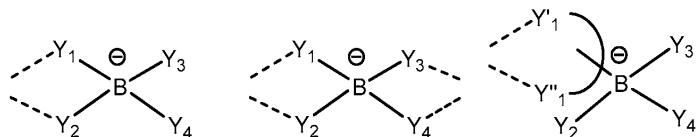
Y<sub>3</sub> 및 Y<sub>4</sub>는 수소, 알킬, 아릴, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

#### 청구항 9

제6항에 있어서, Y<sub>1</sub>-Y<sub>2</sub>는 화학식 BY<sub>4</sub><sup>-</sup>를 가지는 두 자리 리간드인 착체.

청구항 10

제9항에 있어서, 리간드  $Y_1-Y_2$ 는 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 차체:



식 중에서,

$Y_1$  및  $Y_2$ 는 피리딜, 피리미딜, 피라지닐, 피리다지닐, 트리아지닐, 테트라지닐, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 피라졸릴, 이미다졸릴, 벤즈이미다졸릴, 옥사졸릴, 티아졸릴, 벤족사졸릴, 벤조티아졸릴 및 포스핀으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되고;

$Y_1$  및  $Y_2$ 는 융합에 의해 임의적으로 연장되며;

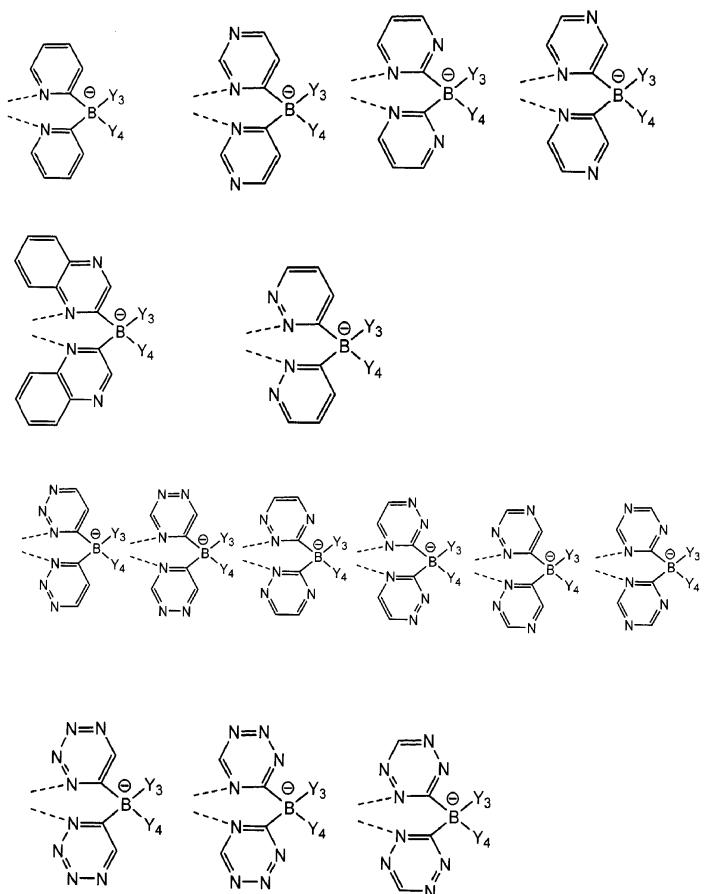
$Y_1$  및  $Y_2$ 는 알킬, 아릴, 도너 또는 억셉터 기에 의해 임의적으로 추가로 치환되고;

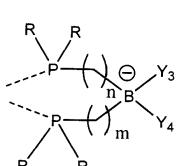
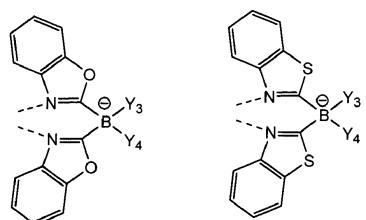
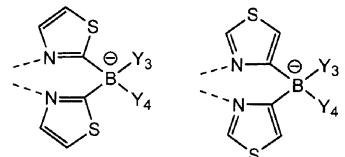
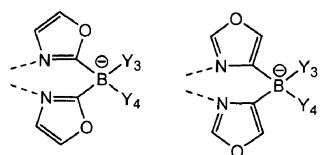
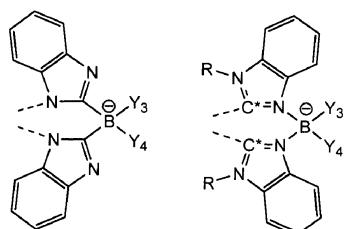
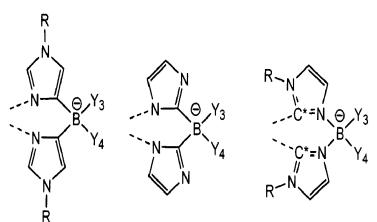
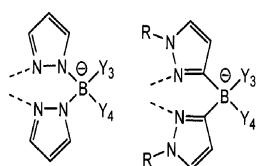
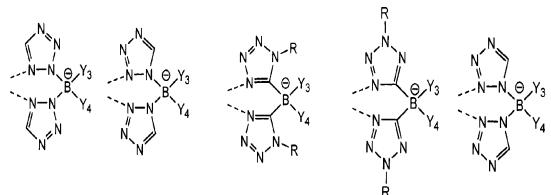
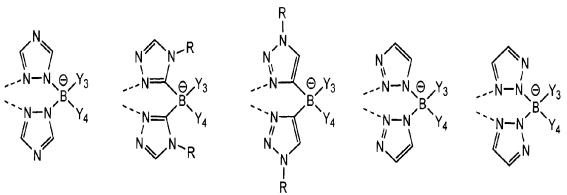
$Y'_1 - Y''_1$ 은 중성 킬레이트화 리간드를 나타내고;

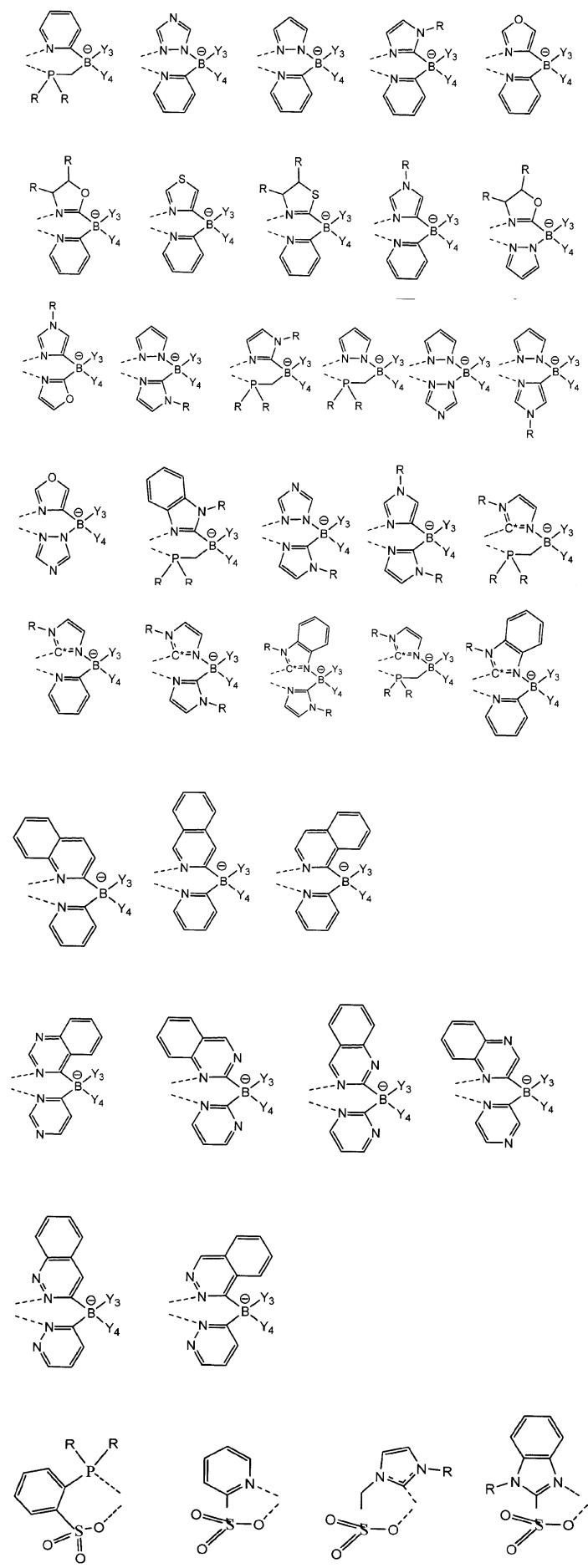
$Y_3$  및  $Y_4$ 는 수소, 알킬, 아릴, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

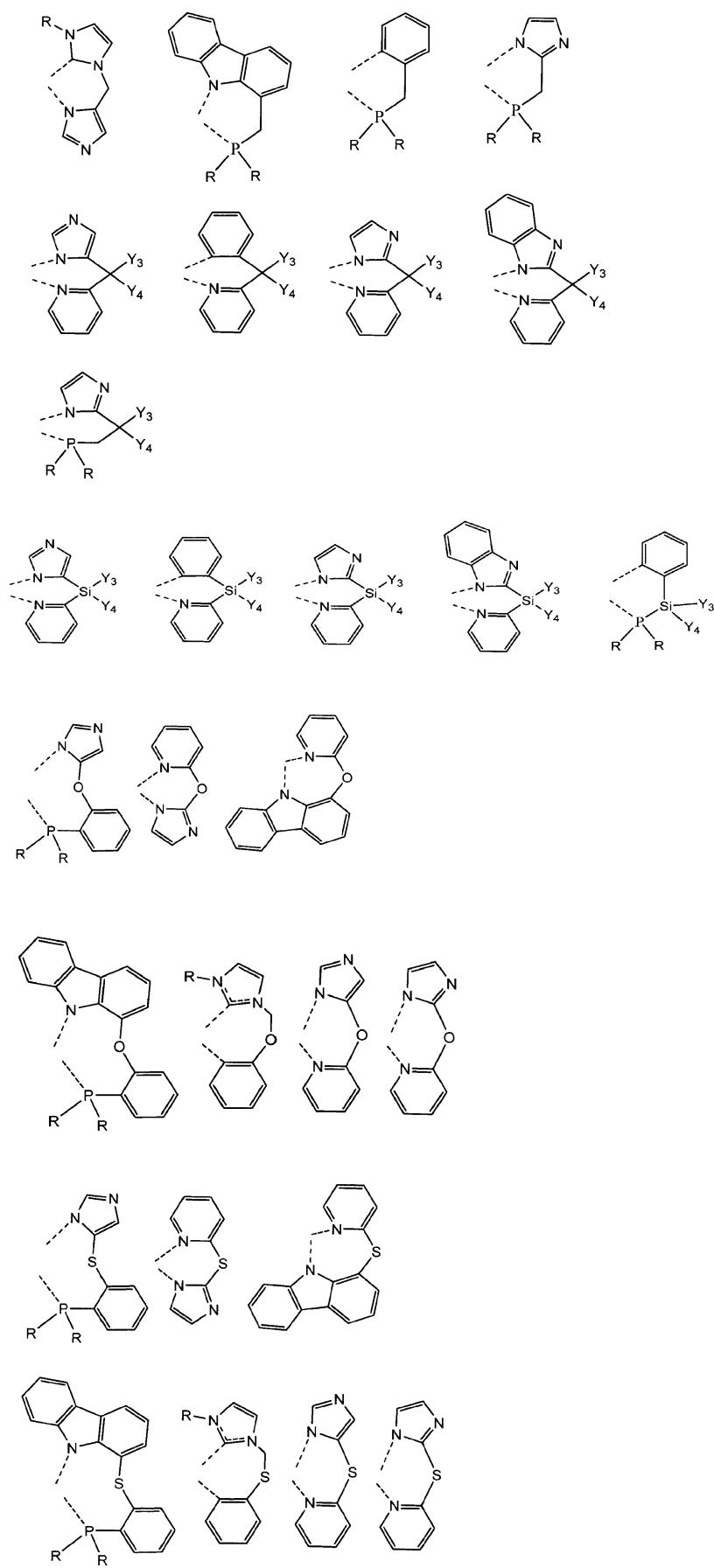
청구항 11

제6항에 있어서,  $Y_1-Y_2$ 는 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 칙체:









식 중에서,

R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으

로부터 선택되며,

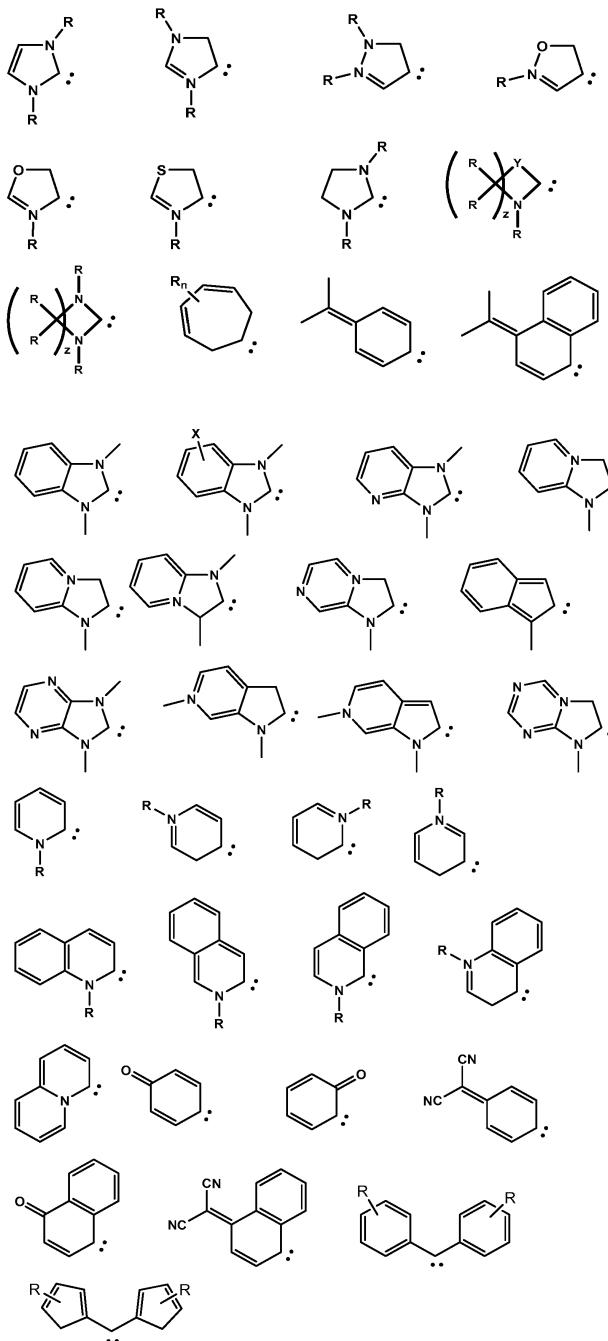
$Y_3$  및  $Y_4$ 는 수소, 알킬, 아릴, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬 및 헤�테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

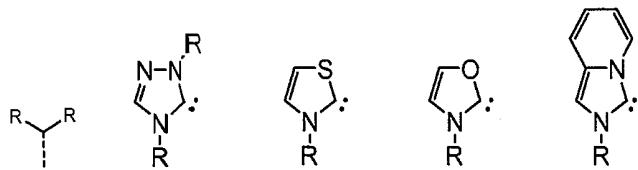
청구항 12

제1항에 있어서, 착체는 2개의 구리(I) 중심을 포함하는 것인 착체.

청구항 13

제1항에 있어서, 카르벤 리간드는 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 차체:





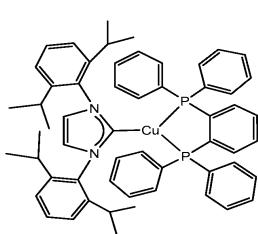
식 중에서,

각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되고;

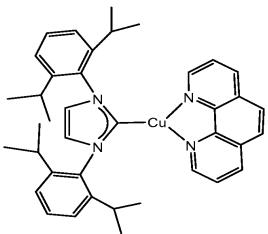
z는 1, 2, 3 또는 4이다.

#### 청구항 14

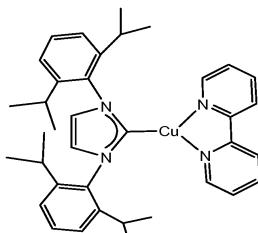
제1항에 있어서, 착체는 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 착체:



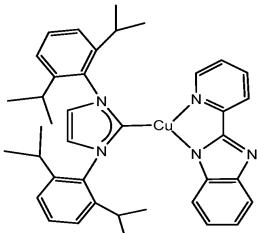
착체 1



착체 2



착체 3

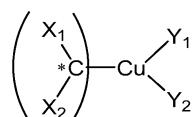


착체 4

#### 청구항 15

제1항에 있어서, 착체는 하기 화학식 IV를 갖는 것인 착체:

[화학식 IV]



식 중에서,

$Y_1$  및  $Y_2$ 는 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되는 치환기이고;

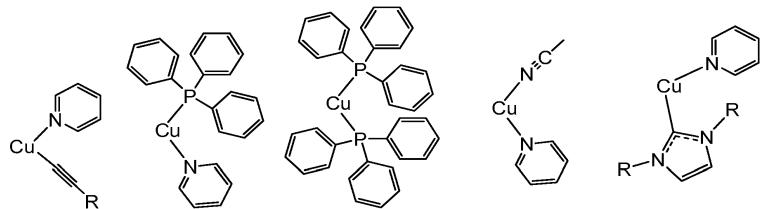
$Y_1$  및  $Y_2$ 는 추가로 치환될 수 있으며;

$Y_1$  및  $Y_2$ 는 연결되지 않고;

각각의  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 Cu와 함께 결합을 형성한다.

## 청구항 16

제15항에 있어서, 착체의  $\text{Cu}-\text{Y}^1-\text{Y}^2$ 의 구조는 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 착체:



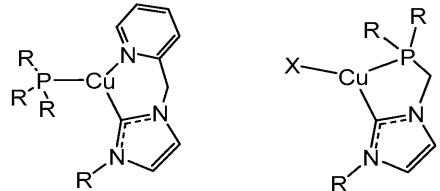
식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 해테로알킬, 아릴 및 해테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

## 청구항 17

제1항에 있어서, 카르بن 리간드는 두 자리인 것인 착체.

## 청구항 18

제17항에 있어서, 착체는 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 착체:



식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 해테로알킬, 아릴 및 해테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되고;

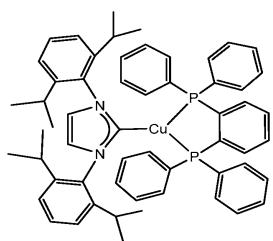
X는 한 자리 리간드이다.

## 청구항 19

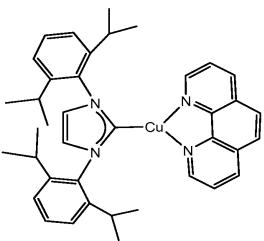
제1항에 있어서, 착체는 중합체, 수지상 착체 또는 소분자 내에 포함되는 것인 착체.

## 청구항 20

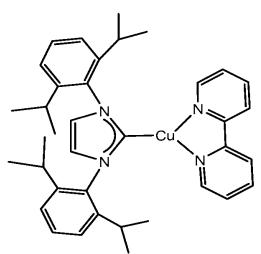
하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 인광 착체:



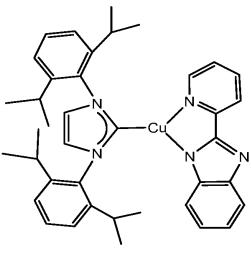
착체 1



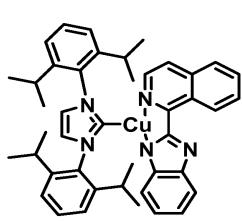
착체 2



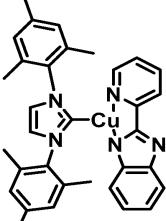
착체 3



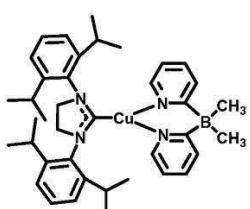
착체 4



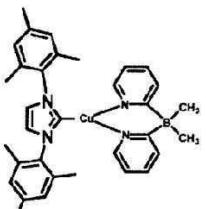
착체 5



착체 6



착체 7



착체 8

## 청구항 21

유기 발광 장치를 포함하고,

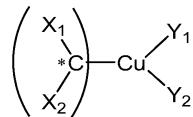
애노드;

캐소드; 및

애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기층으로서, 3-배위 구리 원자 및 카르بن 리간드를 포함하는 인광 착체 그 자체를 추가로 포함하는 유기층

을 추가로 포함하며, 상기 인광 착체는 하기 화학식을 가지는 것인 제1 장치:

[화학식]



식 중에서,

<sup>\*</sup>C는 1가 구리 원자 Cu에 배위된 2가 탄소 원자이고;

X<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub>는 알킬, 아민, 포스핀, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로부터 독립적으로 선택된 치환기이며;

X<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub>는 추가로 치환될 수 있고;

X<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub>는 임의적으로 연결되어 고리를 형성하며;

Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤�테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되는 치환기이고;

Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 추가로 치환될 수 있으며;

각각의 Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 Cu와 함께 결합을 형성하며;

Y<sub>1</sub>-Y<sub>2</sub>는 두 자리(bidentate) 리간드 또는 2개의 한 자리 리간드(Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>)를 나타내고,

제1 결합은 Cu와 치환기 Y<sub>1</sub> 내의 원자 Y'<sub>1</sub> 사이에 형성되고, 제2 결합은 Cu와 치환기 Y<sub>2</sub> 내의 원자 Y'<sub>2</sub> 사이에 형성되며;

(i) Y'<sub>1</sub>은 N이고, Y'<sub>2</sub>는 N, C, P, O, S 및 Se로 이루어진 군으로부터 선택되거나, (ii) Y'<sub>1</sub>은 C이고, Y'<sub>2</sub>는 C, P 및 O로 이루어진 군으로부터 선택되거나, (iii) Y'<sub>1</sub> 및 Y'<sub>2</sub>는 P이고;

카르벤 리간드는 한 자리 리간드이다.

## 청구항 22

제21항에 있어서, 제1 장치는 소비자 제품인 장치.

## 청구항 23

제21항에 있어서, 제1 장치는 유기 발광 장치인 장치.

## 청구항 24

삭제

## 청구항 25

삭제

## 청구항 26

삭제

## 청구항 27

삭제

## 청구항 28

삭제

청구항 29

삭제

청구항 30

삭제

청구항 31

삭제

청구항 32

삭제

청구항 33

삭제

청구항 34

삭제

청구항 35

삭제

청구항 36

삭제

청구항 37

삭제

청구항 38

삭제

청구항 39

삭제

청구항 40

삭제

청구항 41

삭제

청구항 42

삭제

청구항 43

삭제

청구항 44

삭제

청구항 45

삭제

청구항 46

삭제

청구항 47

삭제

청구항 48

삭제

청구항 49

삭제

청구항 50

삭제

청구항 51

삭제

청구항 52

삭제

청구항 53

삭제

청구항 54

삭제

청구항 55

삭제

청구항 56

삭제

청구항 57

삭제

청구항 58

삭제

청구항 59

삭제

청구항 60

삭제

청구항 61

삭제

청구항 62

삭제

청구항 63

삭제

청구항 64

삭제

청구항 65

삭제

청구항 66

삭제

청구항 67

삭제

청구항 68

삭제

청구항 69

삭제

청구항 70

삭제

청구항 71

삭제

청구항 72

삭제

청구항 73

삭제

청구항 74

삭제

청구항 75

삭제

청구항 76

삭제

청구항 77

삭제

청구항 78

삭제

청구항 79

삭제

청구항 80

삭제

청구항 81

삭제

청구항 82

삭제

청구항 83

삭제

청구항 84

삭제

청구항 85

삭제

청구항 86

삭제

청구항 87

삭제

청구항 88

삭제

청구항 89

삭제

청구항 90

삭제

청구항 91

삭제

청구항 92

삭제

청구항 93

삭제

청구항 94

삭제

청구항 95

삭제

청구항 96

삭제

청구항 97

삭제

청구항 98

삭제

청구항 99

삭제

청구항 100

삭제

청구항 101

삭제

청구항 102

삭제

청구항 103

삭제

청구항 104

삭제

청구항 105

삭제

청구항 106

삭제

청구항 107

삭제

청구항 108

삭제

청구항 109

삭제

청구항 110

삭제

청구항 111

삭제

청구항 112

삭제

청구항 113

삭제

청구항 114

삭제

청구항 115

삭제

청구항 116

삭제

청구항 117

삭제

청구항 118

삭제

청구항 119

삭제

청구항 120

삭제

청구항 121

삭제

청구항 122

삭제

청구항 123

삭제

청구항 124

삭제

청구항 125

삭제

청구항 126

삭제

청구항 127

삭제

청구항 128

삭제

청구항 129

삭제

청구항 130

삭제

청구항 131

삭제

청구항 132

삭제

청구항 133

삭제

청구항 134

삭제

청구항 135

삭제

청구항 136

삭제

청구항 137

삭제

청구항 138

삭제

청구항 139

삭제

청구항 140

삭제

청구항 141

삭제

청구항 142

삭제

청구항 143

삭제

### 발명의 설명

#### 기술 분야

[0001] 본원은 2009년 11월 19일에 출원된 미국 가특허 출원 연속 번호 제61/262,804호, 2010년 2월 4일에 출원된 미국 가특허 출원 연속 번호 제61/301,362호, 2010년 7월 1일에 출원된 미국 가특허 출원 연속 번호 제61/398,808호 및 2010년 9월 9일에 출원된 미국 가특허 출원 연속 번호 제61/402,989호(이들의 각 개시내용은 전문이 본원에 명시적으로 참조 인용됨)에 대한 우선권을 주장한 것이다.

[0002] 청구된 발명은 산학 협동 연구 계약에 대해 하기 당사자들 중 하나 이상의 당사자에 의해, 그 하나 이상의 당사자를 위해 및/또는 그 하나 이상의 당상자와 연계하여 행해진 것이다: 리젠크 오브 더 유니버시티 오브 미시간, 프린스턴 유니버시티, 더 유니버시티 오브 씨던 캘리포니아 및 유니버셜 디스플레이 코포레이션. 계약서는 청구된 발명이 행해진 일자에 또는 그 이전에 유효하였고, 청구된 발명은 계약서의 범주 내에서 취해진 활동의 결과로서 이루어졌다.

#### 발명의 분야

[0004] 본 발명은 인광 구리 착체 및 이의 유기 발광 장치(OLED)에서의 용도에 관한 것이다. 보다 특히, 본 발명은 3-배위 구리 원자(three coordinate copper atom)에 배위된 카르벤 리간드(carbene ligand)를 포함하는 인광 착체(phosphorescent complex) 및 상기 착체를 포함하는 장치에 관한 것이다.

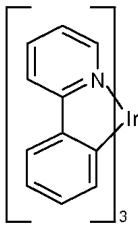
### 배경 기술

[0005] 유기 물질을 이용하는 광전자 장치는 다수의 이유들로 인해 점차 더욱 바람직해지고 있다. 상기 장치를 제조하는 데 사용되는 물질들 중 상당수가 비교적 저렴하여, 유기 광전자 장치가 무기 장치보다 비용 이점에 있어 잠재적 우위를 갖는다. 또한, 유기 물질은 그 고유의 성질, 예컨대 가요성으로 인해, 가요성 기판 상에서의 제작과 같은 특별한 용도에 매우 적합화될 수 있다. 유기 광전자 장치의 예에는 유기 발광 장치(OLED), 유기 광트랜지스터, 유기 광기전력 전지 및 유기 광검출기가 포함된다. OLED에 있어, 유기 물질은 종래 물질들에 비해 성능 이점을 가질 수 있다. 예를 들어, 유기 방출층이 발광할 때의 파장은 일반적으로 적당한 도판트로 용이하게 조율될 수 있다.

[0006] OLED는 전압이 장치 전반에 인가될 때 발광하는 유기 박막을 이용한다. OLED는 평판 디스플레이, 조명 및 백라이팅과 같은 용도에 사용하기 위한, 점차 더 관심이 모아지고 있는 기술이 되어 가고 있다. 수가지 OLED 물질 및 구성이 미국 특허 제5,844,363호, 동 제6,303,238호 및 동 제5,707,745호(이들은 전문이 본원에 참조 인용됨)에 기재되어 있다.

[0007] 인광 방출 문자에 대한 한 가지 용도는 전색(full color) 디스플레이이다. 그러한 디스플레이를 위한 산업 표준은 "포화" 색으로 칭해지는 특별한 색을 방출하도록 적합화된 픽셀을 필요로 한다. 특히, 이 표준은 포화 적색, 녹색 및 청색 픽셀을 필요로 한다. 색은 당업계에 공지된 CIE 좌표를 이용하여 측정될 수 있다.

[0008] 녹색 방출 분자의 한 예는 하기 구조를 갖는, Ir(ppy)<sub>3</sub>로 표기되는 트리스(2-페닐피리딘) 이리듐이다:



[0009]

[0010] 본원에서 상기 도 및 이후 도에서, 본 발명자들은 질소에서 금속(여기에서는, Ir)으로의 배위 결합을 직선으로 표기한다.

### 발명의 내용

[0011] 본원에 사용되는 용어 "유기"는 유기 광전자 장치의 제작에 사용될 수 있는 소분자 유기 물질뿐만 아니라 중합체성 물질도 포함한다. "소분자"란 중합체가 아닌 임의의 유기 물질을 지칭하고, "소분자"는 실제로 매우 클 수 있다. 소분자는 일부 환경 하에서는 반복 단위를 포함할 수 있다. 예를 들어, 치환기로서 장쇄 알킬기를 사용하는 것은 "소분자" 부류에서 분자를 배제하지 않는다. 소분자는 또한, 예를 들어 중합체 골격 상의 펜단트 기로서 또는 그 골격의 부분으로서 중합체에 도입될 수도 있다. 소분자는 또한 중심 부분 상에 배치된 일련의 화학 쉘로 구성되는 덴드리머의 코어 부분으로 작용할 수도 있다. 덴드리머의 코어 부분은 형광 또는 인광 소분자 방출자일 수 있다. 덴드리머는 "소분자"일 수 있고, OLED의 분야에 현재 사용되는 모든 덴드리머들은 소분자인 것으로 사료된다.

[0012] 본원에 사용되는 "상단(top)"은 기판에서 가장 멀리 떨어진 것을 의미하고, 반면 "하단(bottom)"은 기판에서 가장 가까운 것을 의미한다. 제1 층은 제2 층 "위치에 배치된" 것으로 기술되고, 제1 층은 기판에서 보다 멀리 떨어져 배치된다. 제1 층이 제2 층과 "접촉된" 것으로 특정되지 않는 한, 제1 층과 제2 층 사이에는 다른 층들이 있을 수 있다. 예를 들어, 캐소드와 애노드 사이에 다양한 유기층이 있을지라도, 캐소드가 애노드 "위에 배치된" 것으로 기술될 수 있다.

[0013] 본원에 사용되는 "용액 처리성"은 용액 또는 혼탁 형태로, 액체 매질 내에 용해, 분산 또는 수송되고/되거나 액체 매질로부터 침착될 수 있음을 의미한다.

[0014] 리간드는 그 리간드가 방출성 물질의 광활성 성질에 직접적으로 기여하는 것으로 사료될 때 "광활성"인 것으로 지칭될 수 있다. 리간드는, 보조 리간드가 광활성 리간드의 성질을 변경시킬 수 있을지라도, 상기 리간드가 방출성 물질의 광활성 성질에 기여하지 않는 것으로 사료될 때, "보조(ancillary)"인 것으로 지칭될 수 있다.

[0015] 본원에 사용되고 당업자에게 일반적으로 이해되어지는 첫 번째 "최고 점유 분자 오비탈(Highest Occupied Molecular Orbital)"(HOMO) 또는 "최저 비점유 분자 오비탈(Lowest Unoccupied Molecular Orbital)"(LUMO) 에너지 준위는, 첫 번째 에너지가 진공 에너지 준위에 보다 근접할 경우, 두 번째 HOMO 또는 LUMO 에너지 준위보다 "크거나" 혹은 "높다". 이온화 포텐셜(IP)이 진공 준위 대비 음성의 에너지로 측정되기 때문에, 보다 높은 HOMO 에너지 준위는 보다 작은 절대 값을 갖는 IP(덜 음성인 IP)에 상응한다. 마찬가지로, 보다 높은 LUMO 에너지 준위는 보다 작은 절대 값을 갖는 전자 친화도(EA)(덜 음성인 EA)에 상응한다. 통상적인 에너지 준위 다이어그램에서는, 상단에 진공 준위가 있을 때, 물질의 LUMO 에너지 준위는 동일 물질의 HOMO 에너지 준위보다 높다. "보다 높은" HOMO 또는 LUMO 에너지 준위는 "보다 낮은" HOMO 또는 LUMO 에너지 준위보다 상기 다이어그램의 상단에 보다 근접하게 나타난다.

[0016] 본원에 사용되고 당업자에게 일반적으로 이해되어지는 첫 번째 일 함수는, 그 첫 번째 일 함수가 보다 높은 절대 값을 갖는 경우, 두 번째 일 함수보다 "크거나" 혹은 "높다". 일 함수가 일반적으로 진공 준위 대비 음성의 수로 측정되기 때문에, 이는 "보다 높은" 일 함수는 보다 음성임을 의미한다. 통상적인 에너지 준위 다이어그램에서는, 진공 준위가 상단에 있고, "보다 높은" 일 함수는 아래쪽 방향으로 진공 준위에서 더욱 멀리 떨어진 것으로 도시된다. 따라서, HOMO 및 LUMO 에너지 준위의 정의는 일 함수보다 상이한 관례를 따른다.

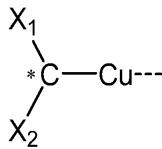
[0017] OLED에 대한 보다 상세한 설명 및 상기 기술된 정의는 미국 특허 제7,279,704호(전문에 본원에 참조 인용됨)에서 찾아볼 수 있다.

## [0018] 발명의 개요

[0019] 신규 인광 착체로서, 3-배위 구리 원자에 배위된 카르벤 리간드를 포함하는 착체가 제공된다.

[0020] 한 측면에서, 카르벤 리간드는 하기 화학식 I를 갖는다:

[0021] [화학식 I]



[0022] 상기 식 중에서,  $^*C$ 는 1가 구리 원자 Cu에 배위된 2가 탄소 원자이다.  $X_1$  및  $X_2$ 는 알킬, 아민, 포스핀, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로부터 독립적으로 선택된 치환기이다.  $X_1$  및  $X_2$ 는 추가로 치환될 수 있고,  $X_1$  및  $X_2$ 는 임의적으로 연결되어 고리를 형성한다. 한 측면에서, 카르벤 리간드는 한 자리(monodentate)이다. 바람직하게, 각각의  $X_1$  및  $X_2$ 는 독립적으로  $^*C$ 와 결합을 형성한다. 제1 결합은  $^*C$ 와 치환기  $X_1$  내의 원자  $X'_1$  사이에 형성되고, 제2 결합은  $^*C$ 와 치환기  $X_2$  내의 원자  $X'_2$  사이에 형성된다.  $X'_1$  및  $X'_2$ 는 C, N, O, S 및 P로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

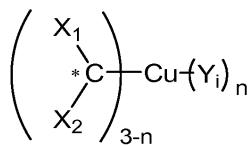
[0024] 또 다른 측면에서, 카르벤 리간드는 한 자리이다.

[0025] 한 측면에서,  $X_1$  및  $X_2$ 는 연결되어 고리를 형성하지 않는다. 또 다른 측면에서,  $X_1$  및  $X_2$ 는 연결되어 고리를 형성한다.

[0026] 한 측면에서, 구리 착체는 중성이다. 또 다른 측면에서, 구리 착체는 하전되어 있다.

[0027] 한 측면에서, 착체는 하기 화학식 II를 갖는다:

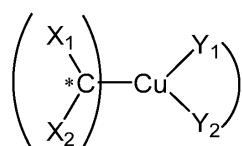
[0028] [화학식 II]



[0029] 상기 식 중에서,  $Y_i$ 는 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤�테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.  $Y_i$ 는 한 자리 리간드 또는 두 자리(bidentate) 리간드이다.  $n$ 은 1 또는 2이다. 바람직하게,  $n$ 은 2이다.

[0031] 또 다른 측면에서, 착체는 하기 화학식 III를 갖는다:

[0032] [화학식 III]

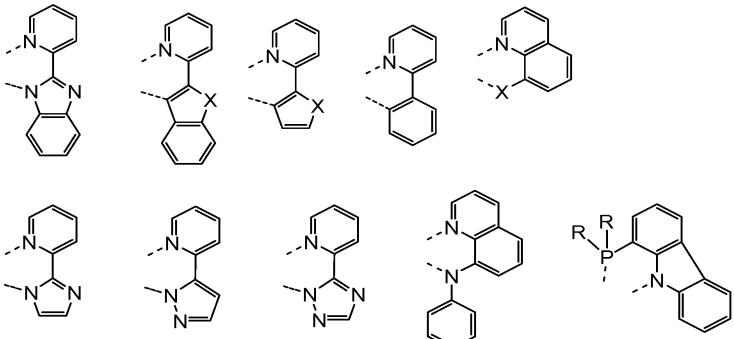


[0033] 상기 식 중에서,  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤�테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되는 치환기이다.  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 추가로 치환될 수 있다.  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 결합된다. 각각의  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 Cu와 함께 결합을 형성한다. 제1 결합은 Cu와 치환기  $Y_1$  내의 원자  $Y'_1$  사이에 형성되고, 제2 결합은 Cu와 치환기  $Y_2$  내의 원자  $Y'_2$  사이에 형성된다.  $Y'_1$ 는 N, P,  $^*C$ , O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택된다.  $Y'_2$ 는 N, P,  $^*C$ , 4가 탄소, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택된다. 바람직하게,  $Y'_1$ 는 N이다. 바람직하게, Cu,  $Y'_1$  및  $Y'_2$ 를 포함하는 환은 5-원 또

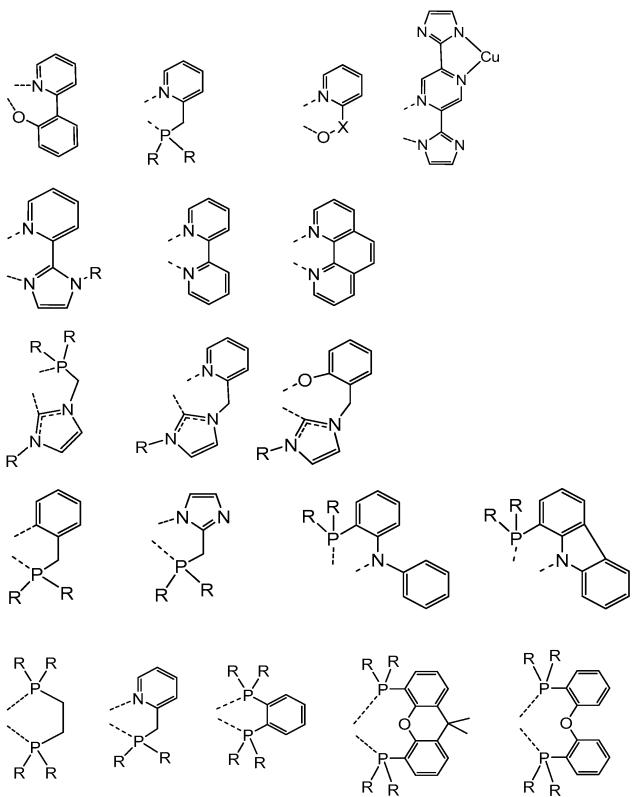
는 6-원 환이다.

[0035] 또 다른 측면에서, Y<sub>1</sub>은 피리딜, 피라졸, 알킬 아민, 이미다졸, 벤즈이미다졸, 트리아졸, 테트라졸, 피리다진, 피리미딘, 피라진, 트리아진, 테트라진, 옥사졸, 티아졸, 벤죽사졸 및 벤조티아졸로 이루어진 군으로부터 선택된다.

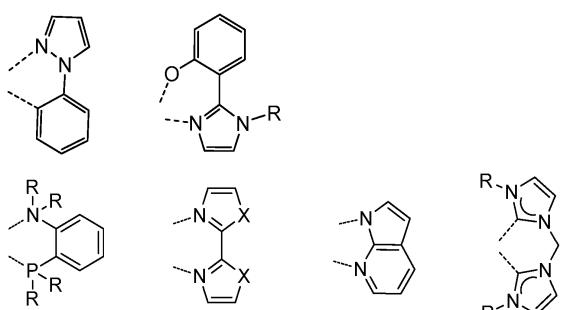
[0036] 또 다른 측면에서, Y<sub>1</sub>-Y<sub>2</sub>는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



[0037]



[0038]



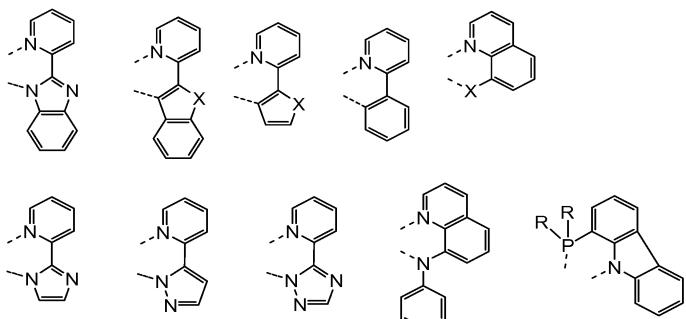
[0039]

[0040] 상기 식 중에서, X는 NR, O, S, Se, CR<sub>2</sub> 및 CO로 이루어진 군으로부터 선택된다. 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

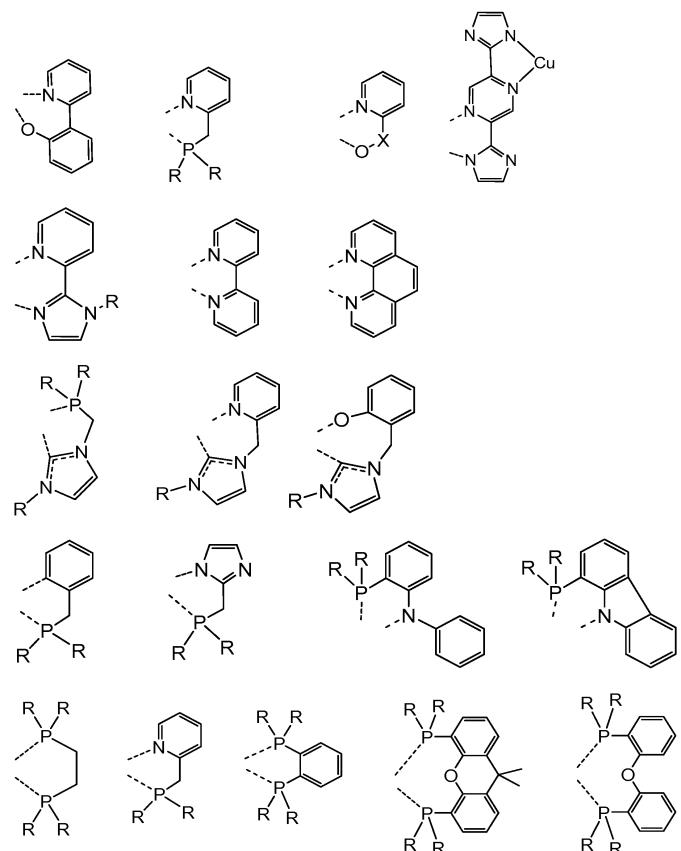
다. 각 환은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 치환기에 의해 추가로 치환된다.

[0041] 또 다른 측면에서, 각 R은 카르바졸, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 아자카르바졸, 아자디벤조푸란 및 아자디벤조티오펜으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되는 치환기를 포함한다.

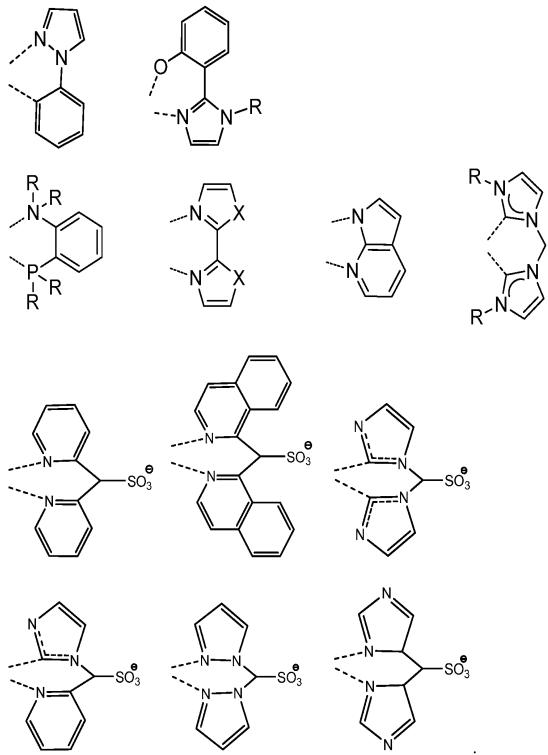
[0042] 또 다른 측면에서, Y<sub>1</sub>-Y<sub>2</sub>는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



[0043]



[0044]

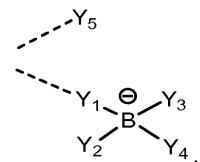


[0046] 상기 식 중에서, X는 NR, O, S, Se, CR<sub>2</sub> 및 CO로 이루어진 군으로부터 선택된다. 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. 각 환은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 치환기에 의해 추가로 치환된다.

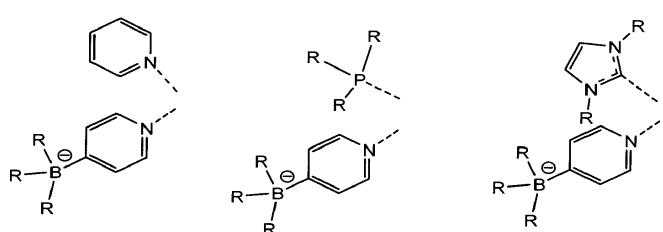
[0047] 한 측면에서, 각 R은 카르바졸, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 아자카르바졸, 아자디벤조푸란 및 아자디벤조티오펜으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되는 치환기를 포함한다.

[0048] 또 다른 측면에서, Y<sub>i</sub>은 BY<sub>4</sub><sup>-</sup>, SO<sub>3</sub>Y<sup>-</sup>, CY<sub>4</sub><sup>-</sup>, SiO<sub>4</sub><sup>-</sup>, OY<sub>2</sub><sup>-</sup> 또는 SY<sub>2</sub><sup>-</sup>를 함유하는 비공액 1가 음이온성 리간드이다. 각 Y는 수소, 알킬, 아릴, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

[0049] 한 측면에서, Y<sub>i</sub>은 BY<sub>4</sub><sup>-</sup>이다. 또 다른 측면에서, 리간드 Y<sub>i</sub>은 하나 이상이 BY<sub>4</sub><sup>-</sup>인 2개의 한 자리 리간드를 포함한다. 바람직하게, 리간드 Y<sub>i</sub>은 하기 화학식을 갖는다:

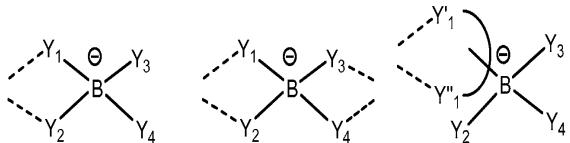


[0051] 더욱 바람직하게, 하나 이상이 BY<sub>4</sub><sup>-</sup>인 2개의 한 자리 리간드를 포함하는 리간드 Y<sub>i</sub>은 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



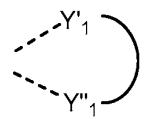
[0053] 상기 식 중에서,  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 피리딜, 피리미딜, 피라지닐, 피리다지닐, 트리아지닐, 테트라지닐, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 피라졸릴, 이미다졸릴, 벤즈이미다졸릴, 옥사졸릴, 티아졸릴, 벤족사졸릴, 벤조티아졸릴 및 포스핀으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 융합, 예를 들어 벤즈고리화에 의해 연장될 수 있다. 부가적으로,  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 알킬, 아릴, 도너 또는 억셉터 기로 추가로 치환될 수 있다.  $Y_3$  및  $Y_4$ 는 수소, 알킬, 아릴, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. 한 측면에서,  $Y_3$  및  $Y_4$ 는 연결되어 고리를 형성하고, 그 고리는 융합, 예를 들어 벤즈고리화에 의해 연장될 수 있다.

[0054] 또 다른 측면에서,  $Y_i$ 은 화학식  $BY_4^-$ 를 갖는 두 자리 리간드이다. 바람직하게, 리간드  $Y_i$ 은 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



[0055]

[0056] 이 측면에서,  $Y_i$ 은 하기 화학식을 갖는 두 자리 퀼레이트화 리간드이다:

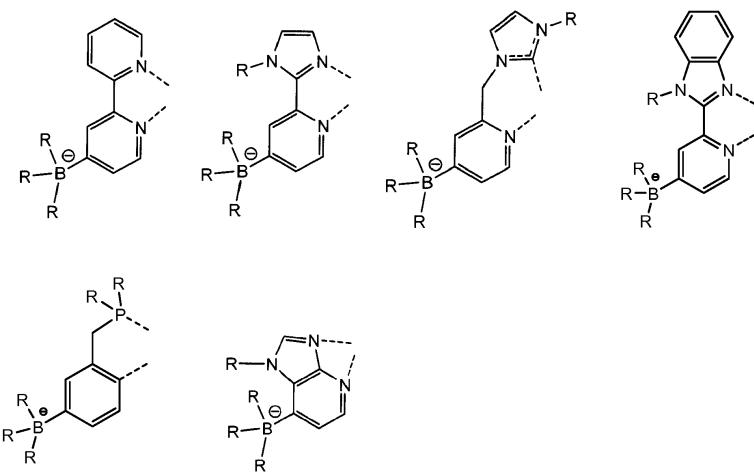


[0057]

[0058] 상기 식 중에서,  $Y'_1-Y''_1$ 는 중성, 즉 비하전된 퀼레이트화 리간드를 나타낸다.  $Y'_1-Y''_1$ 는 금속 중심에 배위될 수 있다.

[0059]

$Y'_1-Y''_1$  리간드의 구체예에는 하기의 구조를 갖는 리간드들이 포함되나 이들로 국한되지 않는다:



[0060]

[0061] 상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

[0062]

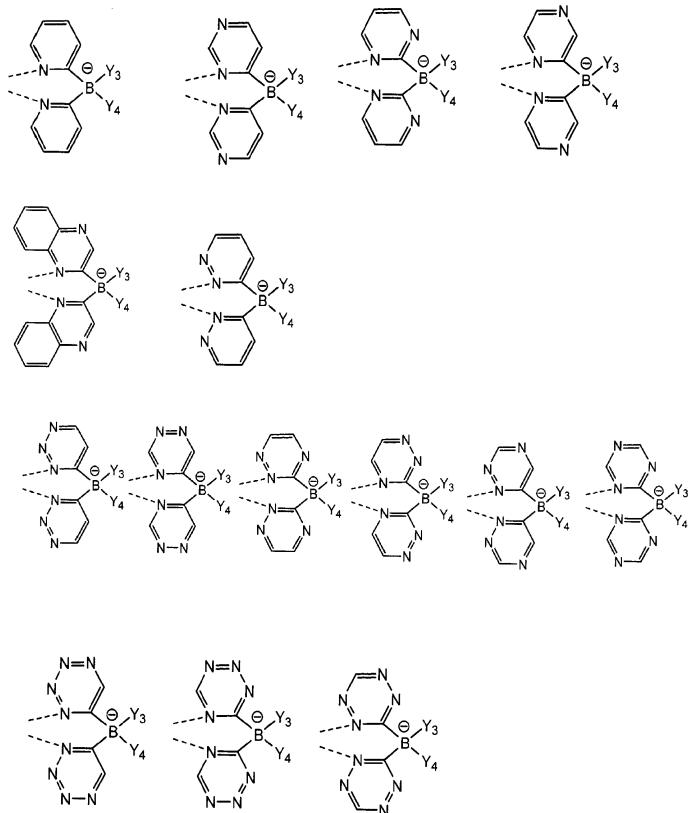
$Y_1$  및  $Y_2$ 는 피리딜, 피리미딜, 피라지닐, 피리다지닐, 트리아지닐, 테트라지닐, 테트라졸릴, 피라졸릴, 이미다졸릴, 벤즈이미다졸릴, 옥사졸릴, 티아졸릴, 벤족사졸릴, 벤조티아졸릴 및 포스핀으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 융합, 예를 들어 벤즈고리화에 의해 연장될 수 있다. 부가적으로,  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 알킬, 아릴, 도너 또는 억셉터 기로 추가로 치환될 수 있다.

[0063]

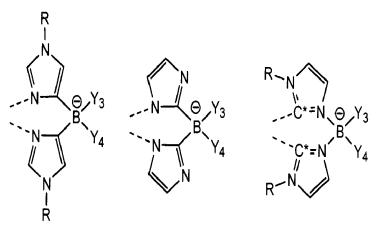
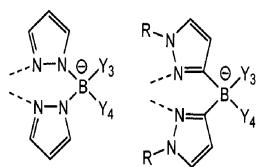
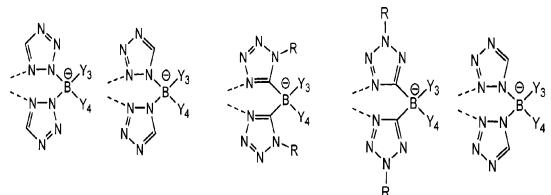
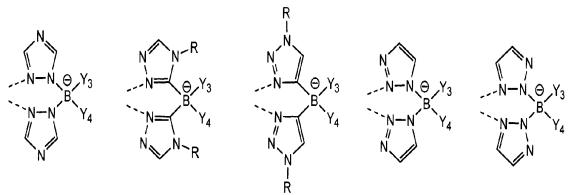
$Y_3$  및  $Y_4$ 는 수소, 알킬, 아릴, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤�테로알킬 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. 한 측면에서,  $Y_3$  및  $Y_4$ 는 연결되어 고리를 형성하고, 그 고리는 융합, 예를

들어 벤즈고리화에 의해 연장될 수 있다.

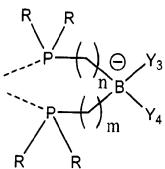
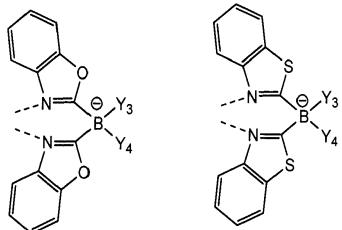
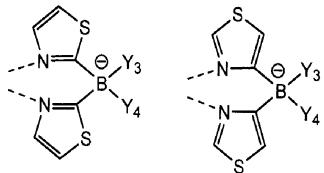
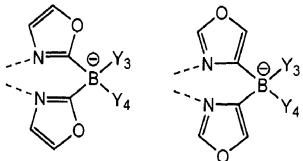
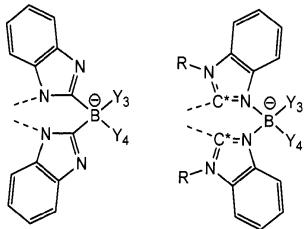
[0064] 한 측면에서,  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 동일하다.  $Y_1$  및  $Y_2$ 가 동일한 리간드의 구체예에는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택되는 리간드들이 포함되나 이들로 국한되지 않는다:



[0065]



[0066]

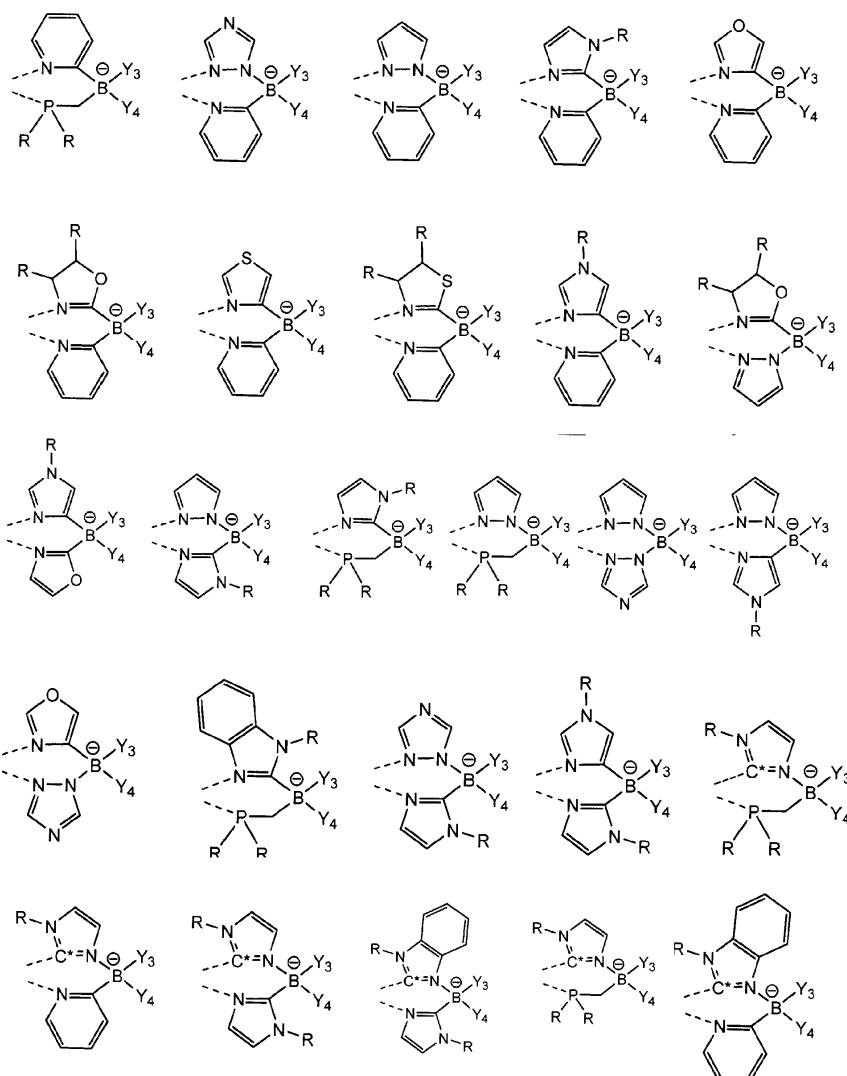


[0067]

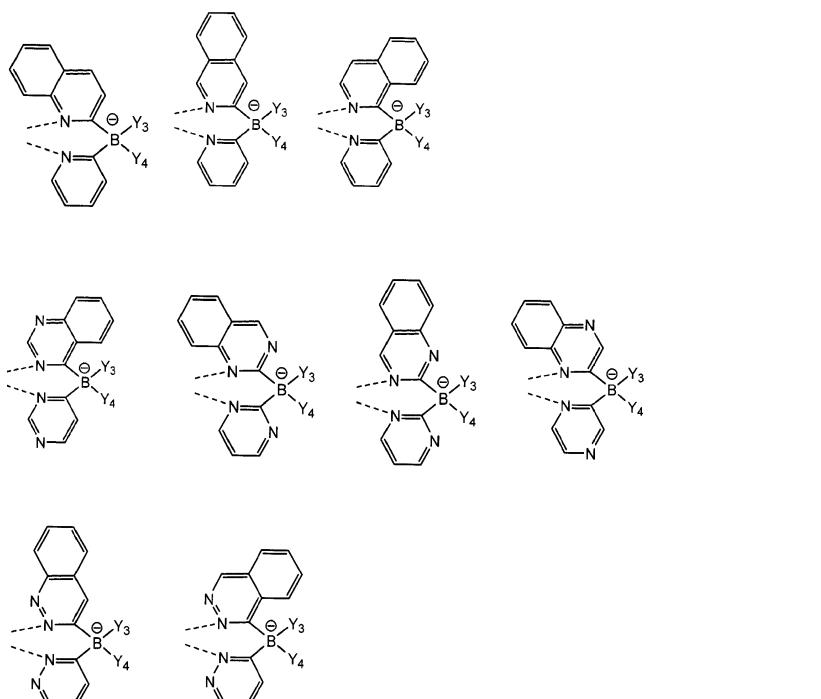
[0068] 상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. C<sup>\*</sup>는 2가 탄소 원자이다. n은 0, 1 또는 2이다. m은 0, 1 또는 2이다.

[0069]

[0069] 한 측면에서, Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 상이하다. Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>가 상이한 리간드의 구체예에는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택되는 리간드들이 포함되나 이들로 국한되지 않는다:



[0070]



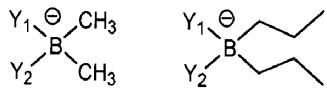
[0071]

[0072] 상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로

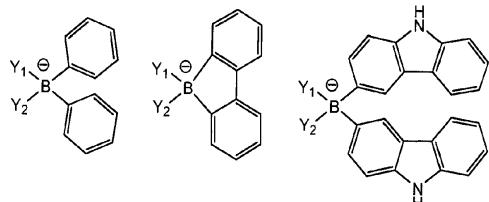
아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

[0073]

한 측면에서,  $Y_3$  및  $Y_4$ 는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:

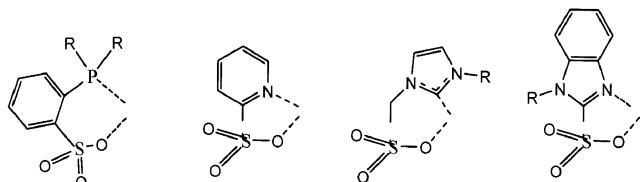


[0074]



[0075]

한 측면에서,  $Y_i$ 은  $SO_3Y^-$ 이다. 화학식  $SO_3Y^-$ 를 갖는 리간드  $Y_i$ 의 구체예에는 하기의 구조를 갖는 리간드들이 포함되나 이들로 국한되지 않는다:

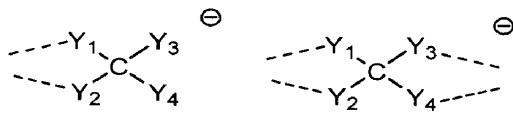


[0077]

상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

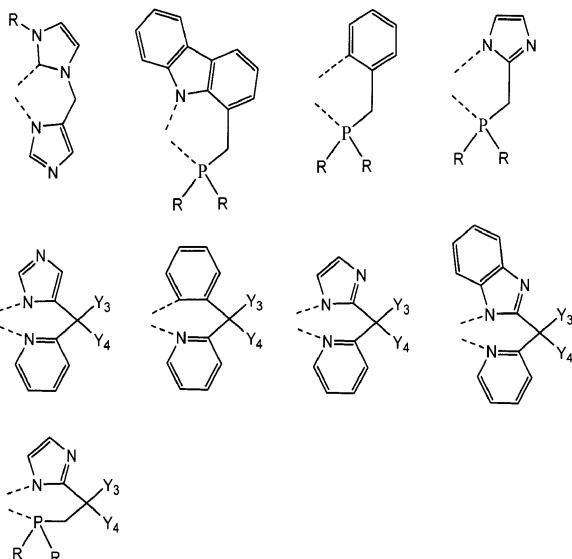
[0079]

한 측면에서,  $Y_i$ 은  $CY_4^-$ 이다. 바람직하게,  $CY_4^-$ 은 하기 화학식을 갖는다:



[0080]

화학식  $CY_4^-$ 를 갖는 리간드  $Y_i$ 의 구체예에는 하기의 구조를 갖는 리간드들이 포함되나 이들로 국한되지 않는다:



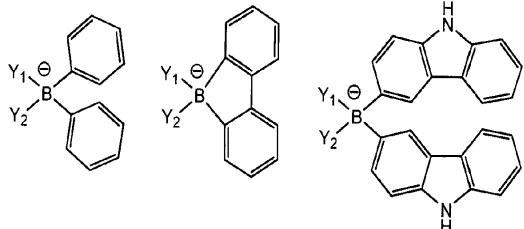
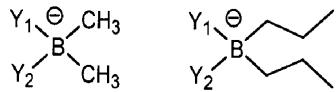
[0082]

상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로

아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

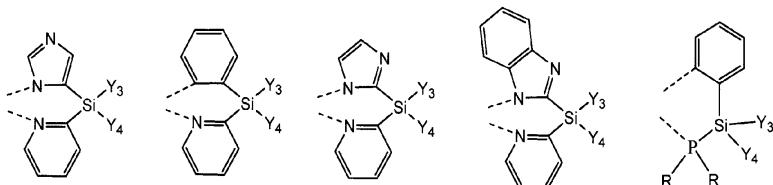
[0084]

한 측면에서,  $Y_3$  및  $Y_4$ 는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



[0085]

또 다른 측면에서,  $Y_i$ 은  $\text{SiY}_4^\ominus$ 이다. 화학식  $\text{SiY}_4^\ominus$ 를 갖는 리간드  $Y_i$ 의 구체예에는 하기의 구조를 갖는 리간드들이 포함되나 이들로 국한되지 않는다:

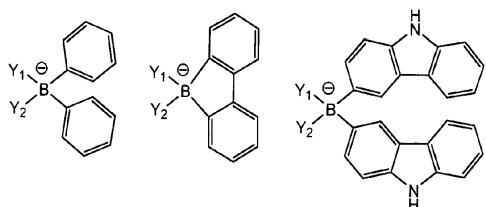
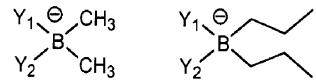


[0087]

상기 식 중에서, 각  $R$ 은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

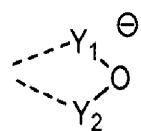
[0089]

한 측면에서,  $Y_3$  및  $Y_4$ 는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



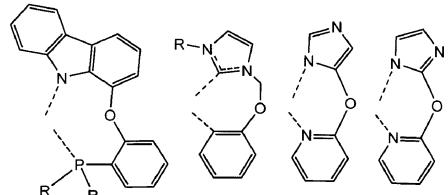
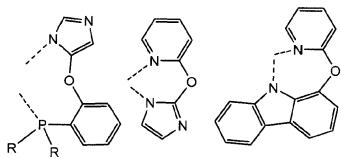
[0090]

또 다른 측면에서,  $Y_i$ 은  $\text{OY}_2^\ominus$ 이다. 바람직하게,  $\text{OY}_2^\ominus$ 은 하기 화학식을 갖는다:



[0092]

화학식  $\text{OY}_2^\ominus$ 를 갖는 리간드  $Y_i$ 의 구체예에는 하기의 구조를 갖는 리간드들이 포함되나 이들로 국한되지 않는다:

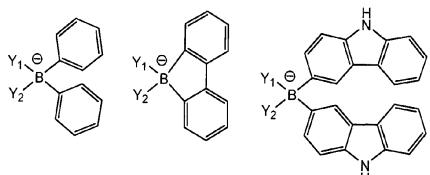
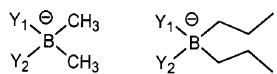


[0094]

상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

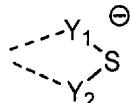
[0095]

한 측면에서,  $Y_3$  및  $Y_4$ 는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



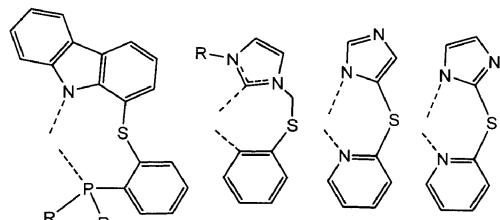
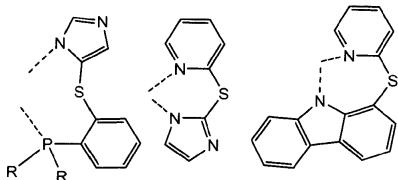
[0097]

또 다른 측면에서,  $Y_i$ 은  $SY_2^-$ 이다. 바람직하게,  $SY_2^-$ 는 하기 화학식을 갖는다:



[0099]

화학식  $SY_2^-$ 를 갖는 리간드  $Y_i$ 의 구체예에는 하기의 구조를 갖는 리간드들이 포함되나 이들로 국한되지 않는다:



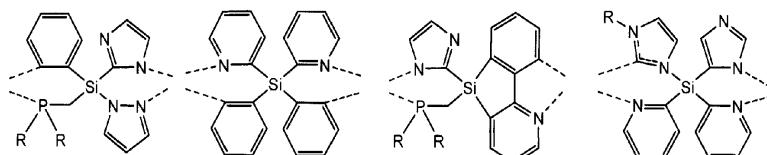
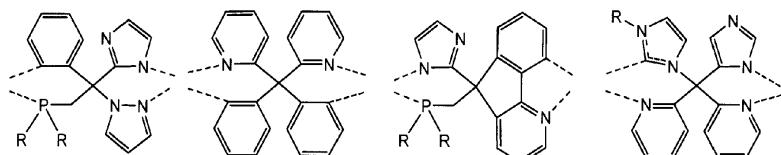
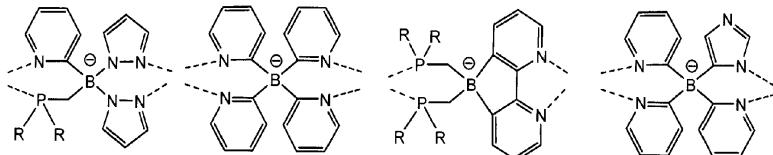
[0101]

상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤�테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

[0103]

한 측면에서, 착체는 2개의 구리(I) 중심을 포함한다. 2개의 구리(I) 중심을 포함하는 착체의 비제한적 예에는

하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택되는 치체가 포함된다:

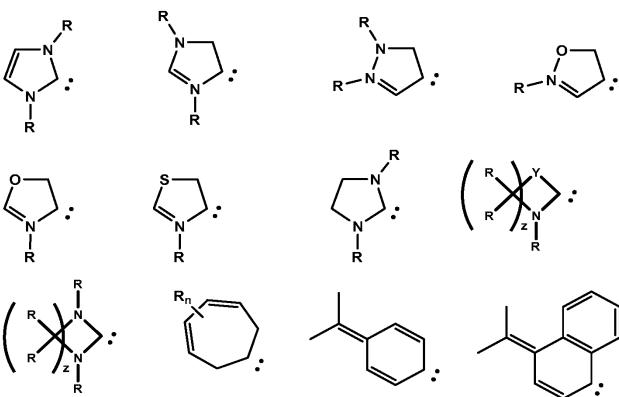


[0104]

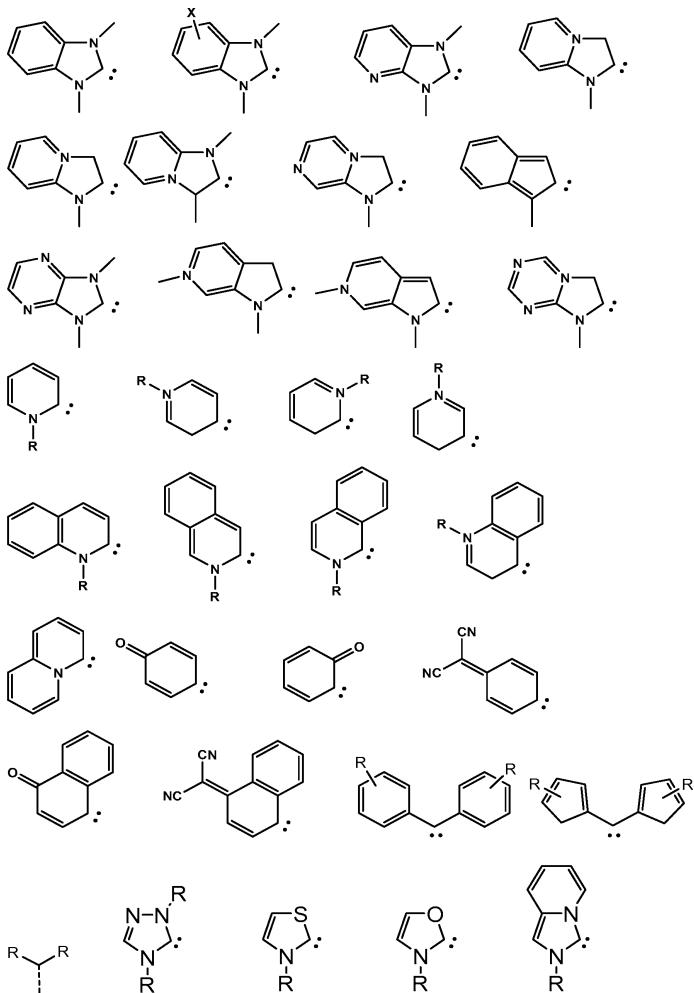
[0105] 상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

[0106]

추가의 측면에서, 카르벤 리간드는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



[0107]

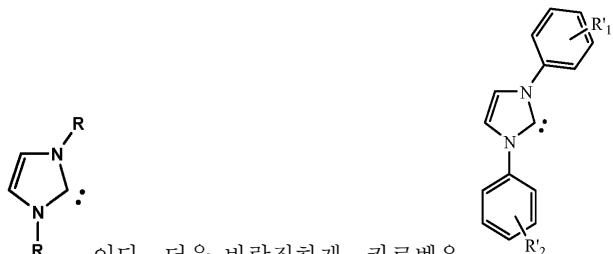


[0108]

[0109] 상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. z는 1, 2, 3 또는 4이다.

[0110]

[0110] 또 다른 측면에서, 각 R은 카르바졸, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 아자카르바졸, 아자디벤조푸란 및 아자디벤조티오펜으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되는 치환기를 포함한다.



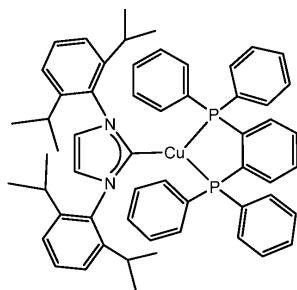
[0111]

바람직하게, 카르벤은 이다. 더욱 바람직하게, 카르벤은 이다.

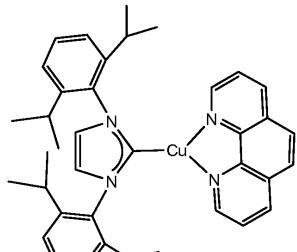
[0112]

[0112] 상기 식 중에서, R'<sub>1</sub> 및 R'<sub>2</sub>는 1, 2, 3 또는 4 치환을 나타낼 수 있다. R'<sub>1</sub> 및 R'<sub>2</sub>는 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. 한 측면에서, R'<sub>1</sub> 및 R'<sub>2</sub> 중 하나 이상은 3개 이상의 탄소 원자를 갖는 알킬이다.

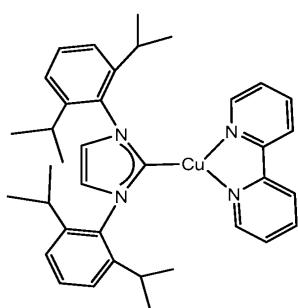
[0113] 바람직하게, 쪽체는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



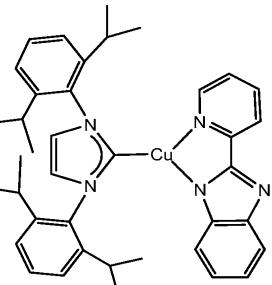
쪽체 1



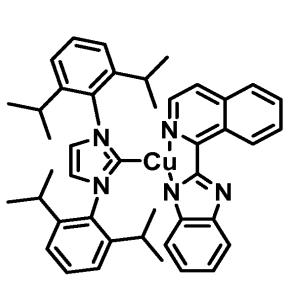
쪽체 2



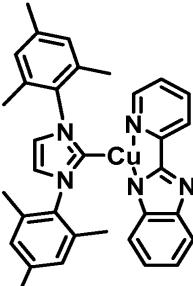
쪽체 3



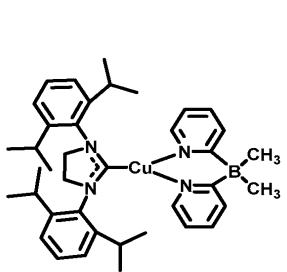
쪽체 4



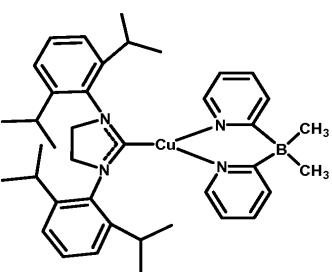
쪽체 5



쪽체 6



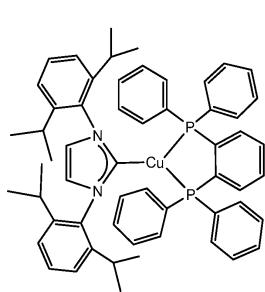
쪽체 7



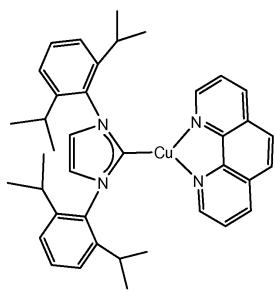
쪽체 8

[0115]

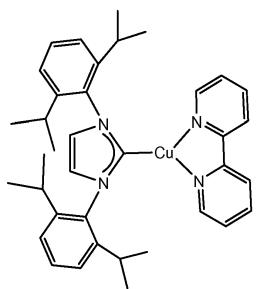
[0116] 바람직하게, 쪽체는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



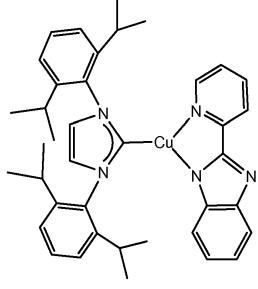
착체 1



착체 2



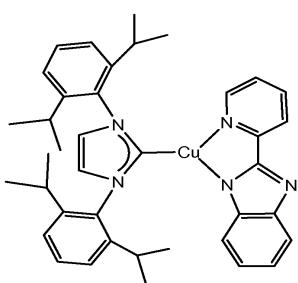
착체 3



착체 4

[0117]

보다 바람직하게, 착체는 하기의 것이다:



[0119]

착체 4

[0120]

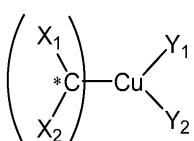
착체 4

[0121]

또 다른 측면에서, 착체는 하기 화학식 IV를 갖는다:

[0122]

[화학식 IV]



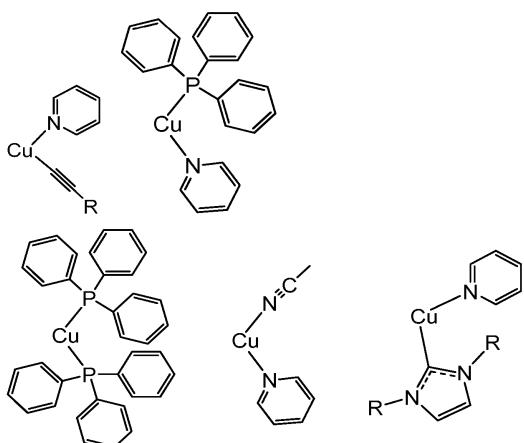
[0123]

[0124]

상기 식 중에서,  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되는 치환기이다.  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 추가로 치환될 수 있다.  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 결합하지 않는다. 각각의  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 Cu와 함께 결합을 형성한다.

[0125]

한 측면에서, 착체는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:

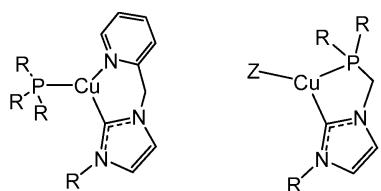


[0126]

상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

[0128]

또 다른 측면에서, 카르بن 리간드는 두 자리이다. 바람직하게, 착체는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:

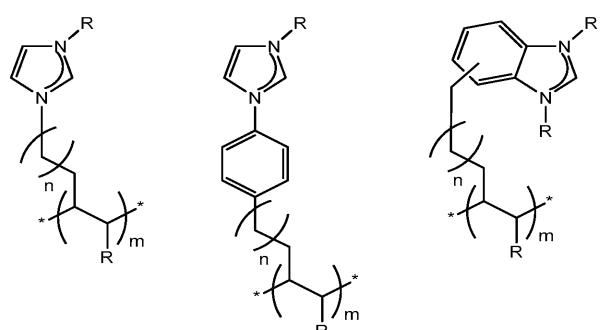


[0129]

상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. Z는 한 자리 리간드이다.

[0131]

한 측면에서, 착체는 중합체 내에 포함된다. 또 다른 측면에서, 착체는 중합체의 반복 단위 내에 포함된다. 또 다른 측면에서, 착체는 중합체에 펜단트(pendant)되어 있다. 바람직하게, 중합체는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:

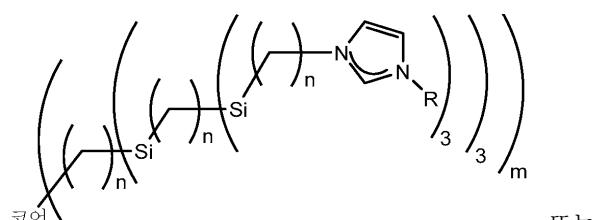


[0132]

상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. m은 2 초과이다. n은 0 내지 20이다.

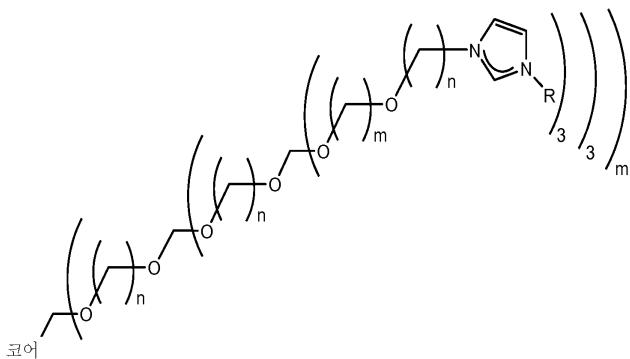
[0134]

또 다른 측면에서, 착체는 수지상 착체 내에 포함된다. 바람직하게, 수지상 착체는 하기 화학식의 것들이다:



[0135]

또는



[0136]

[0137] 상기 식 중에서, 코어는 C, Si, Ge, Sn, Pb, N, P 및 As로 이루어진 군으로부터 선택되는 다가 원소 또는 분자이다. 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. m은 1 초과이다. n은 0 내지 20이다.

[0138]

또 다른 측면에서, 착체는 소분자 내에 포함된다.

[0139]

인광 착체를 포함하는 장치도 또한 제공된다. 유기 발광 장치를 포함하는 제1 장치는 애노드, 캐소드; 및 애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기층을 추가로 포함한다. 인광 착체 그 자체를 추가로 포함하는 유기층은 3-배위 구리 원자 및 카르벤 리간드를 포함한다. 바람직하게, 제1 장치는 소비자 제품이다. 그 장치는 상기 화학식 I, 화학식 II, 화학식 III 또는 화학식 IV를 갖는 착체를 포함할 수 있다. 화학식 I, 화학식 II, 화학식 III 또는 화학식 IV를 갖는 착체에 대해 바람직한 것으로 기재된 치환기, 리간드 및 착체에 대한 선택은 또한, 화학식 I, 화학식 II, 화학식 III 또는 화학식 IV를 갖는 착체를 비롯한 착체를 포함하는 장치에 사용하기에 바람직하다. 이 선택에는 X<sub>1</sub>, X<sub>2</sub>, X'<sub>1</sub>, X'<sub>2</sub>, Y<sub>1</sub>, Y<sub>2</sub>, Y'<sub>1</sub>, Y'<sub>2</sub>, Y<sub>i</sub>, R, X 및 Z에 대해 기재된 것들이 포함된다.

[0140]

화학식 I, 화학식 II, 화학식 III 또는 화학식 IV를 갖는 착체에 대해 바람직한 것으로 기재된 치환기, 리간드 및 착체에 대한 선택은 또한, 화학식 I, 화학식 II, 화학식 III 또는 화학식 IV를 갖는 착체를 비롯한 착체를 포함하는 장치에 사용하기에 바람직하다. 이 선택에는 X<sub>1</sub>, X<sub>2</sub>, X'<sub>1</sub>, X'<sub>2</sub>, Y<sub>1</sub>, Y<sub>2</sub>, Y<sub>3</sub>, Y<sub>4</sub>, Y<sub>5</sub>, Y'<sub>1</sub>, Y'<sub>2</sub>, Y<sub>i</sub>, R, X 및 Z에 대해 기재된 것들이 포함된다.

#### 도면의 간단한 설명

[0142] 도 1은 유기 발광 장치를 도시한다.

[0143] 도 2는 분리된 전자 수송층을 가지지 않는 반전(inverted) 유기 발광 장치를 도시한다.

[0144] 도 3은 3-배위 구리 원자에 배위된 카르벤 리간드를 포함하는 착체를 도시한다.

[0145] 도 4는 착체 1의 <sup>1</sup>H-NMR 스펙트럼을 도시한다.

[0146] 도 5는 착체 2의 <sup>1</sup>H-NMR 스펙트럼을 도시한다.

[0147] 도 6은 착체 3의 <sup>1</sup>H-NMR 스펙트럼을 도시한다.

[0148] 도 7은 착체 4의 <sup>1</sup>H-NMR 스펙트럼을 도시한다.

[0149] 도 8은 착체 1의 MALDI 스펙트럼을 도시한다.

[0150] 도 9는 착체 2의 MALDI 스펙트럼을 도시한다.

[0151] 도 10은 착체 3의 MALDI 스펙트럼을 도시한다.

[0152] 도 11은 착체 4의 MALDI 스펙트럼을 도시한다.

[0153] 도 12는 착체 1의 흡수 스펙트럼을 도시한다.

[0154] 도 13은 착체 2의 흡수 스펙트럼을 도시한다.

[0155] 도 14는 착체 3의 흡수 스펙트럼을 도시한다.

- [0156] 도 15는 착체 4의 흡수 스펙트럼을 도시한다.
- [0157] 도 16A는 착체 4의 흡수 스펙트럼을 도시하고; 도 16B는 착체 4의 방출 스펙트럼을 도시한다.
- [0158] 도 17A는 착체 1의 여기 스펙트럼 및 방출 스펙트럼을 도시하고; 도 17B는 착체 2의 여기 스펙트럼 및 방출 스펙트럼을 도시한다.
- [0159] 도 18A는 착체 3의 여기 스펙트럼 및 방출 스펙트럼을 도시하고; 도 18B는 착체 4의 여기 스펙트럼 및 방출 스펙트럼을 도시한다.
- [0160] 도 19A는 착체 2의 X-선 구조를 도시하고; 도 19B는 착체 4의 X-선 구조를 도시한다.
- [0161] 도 20은 착체 1의  $^{31}\text{P}$ -NMR 스펙트럼을 도시한다.
- [0162] 도 21은 착체 5의  $^1\text{H}$ -NMR 스펙트럼을 도시한다.
- [0163] 도 22는 착체 5의 X-선 구조를 도시한다.
- [0164] 도 23은 착체 6의 LCMS 스펙트럼을 도시한다.
- [0165] 도 24A는 77K에서 2MeTHF 중의 착체 5의 보정 방출 스펙트럼 및 여기 스펙트럼을 도시하고; 도 24B는 77K에서 2MeTHF 중의 착체 6의 보정 방출 스펙트럼 및 여기 스펙트럼을 도시한다.
- [0166] 도 25는 실온에서 PMMA 필름에서의 착체 4의 보정 방출 스펙트럼을 도시한다.
- [0167] 도 26A는 실온에서  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  중의 착체 4의 보정 방출 스펙트럼을 도시하고; 도 26B는 실온에서  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  중의 착체 2의 보정 방출 스펙트럼을 도시한다.
- [0168] 도 27은 착체 7의  $^1\text{H}$ -NMR 스펙트럼을 도시한다.
- [0169] 도 28A는 착체 7의  $^1\text{H}$ -NMR 스펙트럼을 도시하고; 도 28B는 착체 7의  $^{11}\text{B}$ -NMR 스펙트럼을 도시한다.
- [0170] 도 29A는 77K에서 2MeTHF 중의 착체 7의 여기 스펙트럼 및 방출 스펙트럼을 도시하고; 도 29B는 77K에서 2MeTHF 중의 착체 8의 여기 스펙트럼 및 방출 스펙트럼을 도시한다.
- [0171] 도 30A는 착체 7의 흡수 스펙트럼을 도시하고; 도 30B는 착체 7의 X-선 구조를 도시한다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0172] **발명의 상세한 설명**
- [0173] 일반적으로, OLED는, 애노드와 캐소드 사이에 배치되고 애노드와 캐소드에 전기적으로 연결된 하나 이상의 유기 층을 포함한다. 전류가 인가될 때, 유기층(들)에 애노드는 정공을 주입하고 캐소드는 전자를 주입한다. 주입된 정공 및 전자는 각기 반대로 하전된 전극으로 이동한다. 전자 및 정공이 동일한 분자에 국재화될 때, 여기된 에너지 상태를 갖는 국재화된 전자-정공 쌍인 "액시톤"이 형성된다. 액시톤이 광방출 기구를 통해 이완될 때, 발광된다. 일부 경우에, 액시톤은 액시며 또는 액시플렉스 상에 국재화될 수 있다. 비방사 기구, 예컨대 열 이완도 또한 일어날 수 있으나, 일반적으로 바람직하지 않은 것으로 간주된다.
- [0174] 초기 OLED는 예를 들어, 미국 특허 제4,769,292호(본원에 전문이 참조 인용됨)에 개시되어 있는 바와 같은 단일 항(singlet) 상태로부터 발광하는 방출성 문자("형광")를 이용한다. 형광 방출은 일반적으로 10 나노초 미만의 시간틀에서 일어난다.
- [0175] 보다 최근에, 삼중항 상태로부터 발광하는 방출성 물질("인광")을 갖는 OLED가 입증되었다. 문헌[Baldo et al., "Highly Efficient Phosphorescent Emission from Organic Electroluminescent Devices," Nature, vol. 395, 151-154, 1998; ("Baldo-I") and Baldo et al., "Very high-efficiency green organic light-emitting devices based on electrophosphorescence," Appl. Phys. Lett., vol. 75, No. 3, 4-6 (1999) ("Baldo-II")]에 전문이 참조 한다. 인광은 미국 특허 제7,279,704호의 제5-6열(본원에 참조 인용됨)에 더욱 상세히 기재된다.
- [0176] 도 1은 유기 발광 장치 100을 도시한다. 본 도면은 반드시 척도에 비례하여 도시된 것은 아니다. 장치 100은 기판 110, 애노드 115, 정공 주입층 120, 정공 수송층 125, 전자 차단층 130, 방출층 135, 정공 차단층 140, 전

자 수송층 145, 전자 주입층 150, 보호층 155 및 캐소드 160을 포함할 수 있다. 캐소드 160은 첫 번째 도전층 162 및 두 번째 도전층 164를 갖는 착체 캐소드가다. 장치 100은 기재된 층들을 순서대로 침착시킴으로써 제작될 수 있다. 이들의 각종 층들 및 예시 물질의 성질 및 기능이 미국 특허 제7,279,704호의 제6-10열(본원에 참조 인용됨)에 더욱 상세히 기재되어 있다.

[0177] 각각의 이 층들의 추가 예들이 이용가능하다. 예를 들어, 가요성 및 투명 기판-애노드 조합이 미국 특허 제5,844,363호(본원에 전문이 참조 인용됨)에 개시되어 있다. p-도핑 정공 수송층의 한 예가, 미국 특허 출원 공개 제2003/0230980호(본원에 전문이 참조 인용됨)에 개시된 바와 같은, 50:1의 몰비의 F<sub>4</sub>-TCNQ로 도핑된 m-MTADATA이다. 방출성 및 호스트 물질의 예가 미국 특허 제6,303,238호(Thompson et al.)(본원에 전문이 참조 인용됨)에 개시되어 있다. n-도핑 전자 수송층의 한 예가 미국 특허 출원 공개 제2003/0230980호(본원에 전문이 참조 인용됨)에 개시된 1:1의 몰비의 Li로 도핑된 BPhen이다. 미국 특허 제5,703,436호 및 제5,707,745호(본원에 전문이 참조 인용됨)는 중첩 투명 전기전도성 스퍼터-침착 ITO 층을 갖는, Mg:Ag와 같은 금속의 박층을 갖는 착체 캐소드를 포함하는 캐소드의 예를 개시한다. 차단층의 이론 및 용도가 미국 특허 제6,097,147호 및 미국 특허 출원 공개 제2003/0230980호(본원에 전문이 참조 인용됨)에 더욱 상세히 기재되어 있다. 주입층의 예가 미국 특허 출원 공개 제2004/0174116호(본원에 전문이 참조 인용됨)에 제공되어 있다. 보호층에 대한 설명은 미국 특허 출원 공개 제2004/0174116호(본원에 전문이 참조 인용됨)에서 찾아볼 수 있다.

[0178] 도 2는 반전 OLED 200을 도시한다. 장치는 기판 210, 캐소드 215, 방출층 220, 정공 수송층 225 및 애노드 230을 포함한다. 장치 200은 기재된 층들을 순서대로 침착시킴으로써 제작될 수 있다. 가장 통상적인 OLED 구성이 애노드 위에 배치된 캐소드를 가지고 장치 200은 애노드 230 아래에 배치된 캐소드를 215에 가지기 때문에, 장치 200은 "반전" OLED로 지칭될 수 있다. 장치 100에 대해 기재된 것들과 유사한 물질이 장치 200의 상응하는 층에 사용될 수 있다. 도 2는 일부 층이 장치 100의 구조에서 어떻게 생략될 수 있는지의 한 예를 제공한다.

[0179] 도 1 및 2에 도시된 단순 층상 구조가 비제한적 예로서 제공되어 있고, 본 발명의 실시양태가 매우 다양한 기타 구조들과 연결되어 사용될 수 있음을 이해한다. 기재된 구체적 물질 및 구조는 본질적으로 예시적인 것으로서, 기타 물질 및 구조도 사용될 수 있다. 기능적 OLED는 상이한 방식으로 기재된 각종 층들을 조합함으로써 달성될 수 있거나, 층들이 전적으로 디자인, 성능 및 비용 인자들에 기초하여 생략될 수 있다. 구체적으로 기재되지 않은 기타 층들도 또한 포함될 수 있다. 구체적으로 기재된 것들 외의 물질이 사용될 수 있다. 본원에 제공된 예들 중 다수가 각종 층들이 단일 물질을 포함하는 것으로 기재하고 있으나, 물질들의 조합, 예컨대 호스트와 도판트의 혼합물 또는 더욱 일반적으로는 혼합물이 사용될 수 있는 것으로 이해한다. 또한, 층은 각종 하위층을 가질 수 있다. 본원의 각종 층에 주어진 명칭은 엄격히 제한적인 것으로 의도되지 않는다. 예를 들어, 장치 200에서, 정공 수송층 225는 방출층 220에 정공을 수송하고 정공을 주입하며, 또한 정공 수송층 또는 정공 주입층으로 기재될 수 있다. 한 실시양태에서, OLED는 캐소드와 애노드 사이에 배치된 "유기층"을 갖는 것으로 기재될 수 있다. 이 유기층은 단일 층을 포함할 수 있거나, 예를 들어 도 1 및 2에 대해 기재된 다른 유기 물질들의 다수 층을 추가로 포함할 수 있다.

[0180] 구체적으로 기재되지 않은 구조 및 물질, 예컨대 미국 특허 제5,247,190호(Friend et al.)(본원에 전문이 참조 인용됨)에 개시된 것과 같은 중합체성 물질(PLED)을 포함하는 OLED도 또한 사용될 수 있다. 추가 예로서, 단일 유기층을 갖는 OLED가 사용될 수 있다. OLED는, 예를 들어 미국 특허 제5,707,745호(Forrest et al.)(본원에 전문이 참조 인용됨)에 개시된 바와 같이 적층될 수 있다. OLED 구조는 도 1 및 2에 도시된 단일 층상 구조에서 이탈될 수 있다. 예를 들어, 기판은 예컨대 미국 특허 제6,091,195호(Forrest et al.)에 기재된 바와 같은 메사 구조 및/또는 미국 특허 제5,834,893호(Bulovic et al.)(본원에 전문이 참조 인용됨)에 기재된 바와 같은 피트 구조와 같이, 아웃-커플링(out-coupling)을 향상시키는 각형 반사 표면을 포함할 수 있다.

[0181] 달리 특정되지 않는 한, 각종 실시양태의 층들 중 임의의 층은 임의의 적당한 방법에 의해 침착될 수 있다. 유기층에 대해, 바람직한 방법은, 예컨대 미국 특허 제6,013,982호 및 제6,087,196호(본원에 전문이 참조 인용됨)에 기재된 열 증발, 잉크젯이 예컨대 미국 특허 제6,337,102호(Forrest et al.)(본원에 전문이 참조 인용됨)에 기재된 바와 같은 유기 증기상 침착(OVPD), 및 예컨대 미국 특허 출원 일련 번호 제10/233,470호(본원에 전문이 참조 인용됨)에 기재된 바와 같은 유기 증기 제트 인쇄(OVJP)에 의한 침착을 포함한다. 기타 적당한 침착 방법은 스핀 코팅 및 기타 용액 기재 공정을 포함한다. 용액 기재 공정은 바람직하게 질소 또는 불활성 대기 중에 수행된다. 기타 층에 대해, 바람직한 방법은 열 증발을 포함한다. 바람직한 패터닝 방법은 마스크를 통한 침착, 미국 특허 제6,294,398호 및 제6,468,819호(본원에 전문이 참조 인용됨)에 기재된 바와 같은 냉 용접, 및 잉크젯 및 OVJD와 같은 침착 방법 중 몇몇과 연관된 패터닝이 포함된다. 기타 방법들도 또한 사용될 수 있다.

침착되는 물질은 특정 침착 방법과 상용적이 되도록 변형될 수 있다. 예를 들어, 분지 또는 비분지형의, 바람직하게 3개 이상의 탄소 원자를 갖는, 알킬기 및 아릴기와 같은 치환기가 소분자에 사용되어, 용액 처리를 겪는 자체 능력을 증진시킬 수 있다. 20 이상의 탄소수를 갖는 치환기가 사용될 수 있고, 3 내지 20의 탄소수가 바람직한 범위이다. 비대칭 구조를 갖는 물질은 대칭 구조를 갖는 것보다 더 양호한 용액 처리능을 가질 수 있는데, 이는 비대칭 물질이 재결정화하는 경향이 보다 적을 수 있기 때문이다. 용액 처리를 겪는 소분자의 능력을 증진시키기 위해, 텐드리며 치환기가 사용될 수 있다.

[0182] 본 발명의 실시양태에 따라 제작된 장치는 평판 디스플레이, 컴퓨터 모니터, 텔레비전, 옥외광고판, 내장 또는 외장 조명 및/또는 신호용 라이트, 천정형 디스플레이, 완전 투명 디스플레이, 가요성 디스플레이, 레이저 인쇄기, 전화기, 휴대폰, 개인용 디지털 보조 장치(PDA), 랙탑 컴퓨터, 디지털 카메라, 캠코더, 뷰파인더, 마이크로-디스플레이, 차량, 대형 구역 벽, 극장 또는 스타디움 스크린 또는 간판을 비롯한 매우 다양한 소비자 제품에 도입될 수 있다. 수동형 매트릭스 및 능동형 매트릭스를 비롯한, 본 발명에 따라 제작된 장치를 제어하기 위해, 각종 조절 기구를 사용할 수 있다. 다수의 장치들이 인간에 편안한 온도 범위, 예컨대 18°C 내지 30°C, 더욱 바람직하게는 실온(20 내지 25°C)에 사용하도록 의도된다.

[0183] 본원에 기재된 물질 및 구조는 OLED 이외의 장치에 용도를 가질 수 있다. 예를 들어, 유기 태양 전지 및 유기 광검출기와 같은 기타 광전자 장치가 상기 물질 및 구조를 이용할 수 있다. 보다 일반적으로, 유기 장치, 예컨대 유기 트랜지스터가 상기 물질 및 구조를 이용할 수 있다.

[0184] 용어 할로, 할로겐, 알킬, 시클로알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 복소환기, 아릴, 방향족 기 및 헤테로아릴이 당업계에 공지되어 있고, 미국 특허 제7,279,704호의 제31-32열(본원에 참조 인용됨)에 정의되어 있다.

[0185] 카르벤 리간드를 갖는 신규 삼각 평면 구리 착체가 제공되어 있다(도 3에 도시됨). 특히, 착체는 3-배위 구리 원자에 배위된 한 자리 또는 두 자리 카르벤 리간드를 포함한다. 착체는 하전되거나 중성일 수 있다. 이 착체는 유기 발광 장치에 유리하게 사용될 수 있다.

[0186] 인광 구리 착체 및 이의 유기 발광 다이오드(OLED) 내로의 도입이 공지되어 있다. 예를 들어, 문헌[Armaroli, N.; Accorsi, G.; Holler, M.; Moudam, O.; Nierengarten, J. F.; Zhou, Z.; Wegh, R. T.; Welter, R., Highly luminescent Cu-I complexes for light-emitting electrochemical cells. *Advanced Materials* 2006, 18, (10), 1313-1316; Zhang, Q. S.; Zhou, Q. G.; Cheng, Y. X.; Wang, L. X.; Ma, O. G.; Jing, X. B.; Wang, F. S., Highly efficient green phosphorescent organic light-emitting diodes based on Cu-I complexes. *Advanced Materials* 2004, 16, (5), 432436; Yersin, H.; Monkowius, D.; Czerwieniec, R.; Yu, I., Copper(I) N-heterocyclic chelate phosphine complexes as blue-emitting materials for organic electroluminescence devices. PCT Int. Appl. (2010), WO 2010031485 A1 20100325; and Ikeda, S.; Nagashima, H.; Ogiwara, T., Copper complexes and their use for luminescent materials, organic electroluminescence elements, and devices containing the elements. Jpn. Kokai Tokkyo Koho (2008)] 및 일본 특허 제2008303152A호 및 제20081218호를 참조한다. 그러나, 보고된 착체는 한계가 있다. 카르벤과 킬레이트화 음이온성 리간드를 모두 갖는 새 부류의 고 인광 구리 착체가 제공된다. 카르벤 리간드는 착체 안정성을 제공하고 인광성을 증진시킬 것으로 사료된다. 킬레이트화 음이온성 리간드는 금속-대-리간드 전하 이동 상호작용을 지지할 수 있는 고 삼중향 에너지 리간드이다. 이 부류의 착체는 고 에너지 인광성을 제공할 수 있고, 이는 구리 착체가 방출성 도판트인 도핑된 OLED의 제작에 유용할 수 있다. 이 물질은 또한 OLED 구조에서 방출성 도판트를 지지하는 호스트 물질로서 사용될 수도 있다. 예를 들어, 이 부류의 화합물 내의 디페리딜 보레이트 착체는 475 nm의 방출 최대 및 고체 상태에서의 0.95의 광발광 효율을 갖는다. 퍼리딜기의 적당한 치환은 이 방출을 실질적으로 적색 또는 청색 이동시킬 수 있다. 이 구리 착체는, 방출 에너지를 조율하는 능력으로 인해 OLED를 위한 우수한 방출자 및 호스트 물질이 될 수 있다. 방출 에너지는 상기 화합물이 암청색 내지 자색 방출성 도판트를 위한 적당한 호스트 물질이 되도록 하기에 충분히 많이 이동될 수 있는 것으로 사료된다.

[0187] 인광 OLED는 방출자로서 중금속 착체에 크게 의존하였다. 특히, 장치는 Ir 또는 Pt를 함유하는 방출자를 종종 이용하여, 스핀 오비탈 커플링을 유도한다. 4면 구리 착체가 보고되고, 이는 실온에서 인광을 발하는 것으로 알려져 있다. 그러나, 사각 구리 착체는 특정 한계가 있을 수 있다. 특히, 평탄화 트틀립은 비방사율을 증가시킬 수 있고, 이는 발광도 효율의 감소를 초래한다. 삼각 평면 구리 카르벤 착체가 실온에서 효율적인 인광을 제공하는 것으로 현재 밝혀졌다. 본 발명자는 이 것이, 삼각 평면 구리 착체로부터 인광의 첫 번째 관찰인 것으로 사료한다.

[0188] 삼각 평면 구리 착체는 또한 OLED에 사용하기 위한 수가지 이점도 갖는다. 특히, 삼각 평면 구리 착체는 수십

마이크로초 범위의 비교적 짧은 수명을 갖는다(표 1 참조). 표 1은 수가지 상이한 삼각 평면 구리 카르벤 착체의 수명을 보여준다. 일반적으로, 삼각 구리 착체의 수명은 Ir 착체보다 길고(즉, 1 내지 10  $\mu$ s) 백금 포르파린 착체의 수명보다는 짧다.

표 1

[0189]	고체 상태 QY	수명 77K 2MeTHF	$\lambda_{\max}$ 77K 2MeTHF
착체 1	31.8%	$\tau_1=1143 \mu s$ (30.1%) $\tau_2=458.5 \mu s$ (69.6%)	440 nm
착체 2	2.6%	$\tau=10.6 \mu s$	605 nm
착체 3	0.5%	$\tau=0.7 \mu s$	615 nm
착체 4	43.3% 33%(PMMA 필름)	$\tau=55.9 \mu s$	545 nm

[0190] 특히, 구리 착체 중 수갖는 실온에서 효율적 인광을 제공하고, 비교적 짧은 수명, 즉 수십 마이크로초 범위의 수명을 갖는다. 표 2는 수가지의 상이한 삼각 평면 구리 카르벤 착체의 수명을 보여준다.

표 2

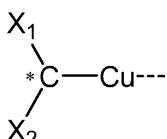
[0191]	고체 상태 QY	수명 77K 2MeTHF	$\lambda_{\max}$ 77K 2MeTHF
착체 1	31.8%	$\tau=656 \mu s$	443 nm
착체 2	2.6%	$\tau_1=1.8 \mu s$ (24%) $\tau_2=4.6 \mu s$ (76%)	630 nm
착체 3	0.5%	$\tau=0.7 \mu s$	645 nm
착체 4	58% 35%(PMMA 필름)	$\tau=55.9 \mu s$	555 nm
착체 5	13.5%	$\tau=2312 \mu s$	562; 574; 610; 660 nm
착체 6	21%	$\tau=55 \mu s$	560 nm

[0192] 삼각 평면 구리 착체는 특정 용도를 위해 사용되는 OLED에 특히 유용할 수도 있다. 특히, 구리 착체는 조명 용도에 특히 유용한 보다 넓은 선 스펙트럼을 제공한다. 또한, 삼각 평면 구리 착체를 단 하나의 다른 착체와 조합하여 포함하는 장치는 적색, 녹색 및 청색을 포괄할 수 있다. 예를 들어, 삼각 평면 구리 착체 및 적색 방출자를 포함하는 장치는 조명에 필요한 모든 색을 포괄할 수 있다.

[0193] 신규 인광 착체로서, 3-배위 구리 원자에 배위된 카르벤 리간드를 포함하는 착체가 제공된다.

[0194] 한 측면에서, 카르벤 리간드는 하기 화학식 I를 갖는다:

[화학식 I]



[0195] [0196] 상기 식 중에서,  $^*C$ 는 1가 구리 원자 Cu에 배위된 2가 탄소 원자이다.  $X_1$  및  $X_2$ 는 알킬, 아민, 포스핀, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로부터 독립적으로 선택된 치환기이다.  $X_1$  및  $X_2$ 는 추가로 치환될 수 있고,  $X_1$  및  $X_2$ 는 임의적으로 연결되어 고리를 형성한다. 한 측면에서, 카르벤 리간드는 한 자리이다. 바람직하게, 각각의  $X_1$  및  $X_2$ 는 독립적으로  $^*C$ 와 결합을 형성한다. 제1 결합은  $^*C$ 와 치환기  $X_1$  내의 원자  $X'_1$  사이에 형성되고, 제2 결합은  $^*C$ 와 치환기  $X_2$  내의 원자  $X'_2$  사이에 형성된다.  $X'_1$  및  $X'_2$ 는 C, N, O, S 및 P로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

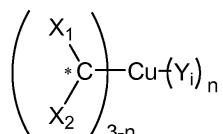
[0198] 또 다른 측면에서, 카르벤 리간드는 한 자리이다.

[0199] 한 측면에서,  $X_1$  및  $X_2$ 는 연결되어 고리를 형성하지 않는다. 또 다른 측면에서,  $X_1$  및  $X_2$ 는 연결되어 고리를 형성한다.

[0200] 한 측면에서, 구리 칙체는 중성이다. 중성 칙체는 OLED에서의 사용에 특히 유익할 수 있다. 예를 들어, 중성 칙체는 중착을 통해 침착될 수 있다. 또 다른 측면에서, 구리 칙체는 하전되어 있다.

[0201] 한 측면에서, 칙체는 하기 화학식 II를 갖는다:

[0202] [화학식 II]

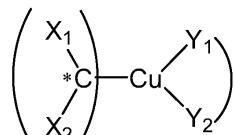


[0203]

상기 식 중에서,  $Y_i$ 은 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.  $Y_i$ 은 한 자리 리간드 또는 두 자리 리간드이다.  $n$ 은 1 또는 2이다. 바람직하게,  $n$ 은 2이다.

[0205] 또 다른 측면에서, 칙체는 하기 화학식 III를 갖는다:

[0206] [화학식 III]



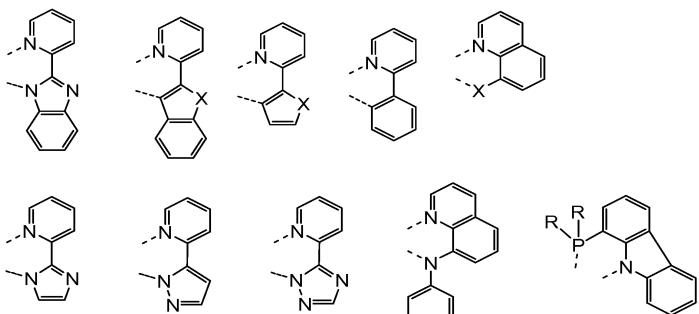
[0207]

상기 식 중에서,  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤�테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되는 치환기이다.  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 추가로 치환될 수 있다.  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 결합된다. 각각의  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 Cu와 함께 결합을 형성한다. 제1 결합은 Cu와 치환기  $Y_1$  내의 원자  $Y'_1$  사이에 형성되고, 제2 결합은 Cu와 치환기  $Y_2$  내의 원자  $Y'_2$  사이에 형성된다.  $Y'_1$ 은 N, P,  $^3C$ , O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택된다.  $Y'_2$ 는 N, P,  $^3C$ , 4가 탄소, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택된다. 바람직하게,  $Y'_1$ 는 N이다.

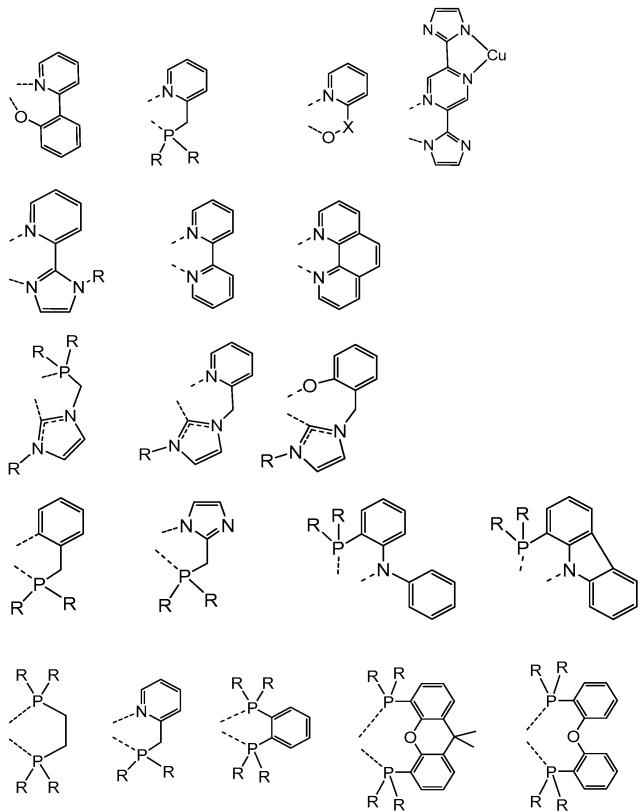
[0209] 칙체 내의 Cu 원자,  $Y'_1$  원자 및  $Y'_2$  원자는 4-원, 5-원, 6-원, 7-원 또는 8-원 환일 수 있는 환 내에 포함된다. 바람직하게, Cu,  $Y'_1$  및  $Y'_2$ 를 포함하는 환은 5-원 또는 6-원 환이다.

[0210] 한 측면에서,  $Y_1$ 은 피리딜, 피라졸, 알킬 아민, 이미다졸, 벤즈이미다졸, 트리아졸, 테트라졸, 피리다진, 피리미딘, 피라진, 트리아진, 테트라진, 옥사졸, 티아졸, 벤족사졸 및 벤조티아졸로 이루어진 군으로부터 선택된다.

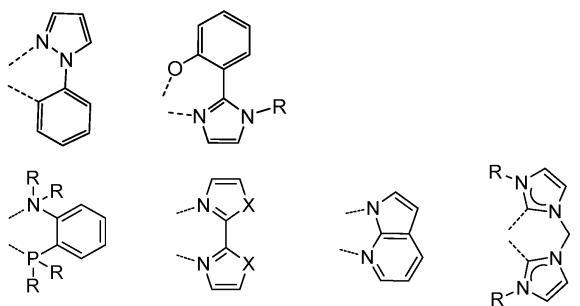
[0211] 또 다른 측면에서,  $Y_1-Y_2$ 는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



[0212]



[0213]

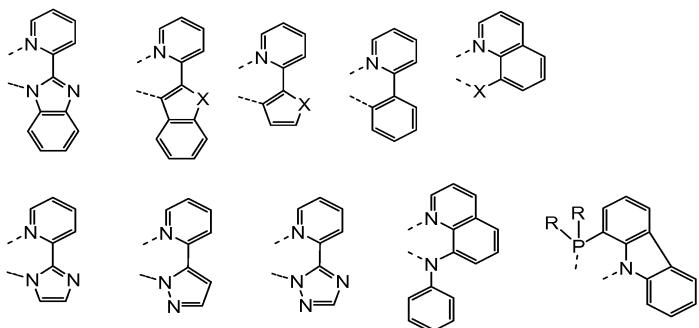


[0214]

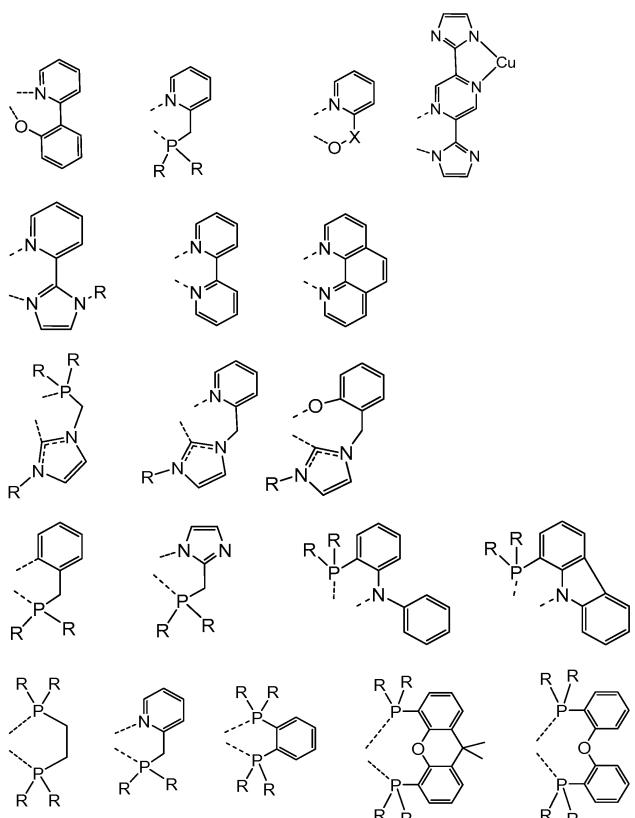
[0215] 상기 식 중에서, X는 NR, O, S, Se, CR<sub>2</sub> 및 CO로 이루어진 군으로부터 선택된다. 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. 각 환은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 치환기에 의해 추가로 치환된다.

[0216] 한 측면에서, 각 R은 카르바졸, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 아자카르바졸, 아자디벤조푸란 및 아자디벤조티오펜으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되는 치환기를 포함한다.

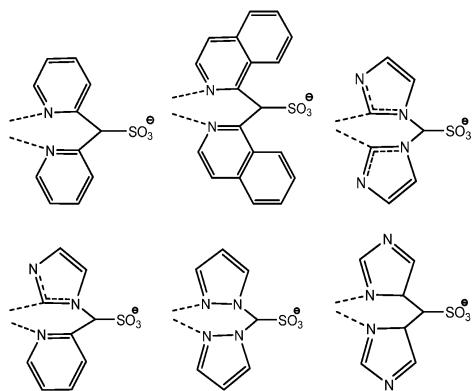
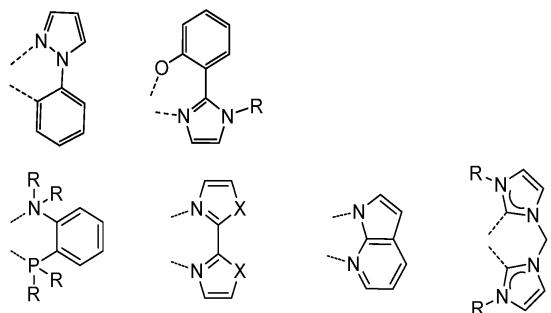
[0217] 또 다른 측면에서, Y<sub>1</sub> 내지 Y<sub>2</sub>는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



[0218]



[0219]



[0220]

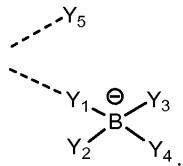
[0221] 상기 식 중에서, X는 NR, O, S, Se, CR<sub>2</sub> 및 CO로 이루어진 군으로부터 선택된다. 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. 각 환은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤�테로알킬, 아릴 및 헤�테로아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 치환기에 의해 추가로 치환된다.

[0222]

한 측면에서, 각 R은 카르바졸, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 아자카르바졸, 아자디벤조푸란 및 아자디벤조티오펜으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되는 치환기를 포함한다.

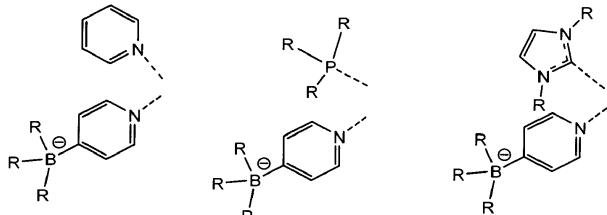
[0223] 또 다른 측면에서,  $Y_i$ 은  $BY_4^-$ ,  $SO_3Y^-$ ,  $CY_4^-$ ,  $SiO_4^-$ ,  $OY_2^-$  또는  $SY_2^-$ 를 함유하는 비공액 1가 음이온성 리간드이다. 각  $Y$ 는 수소, 알킬, 아릴, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

[0224] 한 측면에서,  $Y_i$ 은  $BY_4^-$ 이다. 또 다른 측면에서, 리간드  $Y_i$ 은 하나 이상이  $BY_4^-$ 인 2개의 한 자리 리간드를 포함한다. 바람직하게, 리간드  $Y_i$ 은 하기 화학식을 갖는다:



[0225]

[0226] 더욱 바람직하게, 하나 이상이  $BY_4^-$ 인 2개의 한 자리 리간드를 포함하는 리간드  $Y_i$ 은 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:

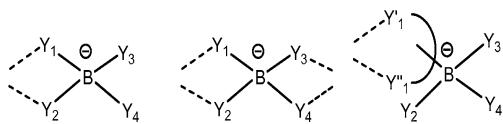


[0227]

[0228] 상기 식 중에서,  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 피리딜, 피리미딜, 피라지닐, 피리다지닐, 트리아지닐, 테트라지닐, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 피라졸릴, 이미다졸릴, 벤즈이미다졸릴, 옥사졸릴, 티아졸릴, 벤족사졸릴, 벤조티아졸릴 및 포스핀으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 융합, 예를 들어 벤즈고리화에 의해 연장될 수 있다. 부가적으로,  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 알킬, 아릴, 도너 또는 억셉터 기로 추가로 치환될 수 있다.  $Y_3$  및  $Y_4$ 는 수소, 알킬, 아릴, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. 한 측면에서,  $Y_3$  및  $Y_4$ 는 연결되어 고리를 형성하고, 그 고리는 융합, 예를 들어 벤즈고리화에 의해 연장될 수 있다.

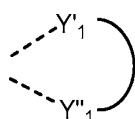
[0229]

또 다른 측면에서,  $Y_i$ 은 화학식  $BY_4^-$ 를 갖는 두 자리 리간드이다. 바람직하게, 리간드  $Y_i$ 은 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



[0230]

[0231] 이 측면에서,  $Y_i$ 은 하기 화학식을 갖는 두 자리 킬레이트화 리간드이다:

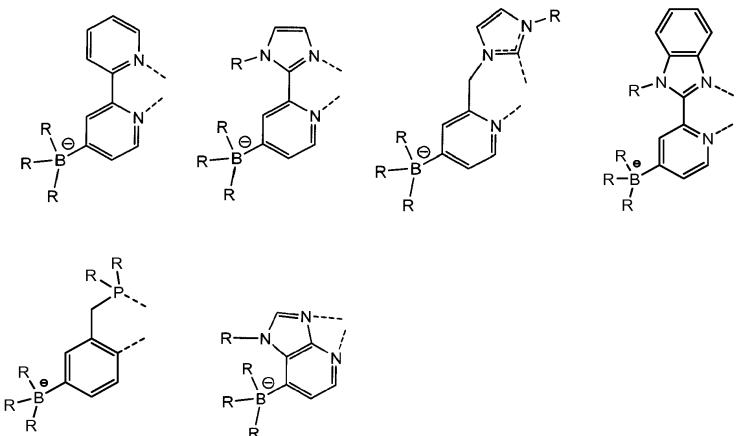


[0232]

[0233] 상기 식 중에서,  $Y'_1-Y''_1$ 은 중성, 즉 비하전된 킬레이트화 리간드를 나타낸다.  $Y'_1-Y''_1$ 는 금속 중심에 배위될 수 있다.

[0234]

$Y'_1-Y''_1$  리간드의 구체예에는 하기의 구조를 갖는 리간드들이 포함되나 이들로 국한되지 않는다:



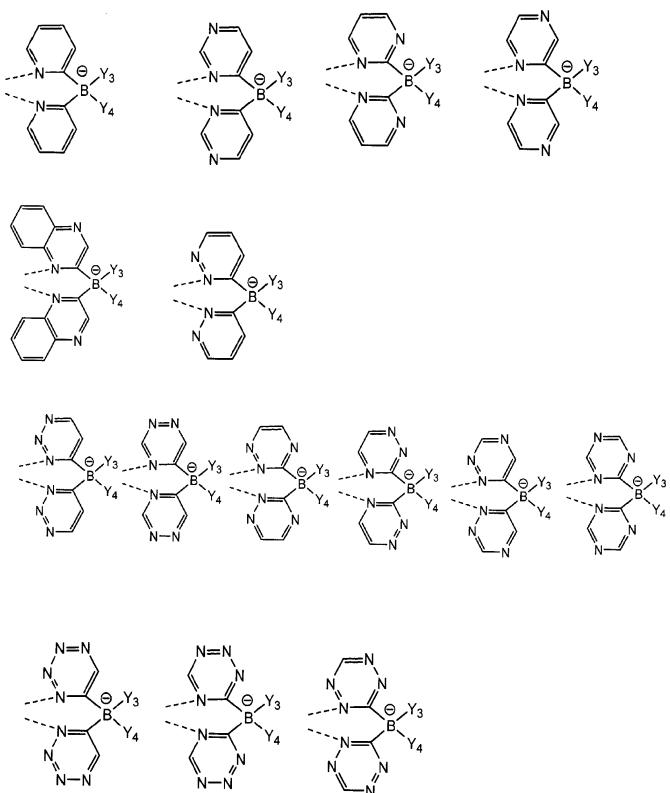
[0235]

[0236] 상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

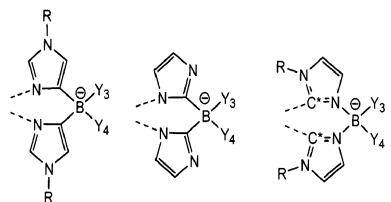
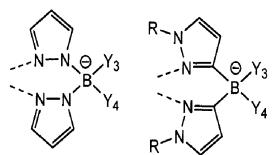
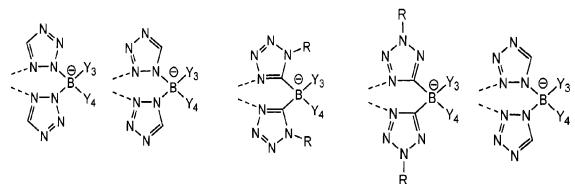
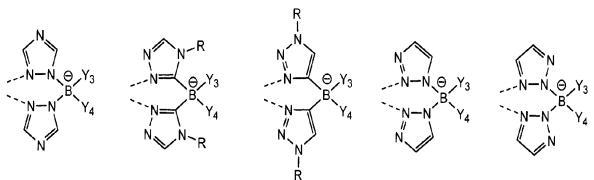
[0237]  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 피리딜, 피리미딜, 피라지닐, 피리다지닐, 트리아지닐, 테트라지닐, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 피라졸릴, 이미다졸릴, 벤즈이미다졸릴, 옥사졸릴, 티아졸릴, 벤족사졸릴, 벤조티아졸릴 및 포스핀으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 융합, 예를 들어 벤즈고리화에 의해 연장될 수 있다. 부가적으로,  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 알킬, 아릴, 도너 또는 억셉터 기로 추가로 치환될 수 있다.

[0238]  $Y_3$  및  $Y_4$ 는 수소, 알킬, 아릴, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. 한 측면에서,  $Y_3$  및  $Y_4$ 는 연결되어 고리를 형성하고, 그 고리는 융합, 예를 들어 벤즈고리화에 의해 연장될 수 있다.

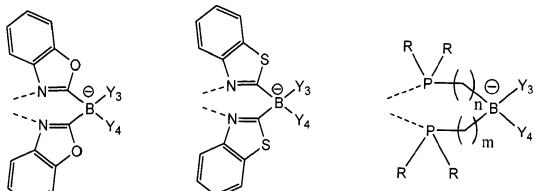
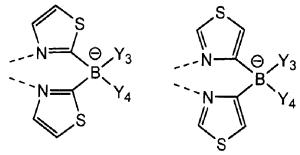
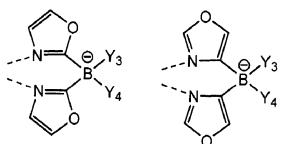
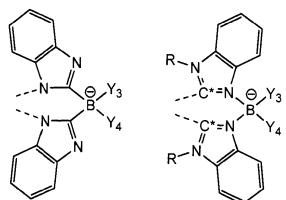
[0239] 한 측면에서,  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 동일하다.  $Y_1$  및  $Y_2$ 가 동일한 리간드의 구체예에는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택되는 리간드들이 포함되나 이들로 국한되지 않는다:



[0240]



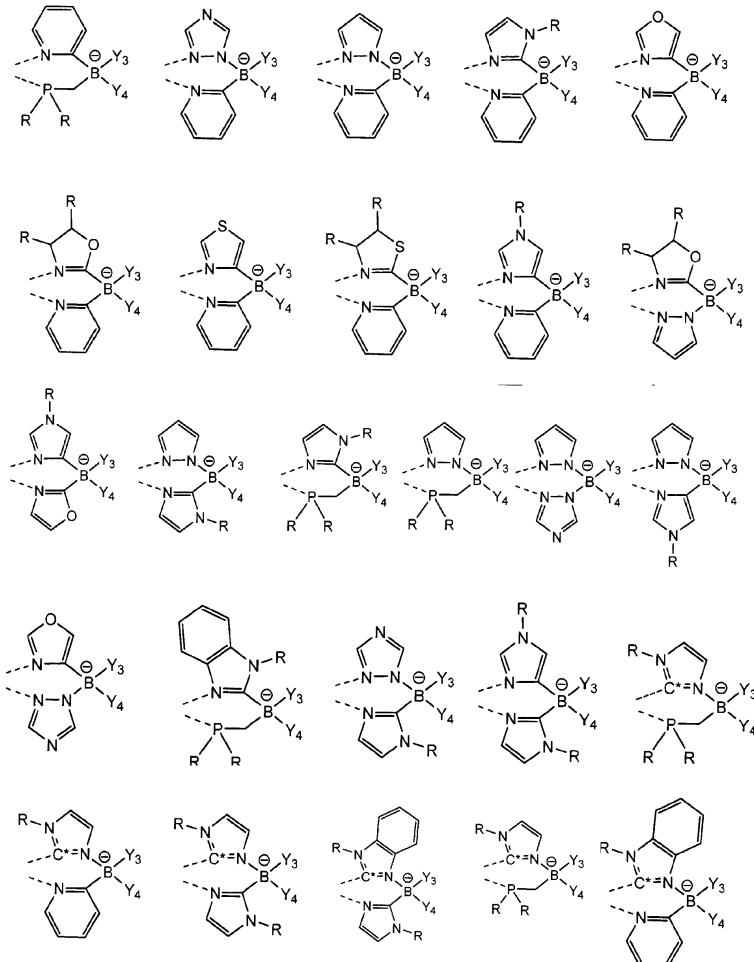
[0241]



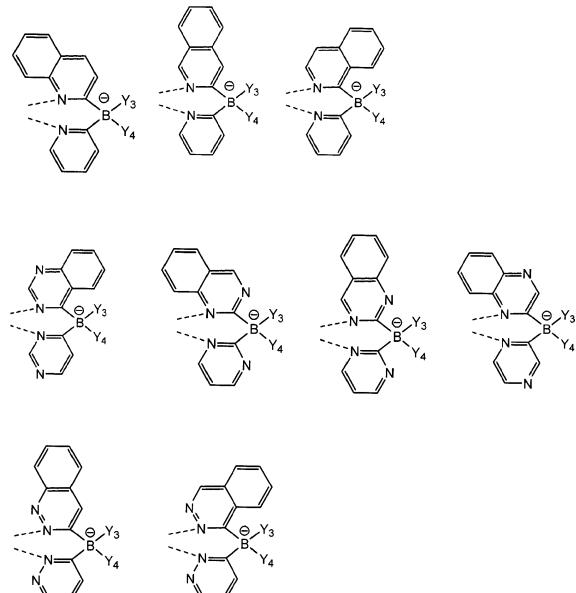
[0242]

[0243] 상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. C\*는 2가 탄소 원자이다. n은 0, 1 또는 2이다. m은 0, 1 또는 2이다.

[0244] 한 측면에서,  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 상이하다.  $Y_1$  및  $Y_2$ 가 상이한 리간드의 구체예에는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택되는 리간드들이 포함되나 이들로 국한되지 않는다:



[0245]

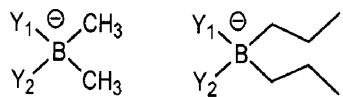


[0246]

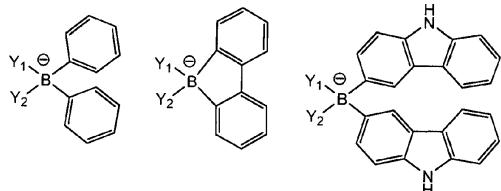
[0247]

상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

[0248] 한 측면에서,  $Y_3$  및  $Y_4$ 는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:

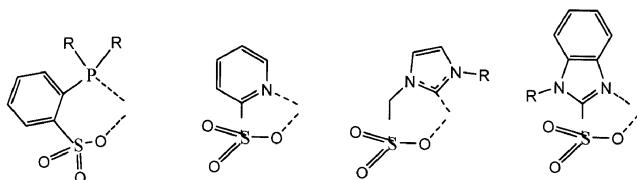


[0249]



[0250]

[0251] 한 측면에서,  $Y_i$ 은  $SO_3Y^-$ 이다. 화학식  $SO_3Y^-$ 를 갖는 리간드  $Y_i$ 의 구체예에는 하기의 구조를 갖는 리간드들이 포함되나 이들로 국한되지 않는다:



[0252]

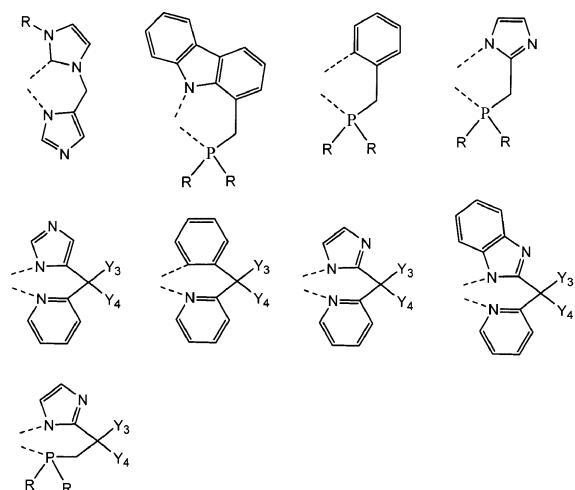
[0253] 상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

[0254] 한 측면에서,  $Y_i$ 은  $CY_4^-$ 이다. 바람직하게,  $CY_4^-$ 은 하기 화학식을 갖는다:



[0255]

[0256] 화학식  $CY_4^-$ 를 갖는 리간드  $Y_i$ 의 구체예에는 하기의 구조를 갖는 리간드들이 포함되나 이들로 국한되지 않는다:

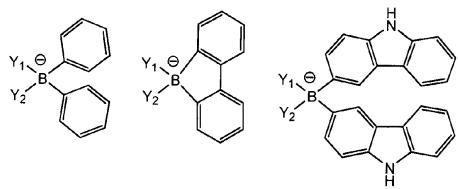
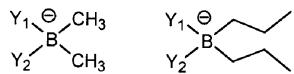


[0257]

[0258] 상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

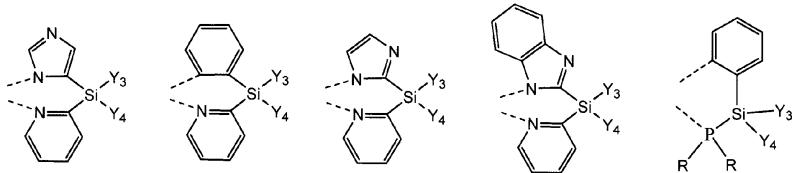
[0259]

한 측면에서,  $Y_3$  및  $Y_4$ 는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



[0260]

[0261] 또 다른 측면에서,  $Y_i$ 은  $SiY_4^-$ 이다. 화학식  $SiY_4^-$ 를 갖는 리간드  $Y_i$ 의 구체예에는 하기의 구조를 갖는 리간드들이 포함되나 이들로 국한되지 않는다:

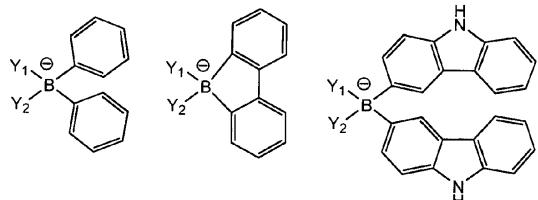
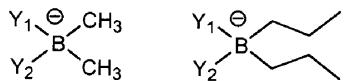


[0262]

[0263] 상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

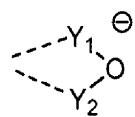
[0264]

한 측면에서,  $Y_3$  및  $Y_4$ 는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



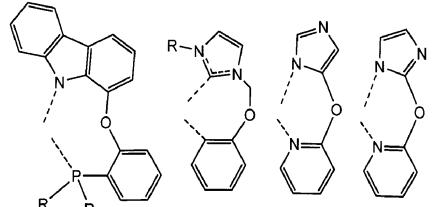
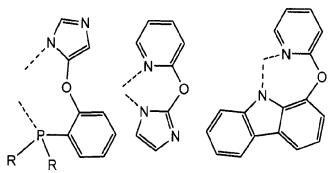
[0265]

[0266] 또 다른 측면에서,  $Y_i$ 은  $OY_2^-$ 이다. 바람직하게,  $OY_2^-$ 은 하기 화학식을 갖는다:



[0267]

[0268] 화학식  $OY_2^-$ 를 갖는 리간드  $Y_i$ 의 구체예에는 하기의 구조를 갖는 리간드들이 포함되나 이들로 국한되지 않는다:

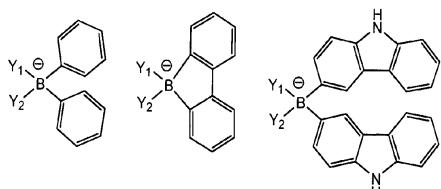
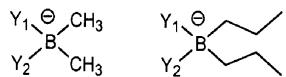


[0269]

[0270] 상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

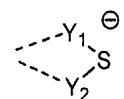
[0271]

한 측면에서,  $Y_3$  및  $Y_4$ 는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



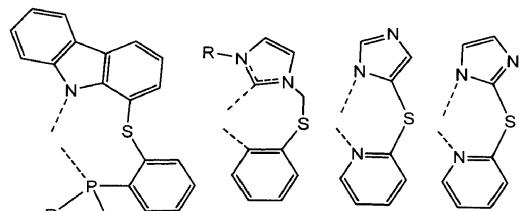
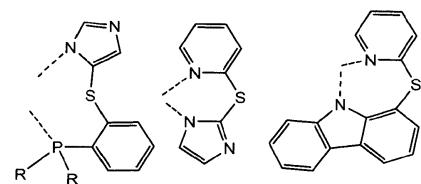
[0272]

[0273] 또 다른 측면에서,  $Y_i$ 은  $SY_2^-$ 이다. 바람직하게,  $SY_2^-$ 는 하기 화학식을 갖는다:



[0274]

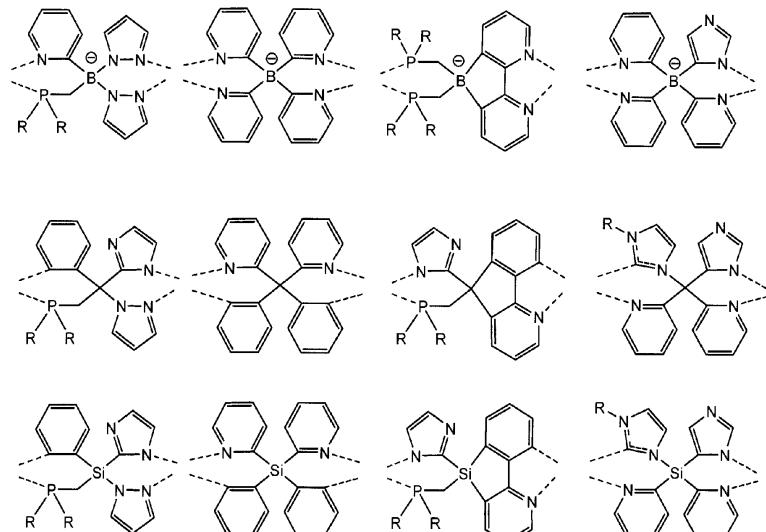
[0275] 화학식  $SY_2^-$ 를 갖는 리간드  $Y_i$ 의 구체예에는 하기의 구조를 갖는 리간드들이 포함되나 이들로 국한되지 않는다:



[0276]

[0277] 상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

[0278] 한 측면에서, 착체는 2개의 구리(I) 중심을 포함한다. 2개의 구리(I) 중심을 포함하는 착체의 비제한적 예에는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택되는 착체가 포함된다:

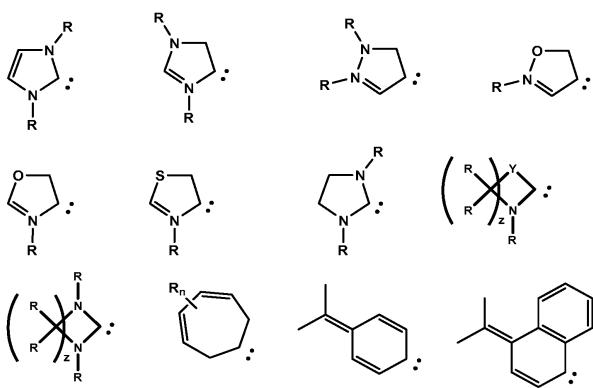


[0279]

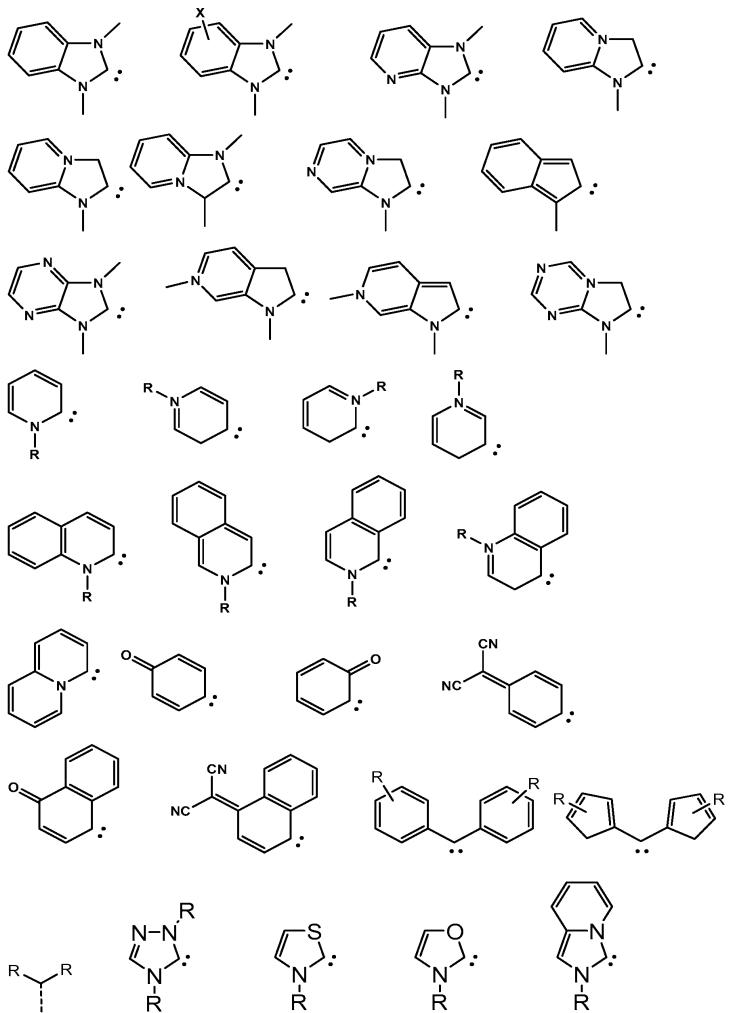
[0280] 상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

[0281]

추가의 측면에서, 카르벤 리간드는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



[0282]



[0283]

상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. z는 1, 2, 3 또는 4이다.



[0285]

바람직하게, 카르벤은

이다.

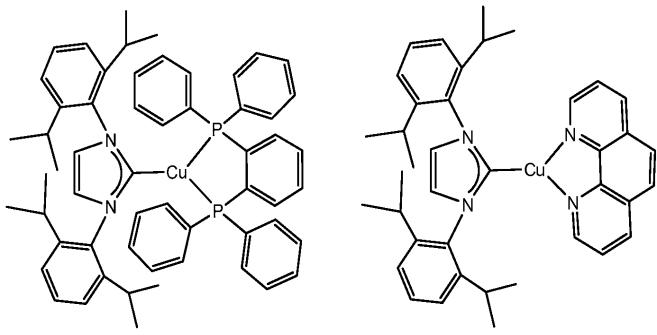
더우, 바람직하게, 카르벤은

이다.

[0286]

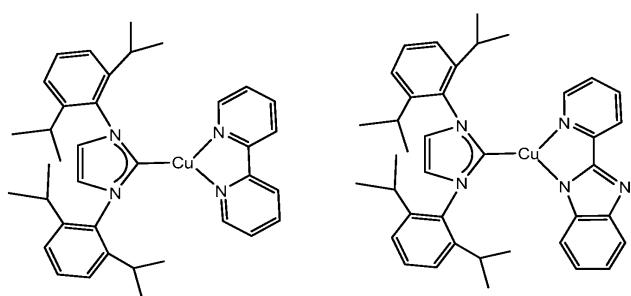
상기 식 중에서, R'<sub>1</sub> 및 R'<sub>2</sub>는 1, 2, 3 또는 4 치환을 나타낼 수 있다. R'<sub>1</sub> 및 R'<sub>2</sub>는 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. 한 측면에서, R'<sub>1</sub> 및 R'<sub>2</sub> 중 하나 이상은 3개 이상의 탄소 원자를 갖는 알킬이다.

[0287] 바람직하게, 촉체는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



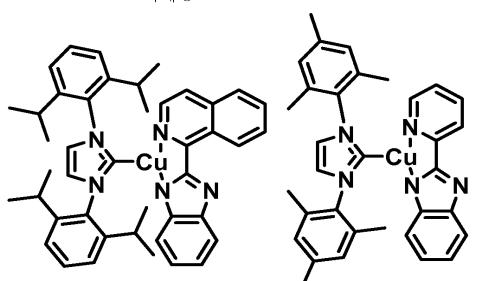
착체 1

착체 2



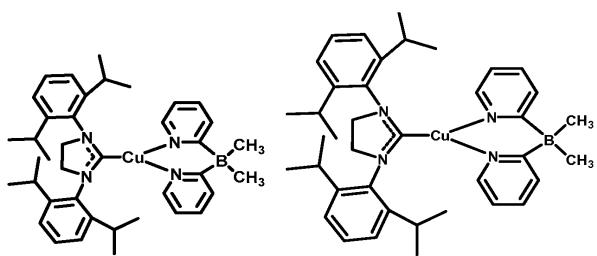
착체 3

착체 4



착체 5

착체 6

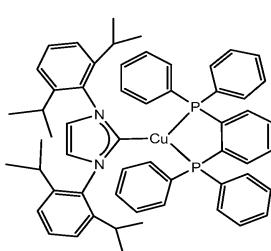


착체 7

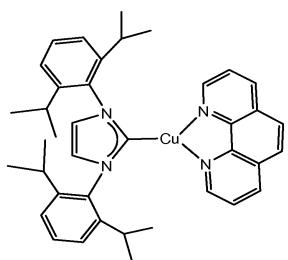
착체 8

[0289]

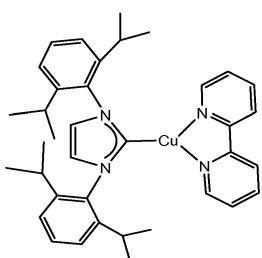
[0290] 바람직하게, 촉체는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:



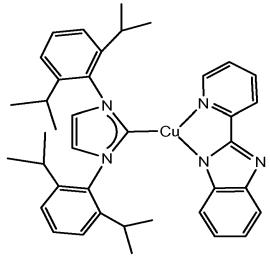
触体 1



触体 2



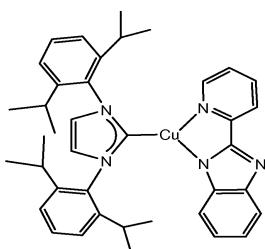
触体 3



触体 4

[0291]

보다 바람직하게, 촉체는 하기의 것이다:

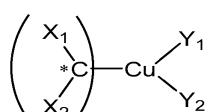


触体 4

[0293]

또 다른 측면에서, 촉체는 하기 화학식 IV를 갖는다:

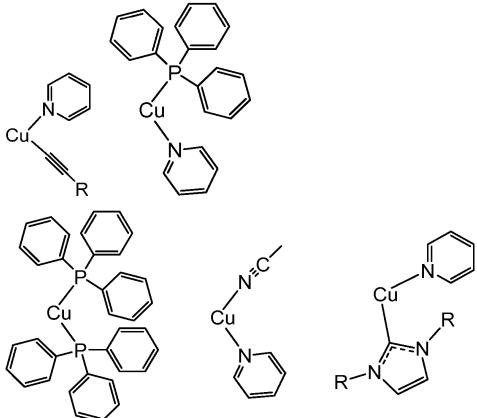
[화학식 IV]



[0296]

[0297] 상기 식 중에서,  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되는 치환기이다.  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 추가로 치환될 수 있다.  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 결합하지 않는다. 각각의  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 Cu와 함께 결합을 형성한다.

[0298] 한 측면에서, 착체는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:

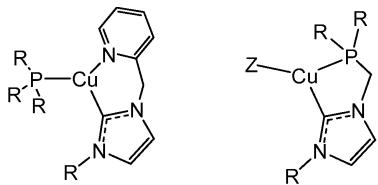


[0299]

[0300] 상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

[0301]

또 다른 측면에서, 카르벤 리간드는 두 자리이다. 바람직하게, 착체는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:

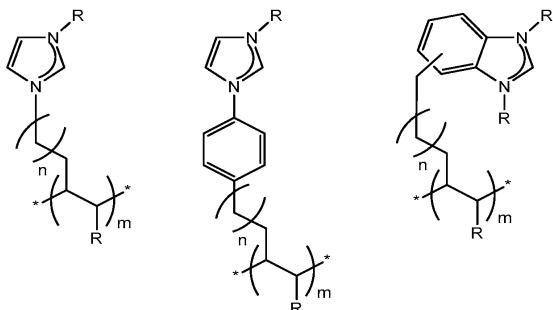


[0302]

[0303] 상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. Z는 한 자리 리간드이다.

[0304]

한 측면에서, 착체는 중합체 내에 포함된다. 또 다른 측면에서, 착체는 중합체의 반복 단위 내에 포함된다. 또 다른 측면에서, 착체는 중합체에 펜단트되어 있다. 바람직하게, 중합체는 하기 화학식들로 이루어진 군으로부터 선택된다:

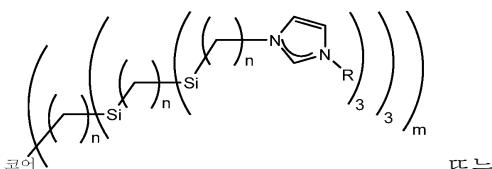


[0305]

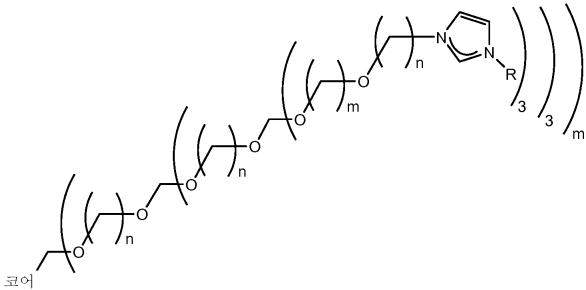
[0306] 상기 식 중에서, 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. m은 2 초과이다. n은 0 내지 20이다.

[0307]

또 다른 측면에서, 착체는 수지상 착체 내에 포함된다. 바람직하게, 수지상 착체는 하기의 것들이다:



[0308]



[0309]

[0310] 상기 식 중에서, 코어는 C, Si, Ge, Sn, Pb, N, P 및 As로 이루어진 군으로부터 선택되는 다가 원소 또는 분자이다. 각 R은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. m은 1 초과이다. n은 0 내지 20이다.

[0311]

또 다른 측면에서, 착체는 소분자 내에 포함된다.

[0312]

인광 착체를 포함하는 장치도 또한 제공된다. 유기 발광 장치를 포함하는 제1 장치는 애노드, 캐소드; 및 애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기층을 추가로 포함한다. 인광 착체 그 자체를 추가로 포함하는 유기층은 3-배위 구리 원자 및 카르벤 리간드를 포함한다. 바람직하게, 제1 장치는 소비자 제품이다. 그 장치는 상기 화학식 I, 화학식 II, 화학식 III 또는 화학식 IV를 갖는 착체를 포함할 수 있다. 화학식 I, 화학식 II, 화학식 III 또는 화학식 IV를 갖는 착체에 대해 바람직한 것으로 기재된 치환기, 리간드 및 착체에 대한 선택은 또한, 화학식 I, 화학식 II, 화학식 III 또는 화학식 IV를 갖는 착체를 비롯한 착체를 포함하는 장치에 사용하기에 바람직하다. 이 선택에는 X<sub>1</sub>, X<sub>2</sub>, X'<sub>1</sub>, X'<sub>2</sub>, Y<sub>1</sub>, Y<sub>2</sub>, Y'<sub>1</sub>, Y'<sub>2</sub>, Y<sub>i</sub>, R, X 및 Z에 대해 기재된 것들이 포함된다.

[0313]

화학식 I, 화학식 II, 화학식 III 또는 화학식 IV를 갖는 착체에 대해 바람직한 것으로 기재된 치환기, 리간드 및 착체에 대한 선택은 또한, 화학식 I, 화학식 II, 화학식 III 또는 화학식 IV를 갖는 착체를 비롯한 착체를 포함하는 장치에 사용하기에 바람직하다. 이 선택에는 X<sub>1</sub>, X<sub>2</sub>, X'<sub>1</sub>, X'<sub>2</sub>, Y<sub>1</sub>, Y<sub>2</sub>, Y<sub>3</sub>, Y<sub>4</sub>, Y<sub>5</sub>, Y'<sub>1</sub>, Y'<sub>2</sub>, Y<sub>i</sub>, R, X 및 Z에 대해 기재된 것들이 포함된다.

[0314]

상기 장치는 순 박막으로서 삼각 구리 착체를 함유할 수 있다. 특히, 착체의 순수 필름을 포함하는 OLED는 또 다른 물질로 도핑된 착체를 포함하는 OLED보다 더 높은 발광 효율을 가질 수 있다. 이전에는 착체가 자가-켄칭 (self-quenching)으로 인해 순수 필름에 사용될 수 없는 것으로 사료되었다. 그러나, 본원에 제공된 삼각 구리 착체는 다른 착체에서 보여지는 자가-켄칭을 나타내지 않을 수 있다.

[0315]

유기 발광 장치 내 특정 층에 유용한 본원에 기재된 물질은 장치 내에 존재하는 매우 다양한 다른 물질과 조합하여 사용될 수 있다. 예를 들어, 본원에 개시된 방출성 도판트는 매우 다양한 호스트, 수송층, 차단층, 주입층, 전극 및 존재할 수 있는 기타 층과 함께 사용될 수 있다. 이하에 기재되거나 지칭되는 물질은 본원에 개시된 착체와 조합하여 유용할 수 있는 물질의 비제한적 예이고, 당업자라면 조합하여 유용할 수 있는 기타 물질을 확인하기 위해 문현을 용이하게 참조할 수 있다.

[0316]

본원에 개시된 물질에 부가하여/하거나 그 물질과 조합하여, 다수의 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 호스트 물질, 도판트 물질, 엑시톤/정공 차단층 물질, 전자 수송 및 전자 주입 물질이 OLED에 사용될 수 있다. 본원에 개시된 물질과 조합하여 OLED에 사용될 수 있는 물질의 비제한적 예가 하기 표 3에 열거되어 있다. 표 3은 물질의 비제한적 부류, 각 부류에 대한 착체의 비제한적 예 및 그 물질을 개시하는 참조문현을 열거한다.

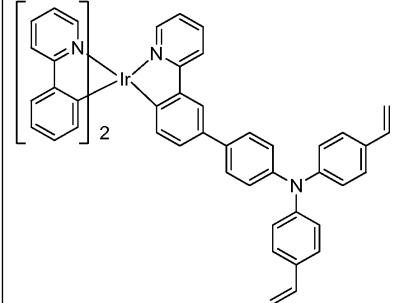
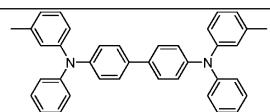
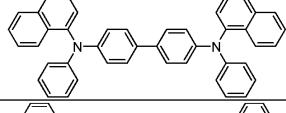
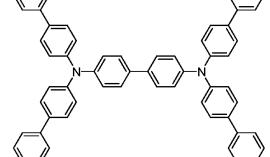
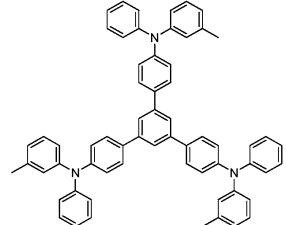
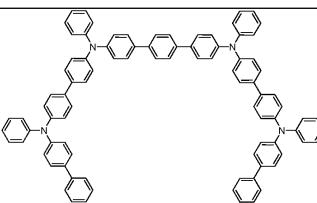
## 표 3

물질	물질의 예	발행물
정공 주입 물질		
프탈로시아닌 및 포르파린 학체		Appl. Phys. Lett. 69, 2160 (1996)
스타버스트 트리아릴아민		J. Lumin. 72-74, 985 (1997)
CF <sub>x</sub> 불소탄화수소 중합체		Appl. Phys. Lett. 78, 673 (2001)

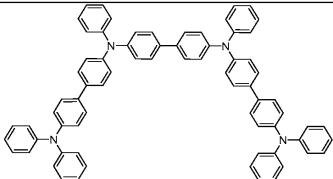
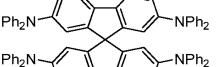
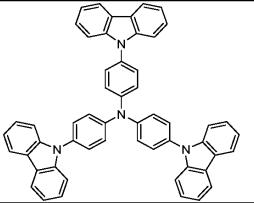
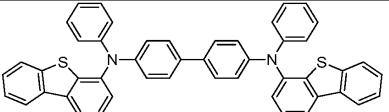
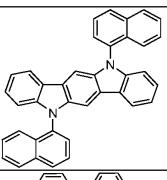
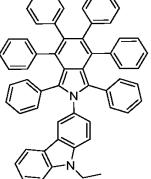
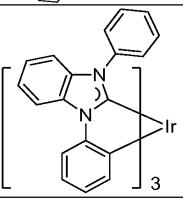
[0317]

전도성 중합체 (예를 들어, PEDOT:PSS, 폴리아닐린, 폴리티오렌)		Synth. Met. 87, 171 (1997) WO2007002683
포스폰산 및 살린 SAM		US20030162053
전도성 도판트를 가지는 폴리티오렌 중합체 또는 트리아릴아민		EA01725079A1
몰리브덴 및 텉스텐 산화물과 같은 금속 산화물과 척화된 아릴아민		SID Symposium Digest, 37, 923 (2006) WO2009018009
p-형 반도전성 유기 학체		US20020158242
금속 유기금속 학체		US20060240279

[0318]

가교성 쥐체		US20080220265
정공 수송 물질		
트리아릴아민 (예를 들어, TPD, $\alpha$ -NPD)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987)
		US5061569
		EP650955
		J. Mater. Chem. 3, 319 (1993)
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)

[0319]

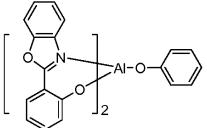
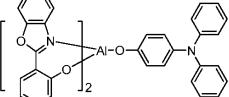
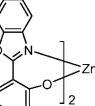
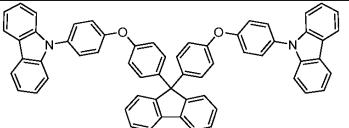
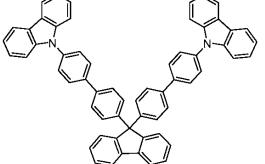
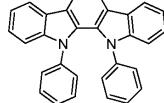
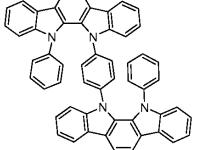
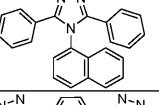
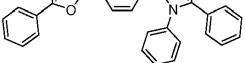
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)
스피로플루오렌 코어 상의 트리아릴아민		Synth. Met. 91, 209 (1997)
아릴아민 카르바졸 콍체		Adv. Mater. 6, 677 (1994), US20080124572
(디)벤조티오펜/(디)벤조푸란을 갖는 트리아릴아민		US20070278938, US20080106190
인돌로카르바졸		Synth. Met. 111, 421 (2000)
이소인돌 콍체		Chem. Mater. 15, 3148 (2003)
금속 카르بن 콍체		US20080018221
인광 OLED 호스트 물질		
적색 호스트		

[0320]

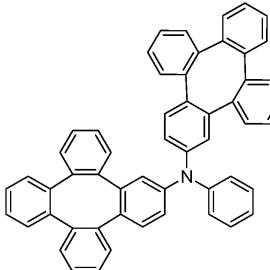
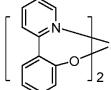
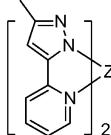
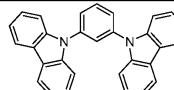
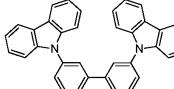
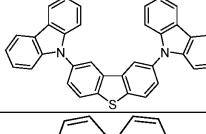
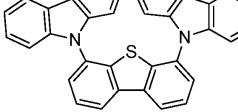
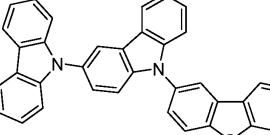
아릴카르바졸		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
금속 8-히드록시퀴놀레이트 (예를 들어, Alq <sub>3</sub> , BAlq)		Nature 395, 151 (1998)
		US20060202194
		WO2005014551
		WO2006072002
금속 폐녹시벤조티아졸 콍체		Appl. Phys. Lett. 90, 123509 (2007)
콩액 울리고머 및 중합체 (예를 들어, 폴리플루오렌)		Org. Electron. 1, 15 (2000)
방향족 융합 환		WO2009066779, WO2009066778, WO2009063833, US20090045731, US20090045730, WO2009008311, US20090008605, US20090009065
아연 콍체		WO2009062578
<b>녹색 호스트</b>		
아릴카르바졸		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)

[0321]

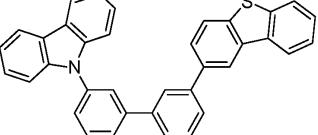
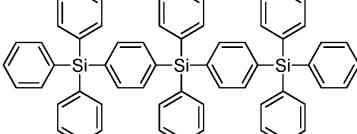
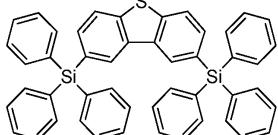
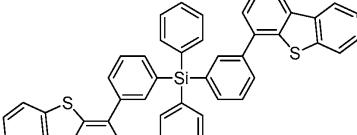
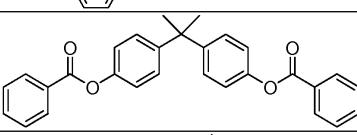
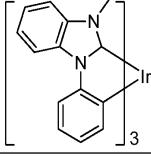
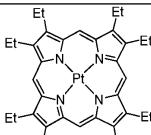
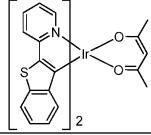
		US20030175553
		WO2001039234
아릴트리페닐렌 핵체		US20060280965
		US20060280965
		WO2009021126
도너 억셉터 유형 분자		WO2008056746
아자-카르바졸/DBT/DBF		JP2008074939
중합체(예를 들어, PVK)		Appl. Phys. Lett. 77, 2280 (2000)
스피로플루오렌 핵체		WO2004093207

금속 폐녹시벤족사졸 콍체		WO2005089025
		WO2006132173
		JP200511610
스페로플루오렌-카르바졸 콍체		JP2007254297
		JP2007254297
인돌로카르바졸		WO2007063796
		WO2007063754
5-원 환 전자 부족 복소환 (예를 들어, 트리아졸, 옥사디아졸)		J. Appl. Phys. 90, 5048 (2001)
		WO2004107822

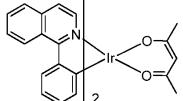
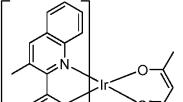
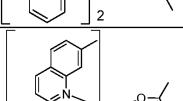
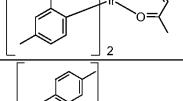
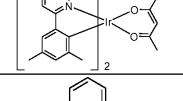
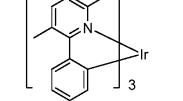
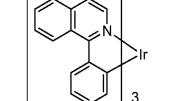
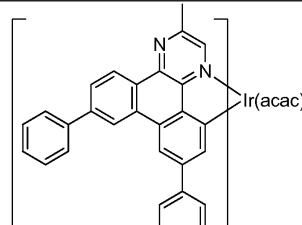
[0323]

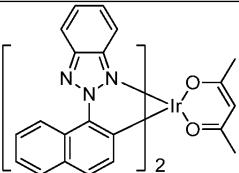
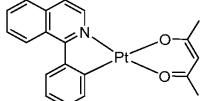
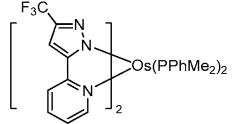
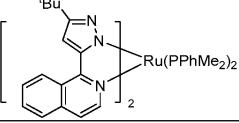
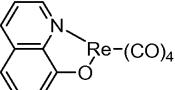
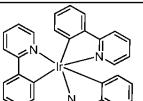
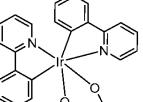
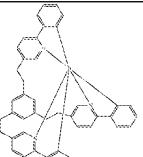
테트라페닐렌 콍체		US20050112407
금속 폐녹시페리딘 콍체		WO2005030900
금속 배위 콍체 (예를 들어, N^N 리간드를 갖는 Zn, Al)		US20040137268, US20040137267
정색 호스트		
아릴 카르바졸		Appl. Phys. Lett., 82, 2422 (2003)
		US20070190359
디벤조티오펜/디벤조푸란-카르바졸 콍체		WO2006114966, US20090167162
		US20090167162
		WO2009086028

[0324]

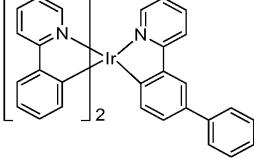
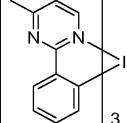
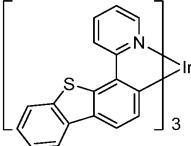
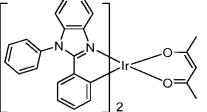
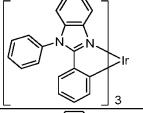
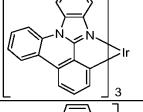
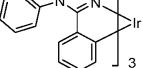
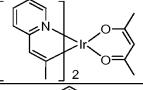
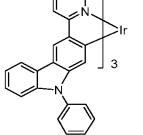
		US20090030202, US20090017330
규소 아릴 학체		US20050238919
		WO2009003898
규소/계르마늄 아릴 학체		EP2034538A
아릴 벤조일 에스테르		WO2006100298
고 삼중향 금속 유기금속 학체		US7154114
인광 도판트 적색 도판트		
중금속 포르파린 (예를 들어, PtOEP)		Nature 395, 151 (1998)
이리듐(III) 유기금속 학체		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)

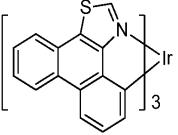
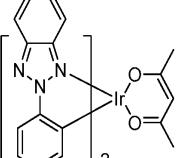
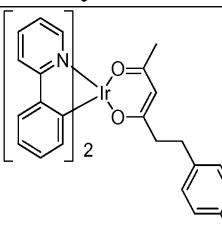
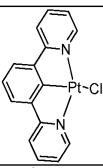
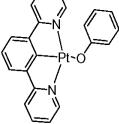
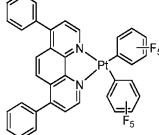
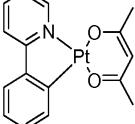
[0325]

		US2006835469
		US2006835469
		US20060202194
		US20060202194
		US20070087321
		US20070087321
		Adv. Mater. 19, 739 (2007)
[0326]		WO2009100991

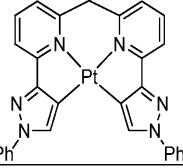
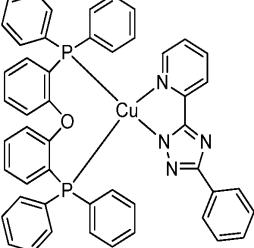
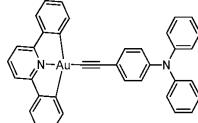
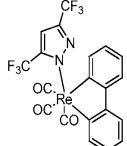
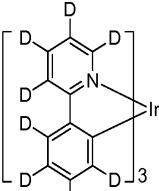
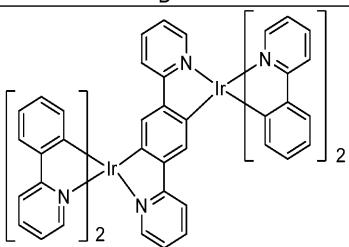
		WO2008101842
백금(II) 유기금속 콍체		WO2003040257
오스뮴(III) 콍체		Chem. Mater. 17, 3532 (2005)
루테늄(II) 콍체		Adv. Mater. 17, 1059 (2005)
루테늄(I), (II) 및 (III) 콍체		US20050244673
독색 도판트		
아리듐(III) 유기금속 콍체		Inorg. Chem. 40, 1704 (2001) 및 이의 유도체
		US20020034656
		US7332232

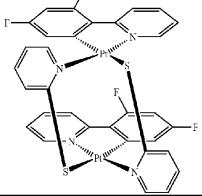
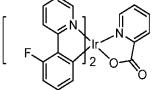
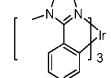
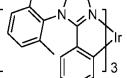
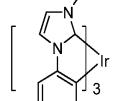
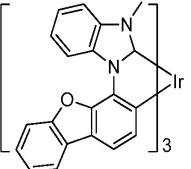
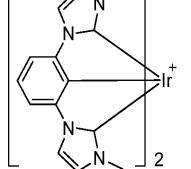
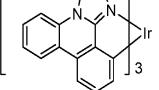
[0327]

		US20090108737
		US20090039776
		US6921915
		US6687266
		Chem. Mater. 16, 2480 (2004)
		US20070190359
		US 20060008670 JP2007123392
		Adv. Mater. 16, 2003 (2004)
[0328]		Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7800

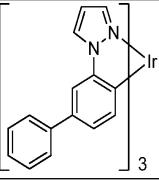
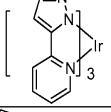
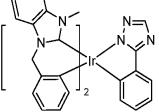
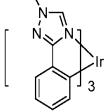
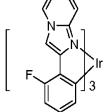
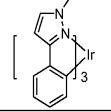
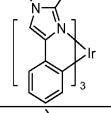
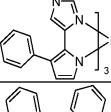
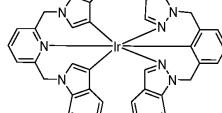
		WO2009050290
		US20090165846
		US20080015355
종합체성 금속 유기금속 학제용 단량체		US7250226, US7396598
다자리 티간드를 포함한, Pt(II) 유기금속 학체		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Chem. Lett. 34, 592 (2005)
		WO2002015645

[0329]

		US20060263635
Cu 콍체		WO2009000673
금 콍체		Chem. Commun. 2906 (2005)
레늄(III) 콍체		Inorg. Chem. 42, 1248 (2003)
중수소화 유기금속 콍체		US20030138657
2개 이상의 금속 중심을 갖는 유기금속 콍체		US20030152802

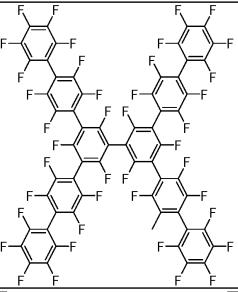
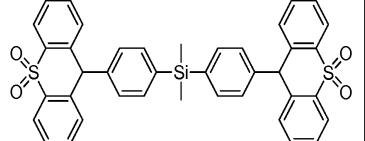
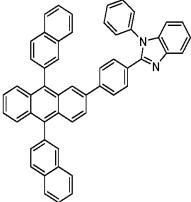
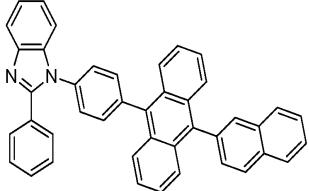
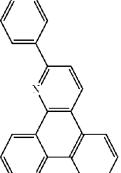
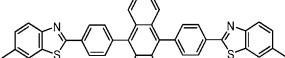
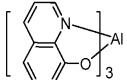
		US7090928
정색 도판트		
이 리튬(III) 유기금속 학제		WO2002002714
		WO2006009024
		US20060251923
		US7393599, WO2006056418, US20050260441, WO2005019373
		US7534505
		US7445855
		US20070190359, US20080297033

[0331]

		US7338722
		US20020134984
		Angew. Chem. Int. Ed. 47, 1 (2008)
		Chem. Mater. 18, 5119 (2006)
		Inorg. Chem. 46, 4308 (2007)
		WO2005123873
		WO2005123873
		WO2007004380
[0332]		WO2006082742

オス뮴(II) 콍체		US7279704
		Organometallics 23, 3745 (2004)
금 콍체		Appl. Phys. Lett. 74, 1361 (1999)
백금(II) 콍체		WO2006098120, WO2006103874
액시론/정공 차단 총 물질		
바쏘쿠프린 콍체 (예를 들어, BCP, BPen)		Appl. Phys. Lett. 75, 4 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
금속 8-히드록시퀴놀레이트 (예를 들어, BAlq)		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
5-원 환 전자 부족 복소환, 예컨대 트리아졸, 옥사디아졸, 이미다졸, 벤조이미다졸		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
트리페닐렌 콍체		US20050025993

[0333]

불소화 방향족 학체		Appl. Phys. Lett. 79, 156 (2001)
페노티아진-S-옥시드		WO2008132085
전자 수송 물질		
안트라센-벤조이미다졸 학체		WO2003060956
		US20090179554
아자 트리페닐렌 유도체		US20090115316
안트라센-벤조티아졸 학체		Appl. Phys. Lett. 89, 063504 (2006)
금속 8-히드록시퀴놀레이트 (예를 들어, Alq <sub>3</sub> , Zrq <sub>4</sub> )		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987) US7230107

금속 히드록시벤조퀴놀레이트		Chem. Lett. 5, 905 (1993)
바쏘쿠프린 콍체, 예컨대 BCP, BPhen 등		Appl. Phys. Lett. 91, 263503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
5~원 환 전자 부족 복소환 (예를 들어, 트리아졸, 옥사디아졸, 이미다졸, 벤조이미다졸)		Appl. Phys. Lett. 74, 865 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 55, 1489 (1989)
		Jpn. J. Appl. Phys. 32, L917 (1993)
실돌 콍체		Org. Electron. 4, 113 (2003)
아릴보란 콍체		J. Am. Chem. Soc. 120, 9714 (1998)
불소화 방향족 콍체		J. Am. Chem. Soc. 122, 1832 (2000)
풀터렌(예를 들어, C60)		US20090101870

[0335]

트리아진 콍체		US20040036077
Zn(N^N) 콍체		US6528187

[0336]

실험

**[0338] 착체 실시예**

[0339] 이하와 같이 수가지 착체들을 합성하였다:

**[0340] 실시예 1. 착체 1의 합성.**

[0341] 클로로[1,3-비스(2,6-디-i-프로필페닐)이미다졸-2-일리덴]구리(I)(487.59 mg, 0.25 mmol) 및 은 트리플레이트(64.2 mg, 0.25 mmol)를 25 mL 플라스크 내에서 질소 하에서 혼합하였고, 10 mL의 무수 THF를 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 30분 동안 교반하였다. 무수 THF(5 mL) 중의 1,2-비스(디페닐포스피노)벤젠(111.6 mg, 0.25 mmol)의 용액을 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 하룻밤 동안 교반하였다. 생성된 혼합물을 셀라이트®를 통해 여과하고, 용매를 회전증발기에서 증발시켰다. Et<sub>2</sub>O의 증기 확산에 의해 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>로부터 재결정화하여, 130 mg(49.6%)의 백색 침상 결정을 수득하였다. 구조를 [(IPR)Cu(dppbz)]OTf(CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz)의 <sup>1</sup>H-NMR 스펙트럼에 의해 확인하였다.

**[0342] 실시예 2. 착체 2의 합성.**

[0343] 클로로[1,3-비스(2,6-디-i-프로필페닐)이미다졸-2-일리덴]구리(I)(121.9 mg, 0.25 mmol) 및 은 트리플레이트(64.2 mg, 0.25 mmol)를 25 mL 플라스크에서 질소 하에서 혼합하였고, 10 mL의 무수 THF를 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 30분 동안 교반하였다. 무수 THF(5 mL) 중의 1,10-페난트롤린(45.05 mg, 0.25 mmol)의 용액을 첨가하였다. 반응 혼합물이 황색으로 변화하였고, 실온에서 하룻밤 동안 교반하였다. 생성된 혼합물을 셀라이트®를 통해 여과하고, 용매를 회전증발기에서 증발시켰다. Et<sub>2</sub>O의 증기 확산에 의해 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>로부터 재결정화하여, 120 mg(61.4%)의 황색 결정을 수득하였다. C<sub>40</sub>H<sub>44</sub>CuF<sub>3</sub>N<sub>4</sub>O<sub>3</sub>S에 대한 분석 및 계산치: C, 61.48; H, 5.68; N, 7.17; 실측치: C, 61.06; H, 5.61; N, 7.14. 구조를 [(IPR)Cu(phen)]OTf(CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz)의 <sup>1</sup>H-NMR 스펙트럼에 의해 확인하였다.

**[0344] 실시예 3. 착체 3의 합성.**

[0345] 클로로[1,3-비스(2,6-디-i-프로필페닐)이미다졸-2-일리덴]구리(I)(195.1 mg, 0.4 mmol) 및 은 트리플레이트(102.7 mg, 0.4 mmol)를 25 mL 플라스크에서 질소 하에서 혼합하였고, 10 mL의 무수 THF를 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 30분 동안 교반하였다. 무수 THF(5 mL) 중의 2,2'-비페리딘(62.4 mg, 0.4 mmol)의 용액을 첨가하였다. 반응 혼합물이 오렌지색으로 변화하였고, 실온에서 하룻밤 동안 교반하였다. 생성된 혼합물을 셀라이트®를 통해 여과하고, 용매를 회전증발기에서 증발시켰다. Et<sub>2</sub>O의 증기 확산에 의해 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>로부터 재결정화하여, 215 mg(70.9%)의 오렌지색 결정을 수득하였다. C<sub>38</sub>H<sub>44</sub>CuF<sub>3</sub>N<sub>4</sub>O<sub>3</sub>S에 대한 분석 및 계산치: C, 60.26; H, 5.86; N, 7.40; 실측치: C, 60.18; H, 5.82; N, 7.38. 구조를 [(IPR)Cu(bipy)]OTf(CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz)의 <sup>1</sup>H-NMR 스펙트럼에 의해 확인하였다.

**[0346] 실시예 4. 착체 4의 합성.**

[0347] 2-(2-페리딜)벤즈이미다졸(78.1 mg, 0.4 mmol)을 N<sub>2</sub> 하에 10 mL의 무수 THF 중에 용해시키고, 이 용액을 캐뉼라를 통해 무수 THF 중의 수소화나트륨(17.6 mg, 0.44 mmol, 미네랄 오일 중 60%)의 혼탁액에 옮겼다. 반응 혼합물을 실온에서 1시간 동안 교반한 후, 클로로[1,3-비스(2,6-디-i-프로필페닐)이미다졸-2-일리덴]구리(I)(195.1 mg, 0.4 mmol)를 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 3시간 동안 교반하였다. 생성된 혼합물을 셀라이트®를 통해 여과하고, 용매를 회전증발기에 의해 증발시켰다. Et<sub>2</sub>O의 증기 확산에 의해 생성물의 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 용액으로 재결정화하여, 154 mg(59.5%)의 암황색 결정을 수득하였다. C<sub>39</sub>H<sub>44</sub>CuN<sub>5</sub>에 대한 분석 및 계산치: C, 72.47; H, 6.86; N, 10.48; 실측치: C, 72.55; H, 6.94; N, 10.84.

**[0348] 실시예 5. 착체 5의 합성.**

[0349] 1-(1H-벤즈이미다졸-2-일)-이소퀴놀린(46 mg, 0.19 mmol)을 N<sub>2</sub> 하에 10 mL의 무수 THF 중에 용해시키고, 이 용액을 캐뉼라를 통해 무수 THF 중의 수소화나트륨(8.36 mg, 0.209 mmol, 미네랄 오일 중 60%)의 혼탁액에 옮겼다. 반응 혼합물을 실온에서 1시간 동안 교반한 후, 클로로[1,3-비스(2,6-디-i-프로필페닐)이미다졸-2-일리덴]구리(I)(92.6 mg, 0.19 mmol)를 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 3시간 동안 교반하였다. 생성된 혼합물

을 셀라이트®를 통해 여과하였고, 용매를 회전농축에 의해 증발시켰다. 생성물의  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  용액의  $\text{Et}_2\text{O}$ 의 증기 확산에 의해 재결정화하여, 50 mg(38%)의 오렌지색 결정을 수득하였다.

[0350]

#### 실시예 6. 촉체 6의 합성.

[0351]

2-(2-피리딜)벤즈이미다졸(78.1 mg, 0.4 mmol)을  $\text{N}_2$  하에 10 mL의 무수 THF 중에 용해시키고, 이 용액을 캐뉼라를 통해 무수 THF 중의 수소화나트륨(17.6 mg, 0.44 mmol, 미네랄 오일 중 60%)의 혼탁액에 옮겼다. 반응 혼합물을 실온에서 1시간 동안 교반한 후, 클로로[1,3-비스(2,4,6-트리메틸페닐)이미다졸-2-일리텐]구리(I)(161.4 mg, 0.4 mmol)를 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 3시간 동안 교반하였다. 생성된 혼합물을 셀라이트®를 통해 여과하였다. 용매를 회전농축에 의해 증발시켰고, 178 mg(79%)의 담황색 고체를 수득하였다.

[0352]

#### 실시예 7. 촉체 7의 합성.

[0353]

나트륨 디메틸비스(2-피리딜)보레이트  $\text{Na}[(\text{CH}_3)_2\text{B}(\text{py})_2]$ (66 mg, 0.3 mmol) 및 클로로[1,3-비스(2,6-디-i-프로필페닐)-4,5-디히드로이미다졸-2-일리텐]구리(I)(SIPr)CuCl(146.9 mg, 0.3 mmol)를  $\text{N}_2$  대기 하에서 25 mL 플라스크에서 혼합하였다. 새로 증류한 THF(10 mL)를 첨가하였고, 반응 혼합물을 실온에서 1시간 동안 교반하였다. 생성된 혼합물을 셀라이트®를 통해 여과하고, 용매를 회전증발기에서 증발시켰다. 아세톤/헥산으로부터 재결정화하여, 85 mg(43.5%)의 백색 고체를 수득하였다.  $^1\text{H-NMR}$ (아세톤-d<sub>6</sub>, 400 MHz, ppm):  $\delta$  -0.28(s, 6H), 1.14(d, 12H), 1.32(d, 12H), 3.56(sept, 4H), 4.21(s, 4H), 6.56–6.60(m, 2H), 7.20(td, 2H), 7.27–7.30(m, 6H), 7.38(t, 2H), 7.50(d, 2H).

[0354]

#### 실시예 8. 촉체 8의 합성.

[0355]

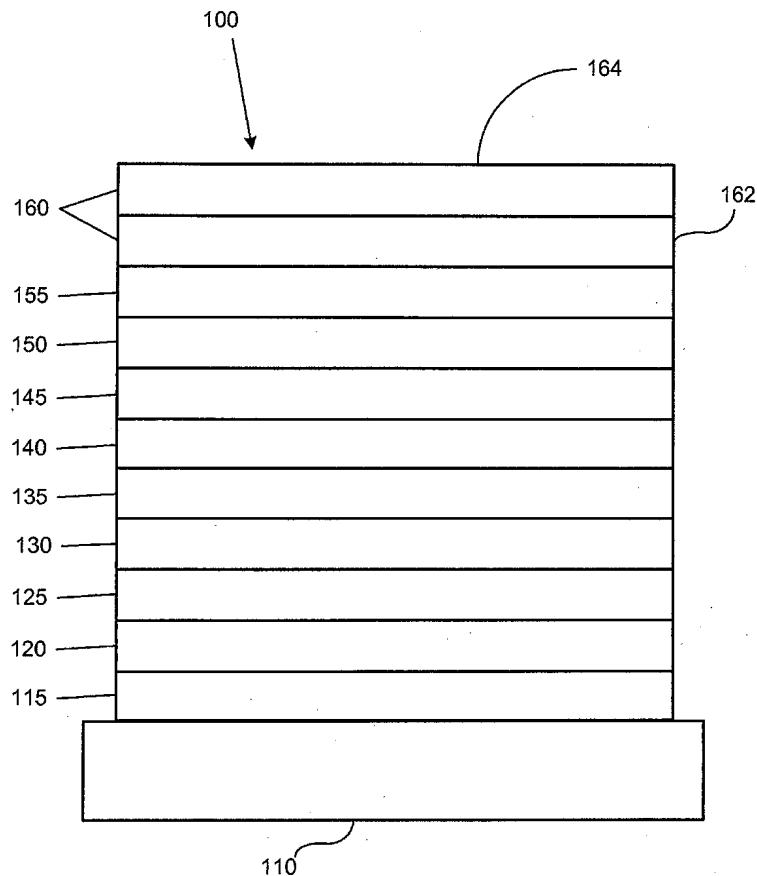
나트륨 디메틸비스(2-피리딜)보레이트  $\text{Na}[(\text{CH}_3)_2\text{B}(\text{py})_2]$ (68.7 mg, 0.312 mmol) 및 클로로[1,3-비스(2,4,6-트리메틸페닐)이미다졸-2-일리텐]구리(I)(106 mg, 0.26 mmol)를  $\text{N}_2$  대기 하에서 25 mL 플라스크에서 혼합하였다. 새로 증류한 THF(10 mL)를 첨가하였고, 반응 혼합물을 실온에서 1시간 동안 교반하였다. 조질의 고체를 헥산으로 세정하고,  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 에 재용해시키고, 여과하였다. 용매를 제거하여, 90 mg(61.3%)의 백색 고체를 수득하였다.  $^1\text{H-NMR}$ (아세톤-d<sub>6</sub>, 400 MHz, ppm):  $\delta$  -0.13(broad d, 6H), 2.21(s, 12H), 2.30(s, 6H), 6.57–6.60(m, 2H), 7.02(s, 4H), 7.23(td, 2H), 7.34(d, 2H), 7.44(s, 2H), 7.52(d, 2H).

[0356]

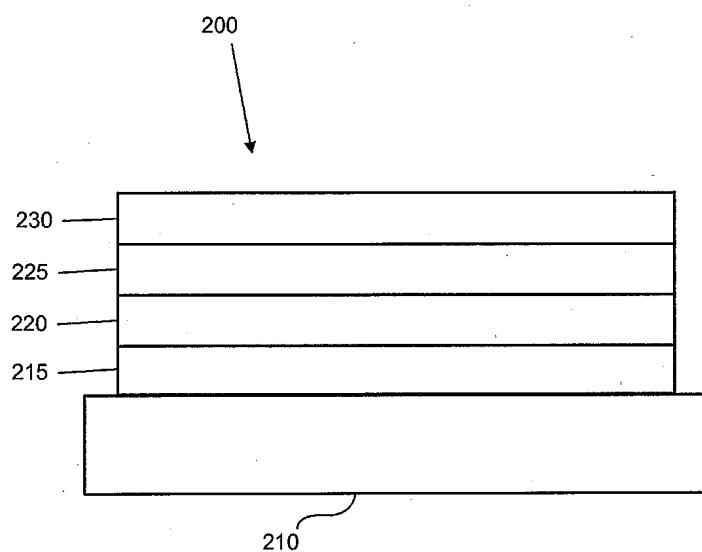
본원에 기재된 각종 실시양태들은 단지 예시적으로 제공된 것으로서, 본 발명의 범주를 제한하는 것으로 의도되지 않음을 이해한다. 예를 들어, 본원에 기재된 물질 및 구조 중 다수가 본 발명의 사상을 벗어나지 않는 한, 다른 물질 및 구조로 치환될 수 있다. 청구하고자 하는 본 발명은 당업자에게 자명한, 본원에 기재된 특별한 실시예 및 바람직한 실시양태로부터의 변형 양태를 포함한다. 본 발명이 작용하는 이유에 관한 각종 이론들은 제한적인 것으로 의도되지 않음을 이해한다.

도면

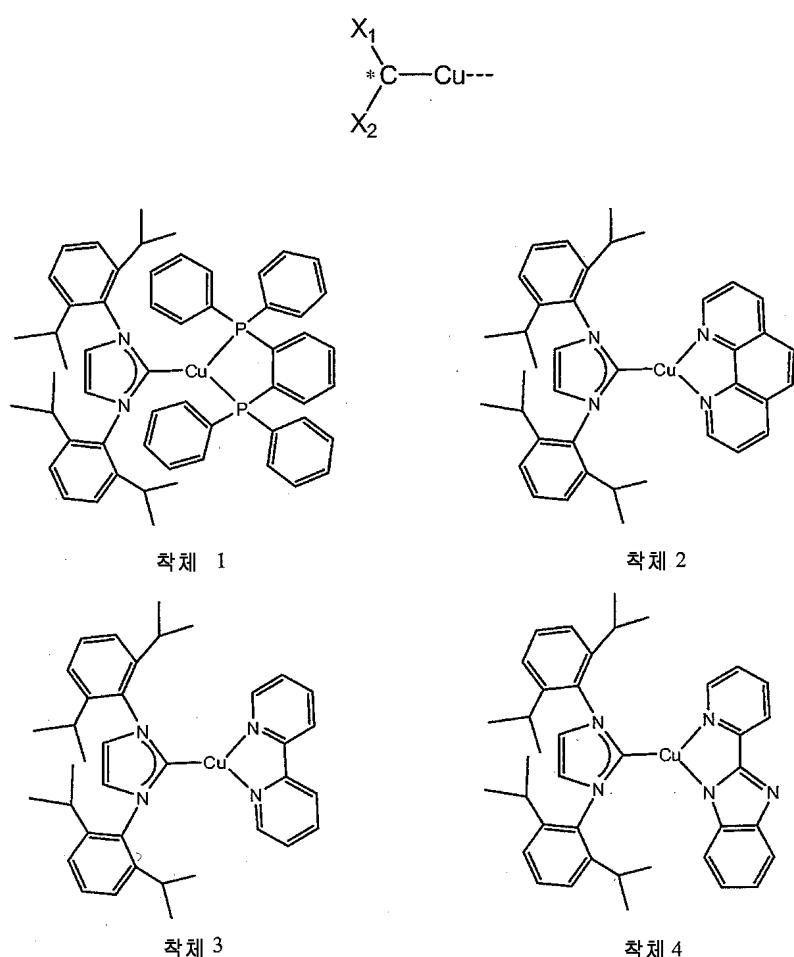
도면1



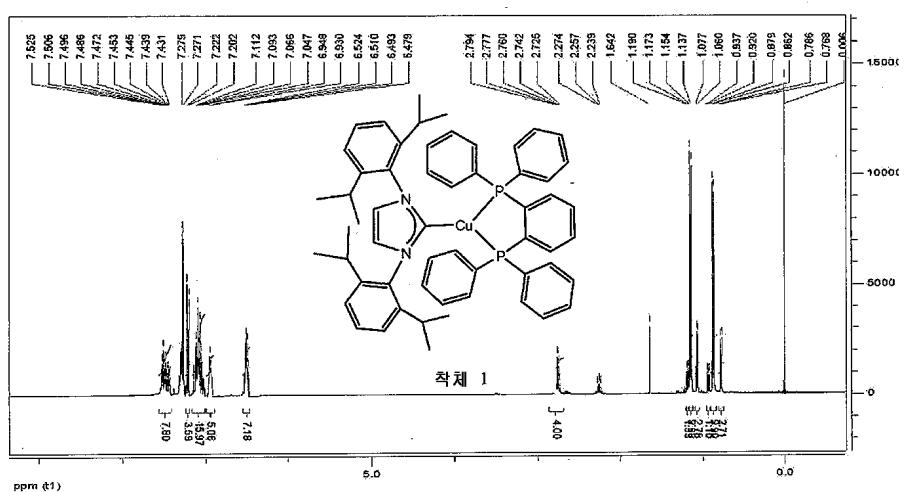
도면2



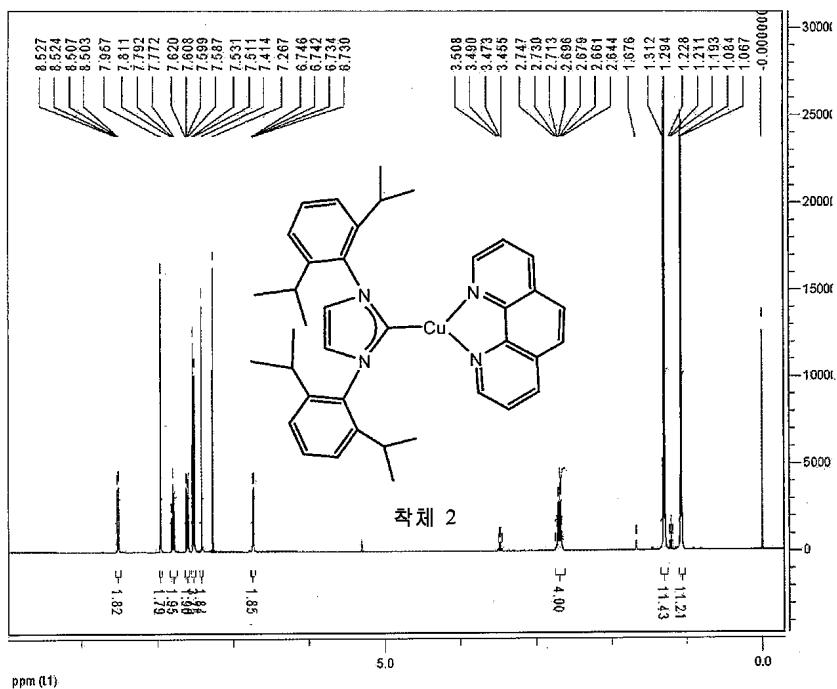
## 도면3



## 도면4

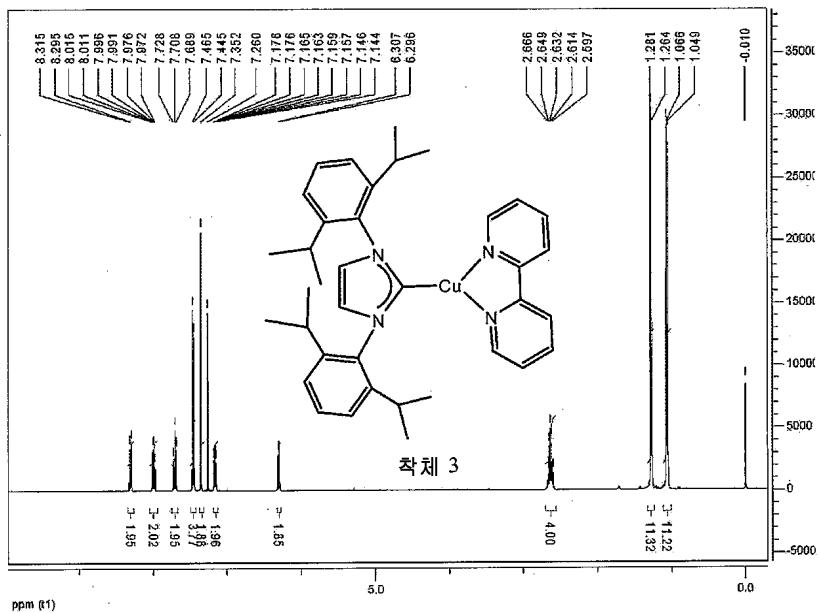


## 도면5



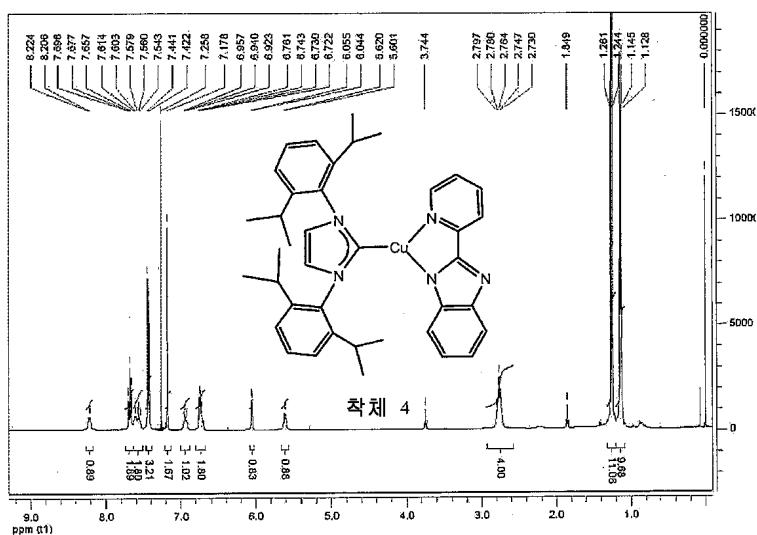
작제 2

## 도면6

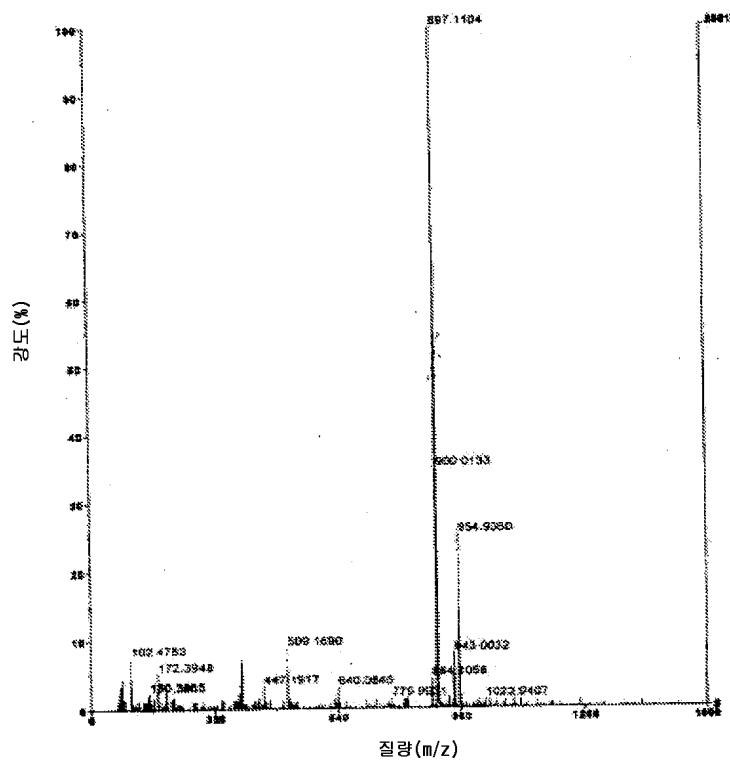


작제 3

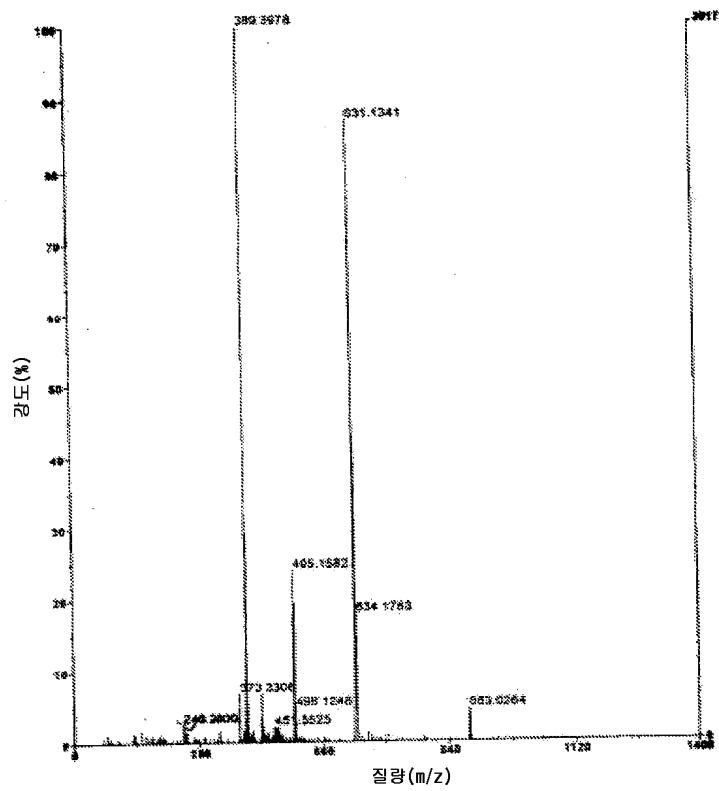
## 도면7



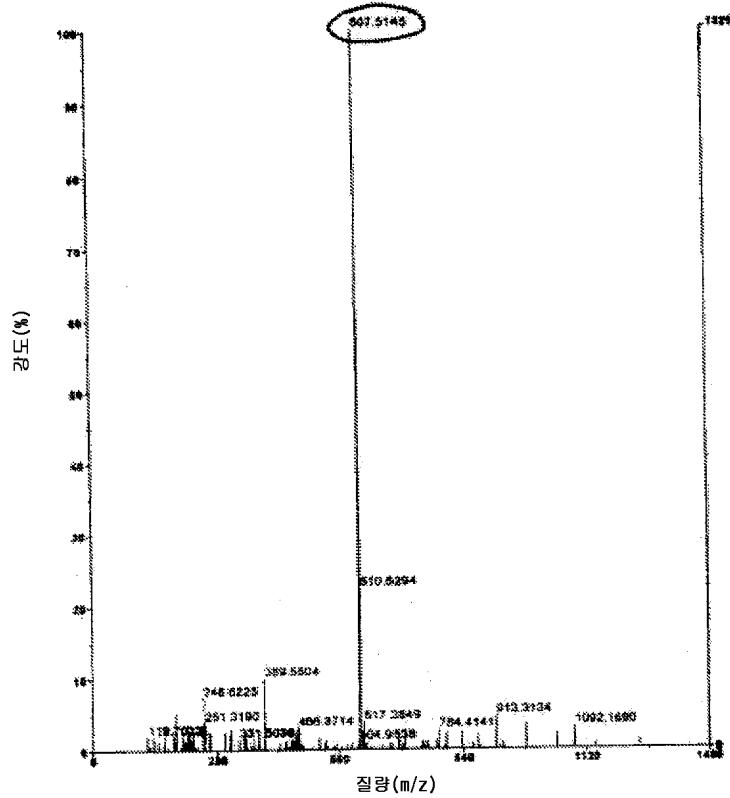
## 도면8



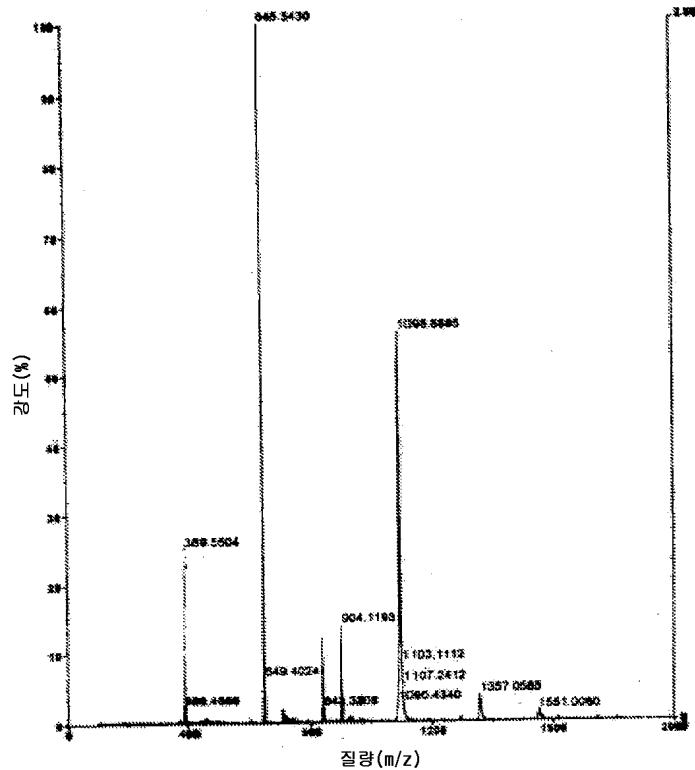
도면9



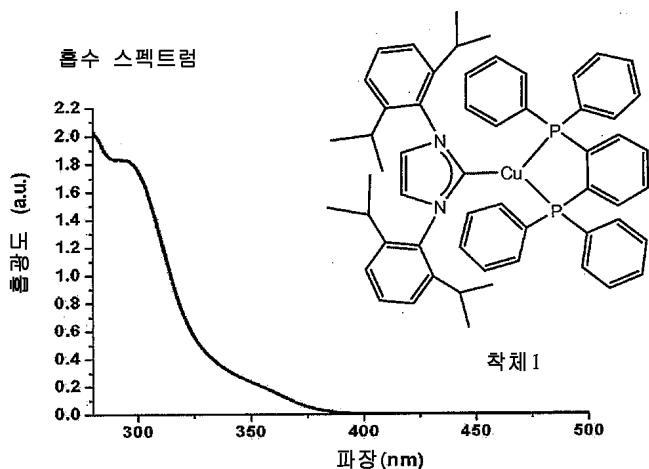
도면10



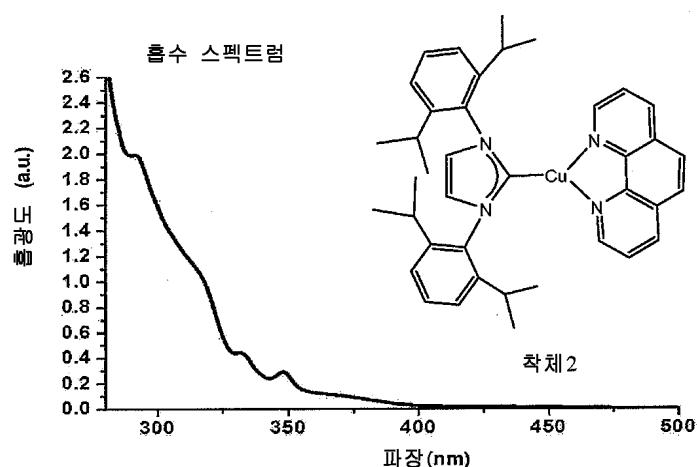
도면11



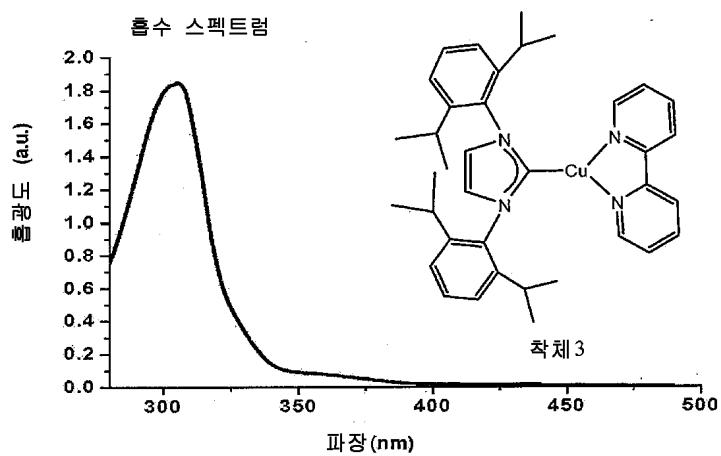
도면12



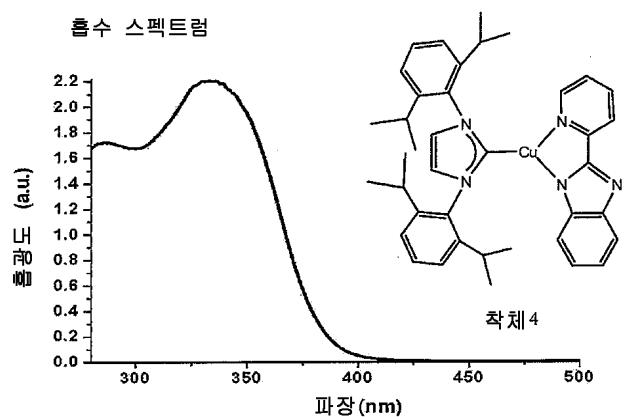
## 도면13



## 도면14



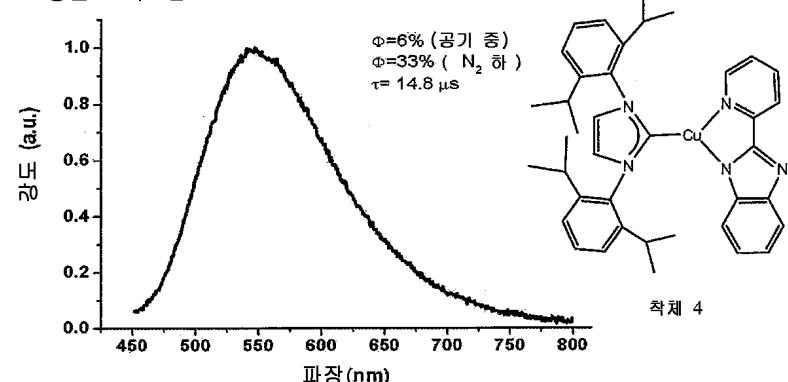
## 도면15



## 도면16

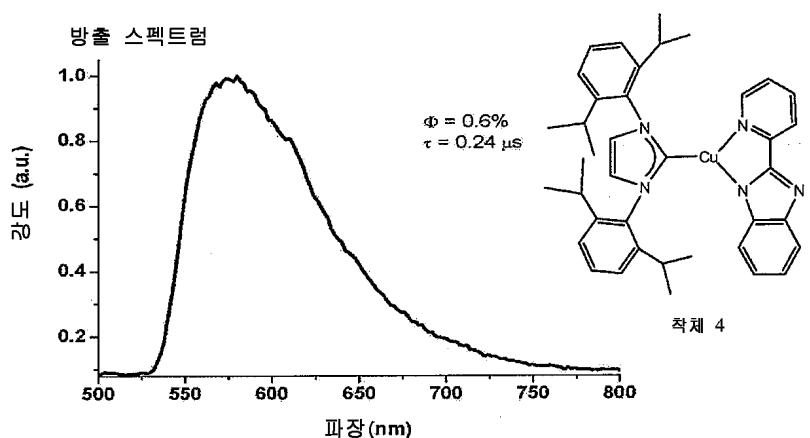
A.

## 방출 스펙트럼



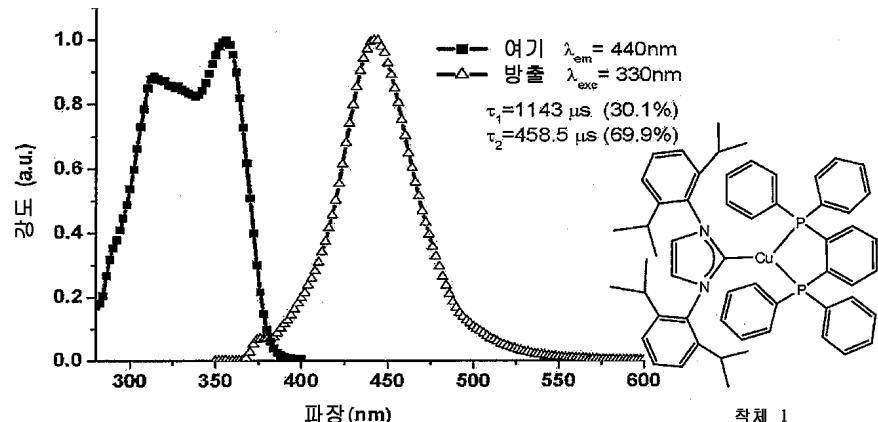
B.

## 방출 스펙트럼

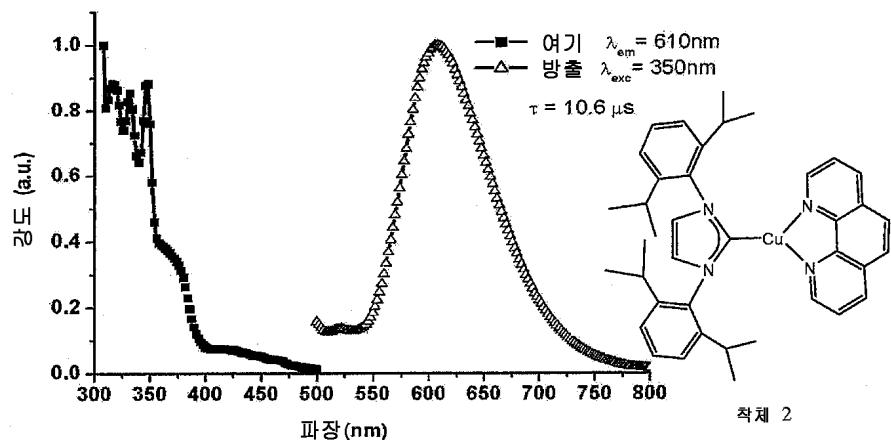


## 도면17

## A. 여기 스펙트럼 및 방출 스펙트럼



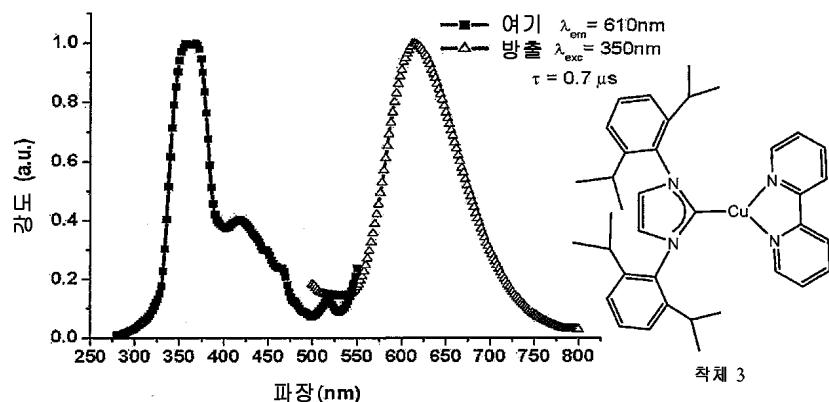
## B. 여기 스펙트럼 및 방출 스펙트럼



## 도면18

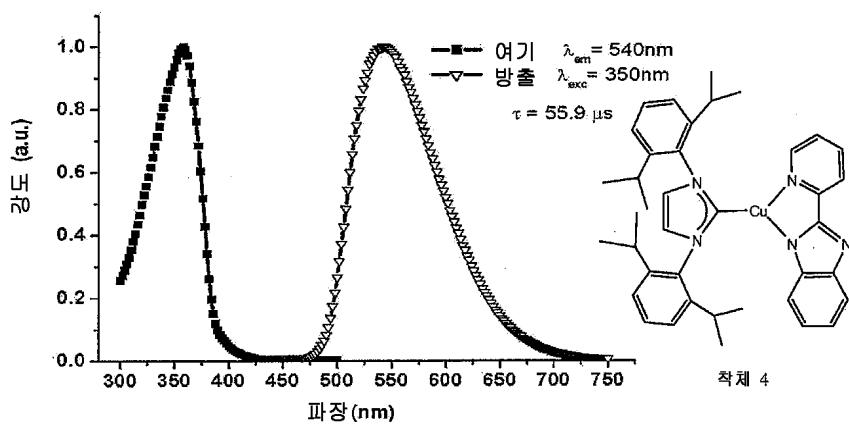
A.

여기 스펙트럼 및 방출 스펙트럼



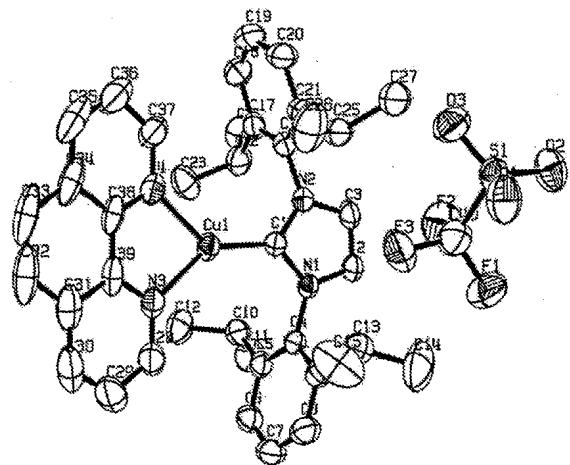
B.

여기 스펙트럼 및 방출 스펙트럼

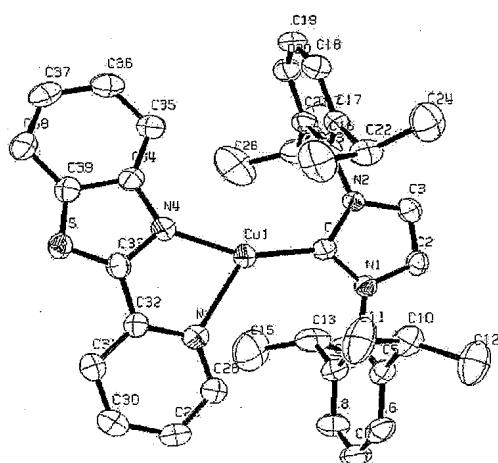


도면19

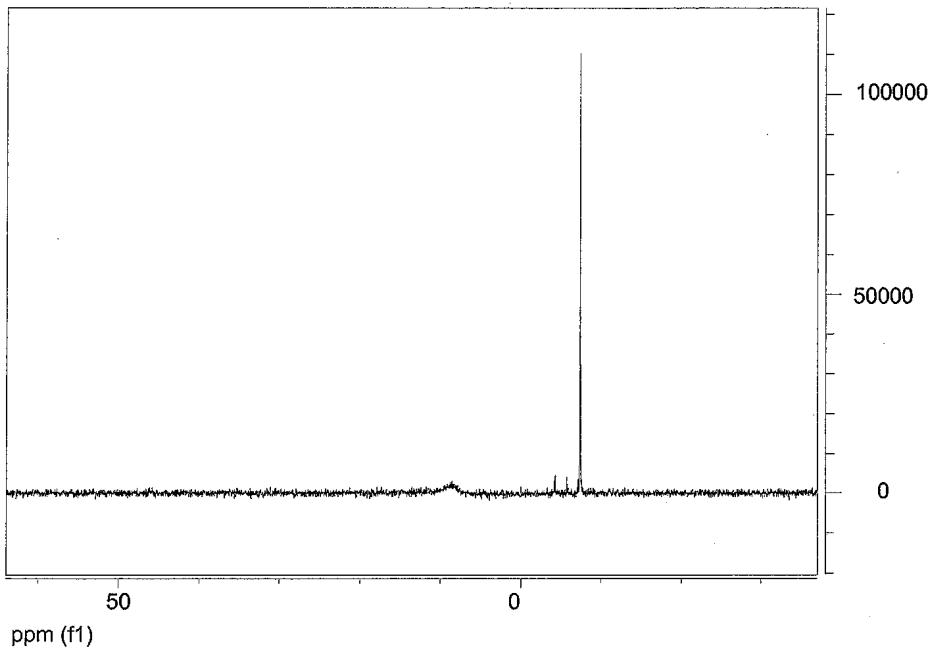
A.



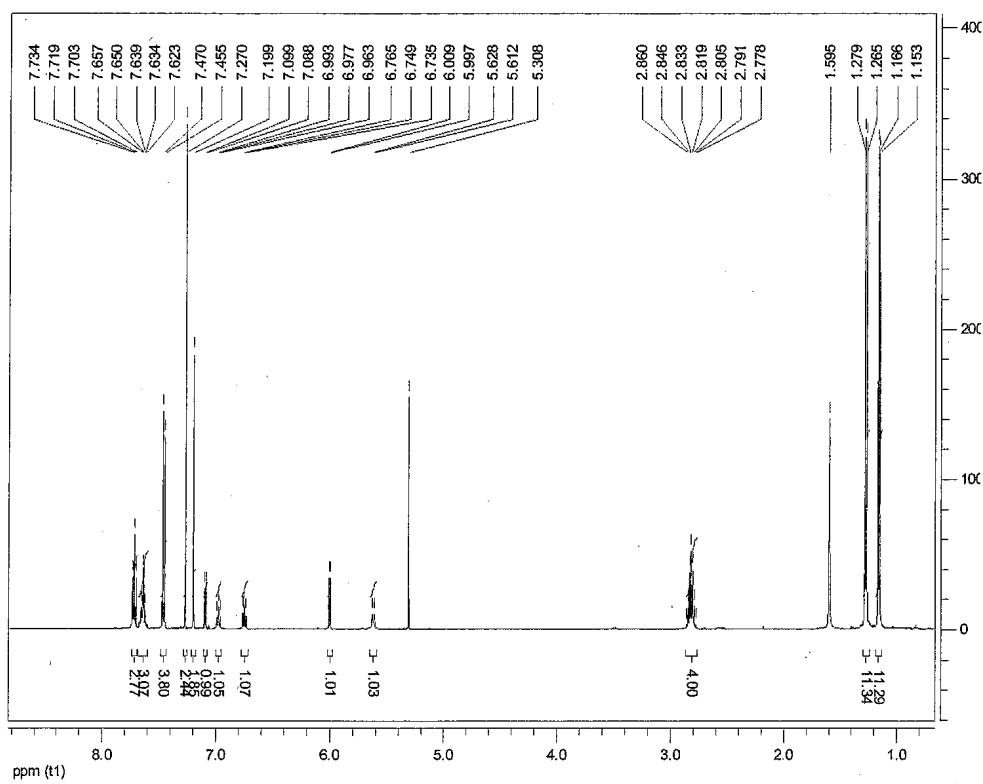
B.



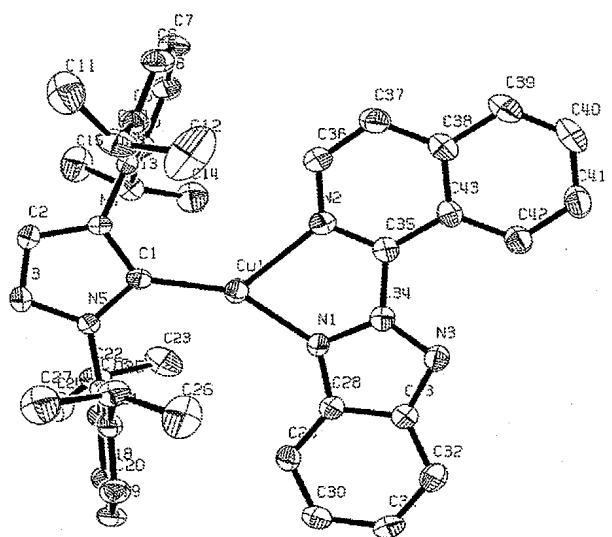
도면20



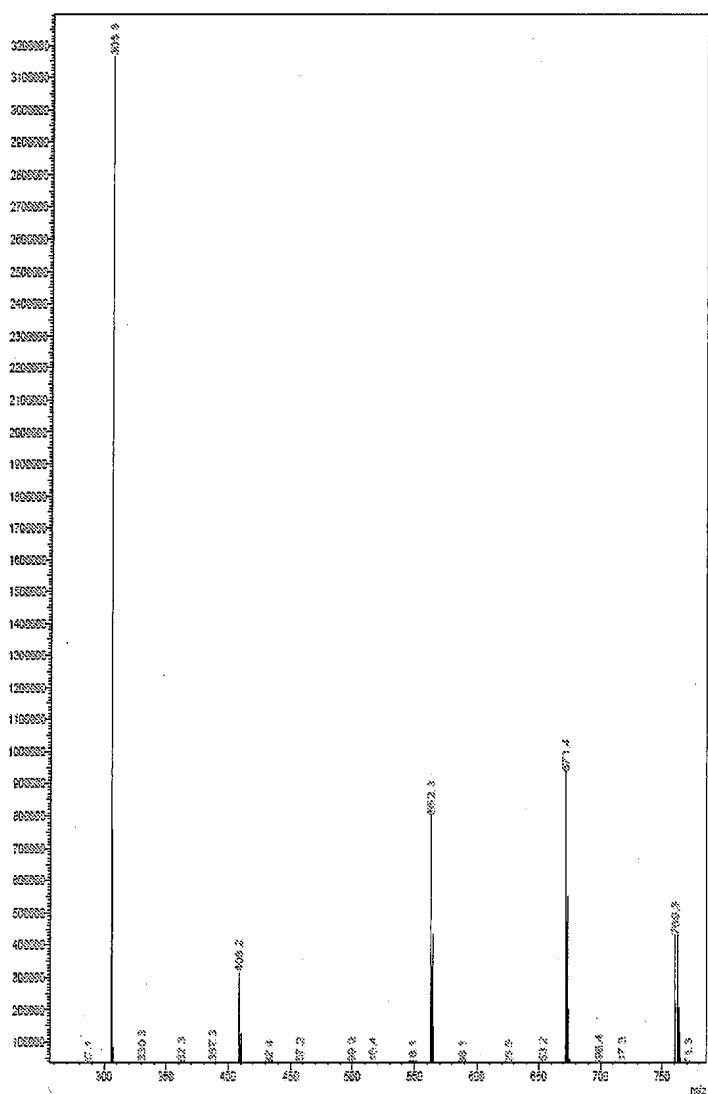
도면21



도면22

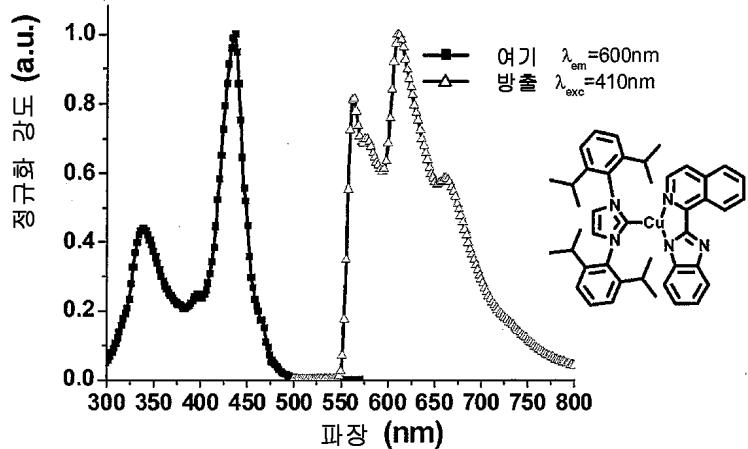


도면23



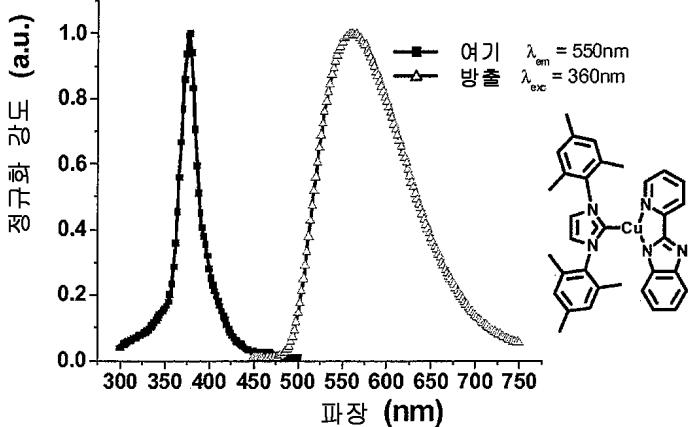
## 도면24

A. 보정된 방출 스펙트럼 및 여기 스펙트럼



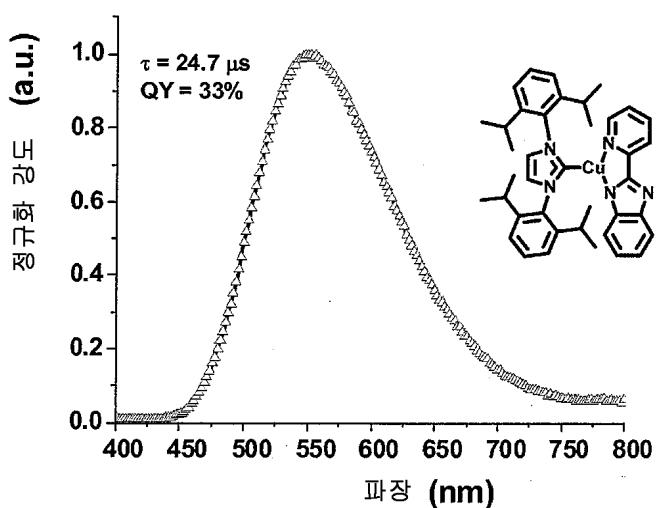
보정된 방출 스펙트럼 및 여기 스펙트럼

B. 보정된 방출 스펙트럼 및 여기 스펙트럼

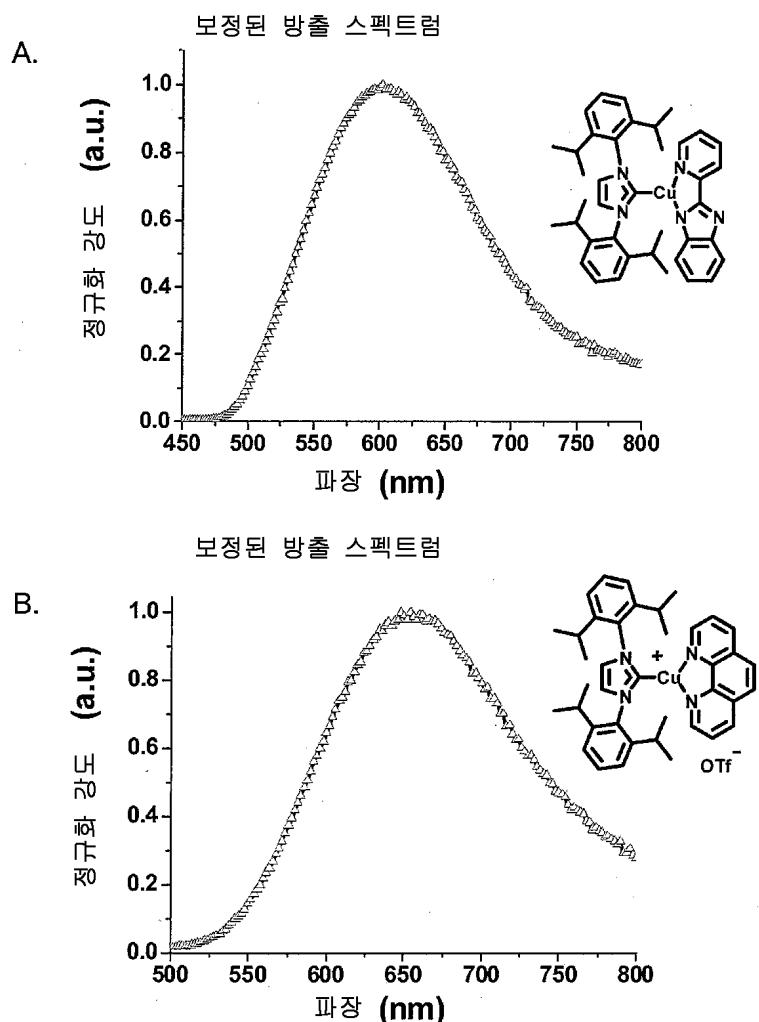


## 도면25

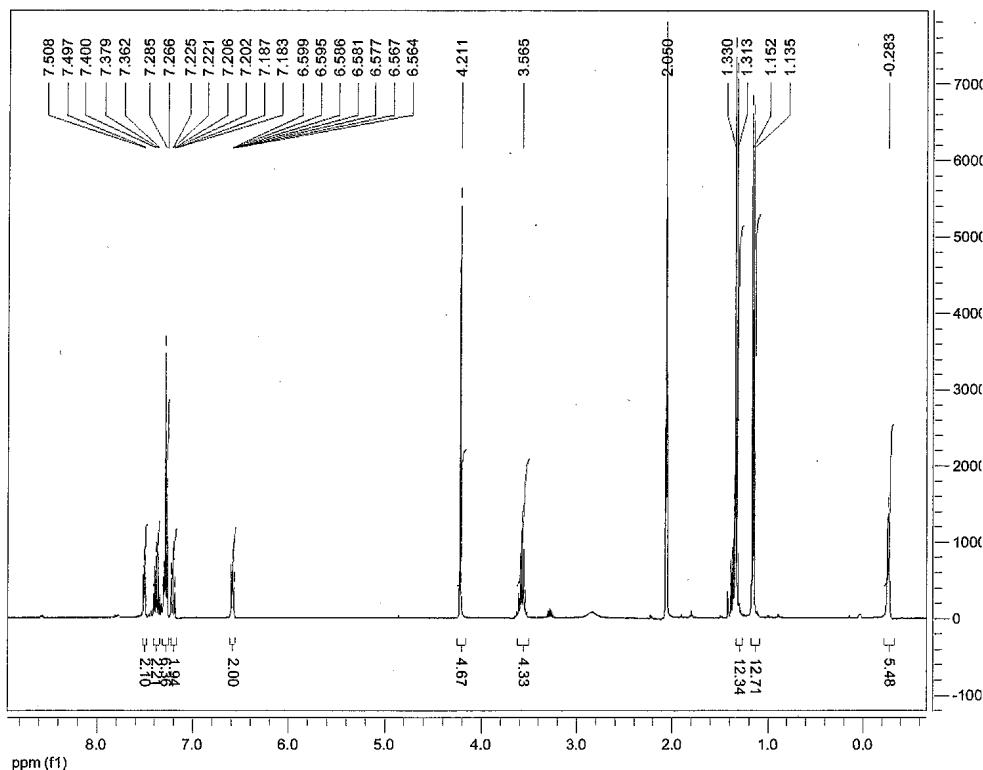
보정된 방출 스펙트럼



## 도면26

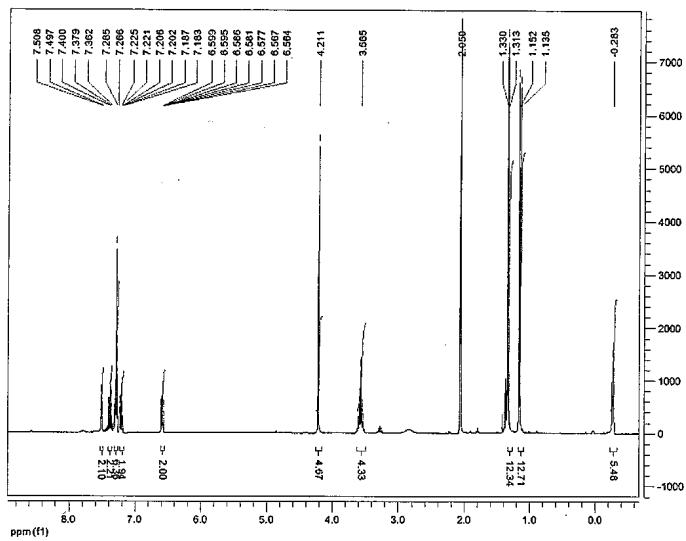


도면27

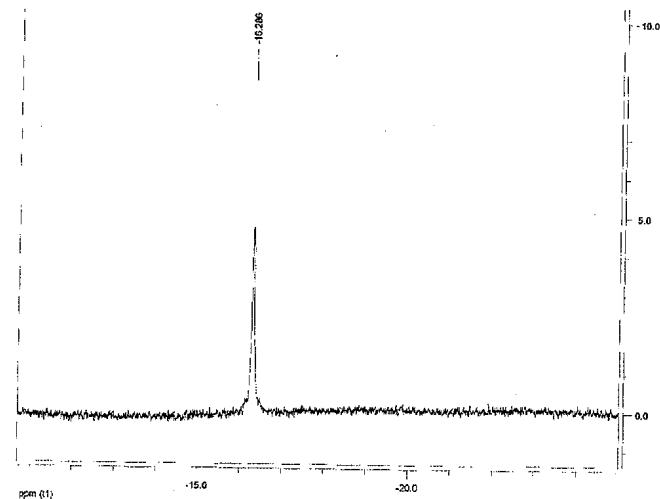


## 도면28

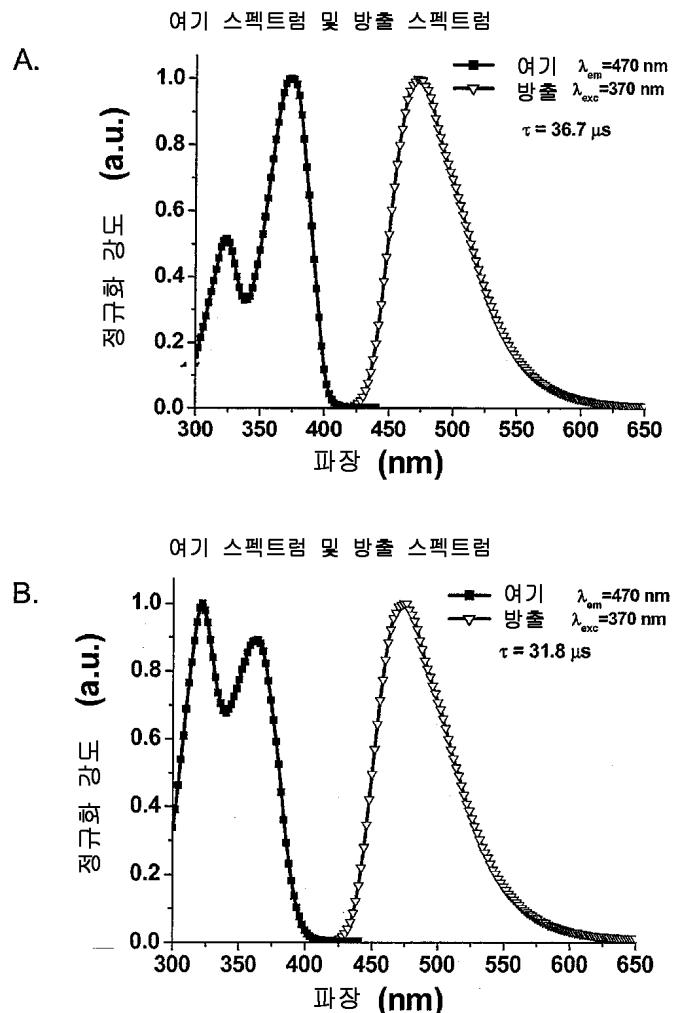
A.



B.

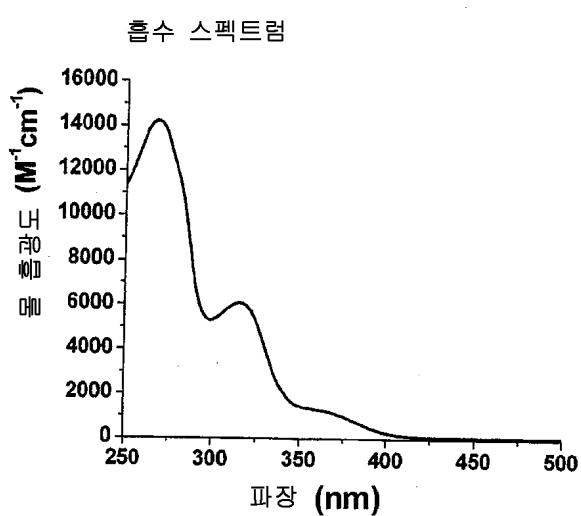


## 도면29



## 도면30

A.



B.

