



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2014년10월27일
(11) 등록번호 10-1455121
(24) 등록일자 2014년10월21일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2008-7018462
(22) 출원일자(국제) 2006년12월18일
심사청구일자 2011년12월16일
(85) 번역문제출일자 2008년07월25일
(65) 공개번호 10-2008-0085190
(43) 공개일자 2008년09월23일
(86) 국제출원번호 PCT/EP2006/069803
(87) 국제공개번호 WO 2007/074093
국제공개일자 2007년07월05일
(30) 우선권주장
05113030.0 2005년12월28일
유럽특허청(EPO)(EP)

(56) 선행기술조사문헌

US20010019782 A1

전체 청구항 수 : 총 9 항

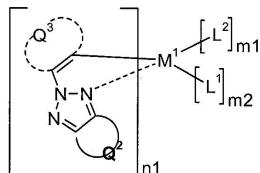
심사관 : 오세주

(54) 발명의 명칭 **트리아졸을 갖는 전계발광 금속 착체**

(57) 요 약

본 발명은 화학식 I의 트리아졸을 갖는 전계발광 금속 착체, 및 이를 제조하기 위한 신규한 중간체, 금속 착체를 포함하는 전자 장치, 및 산소 민감성 지시제, 생물검정에서의 인광성 지시제 및 촉매로서, 전자 장치, 특히 유기 발광 다이오드(OLED)에서 사용하기 위한 이의 용도에 관한 것이다.

화학식 I



위의 화학식 I에서,

n1은 1 내지 3의 정수이고,

m1 및 m2는 0, 1 또는 2의 정수이고,

M¹은 원자량이 40을 초과하는 금속이고,

L¹은 한자리 리간드 또는 두자리 리간드이고,

L²는 한자리 리간드이고,

Q²는 임의로 치환될 수 있는, 환화된 카보사이클릭 또는 헤테로사이클릭 비방향족 환을 트리아졸 환의 결합 탄소 원자와 함께 형성하는 유기 결합 그룹이며,

Q³은 임의로 치환될 수 있는, 축합 방향족 또는 헤테로방향족 환을 형성하는 그룹이다.

(72) 발명자
쉐퍼 토마스
스위스 체하-4410 리슈탈 바이트벡 15 데

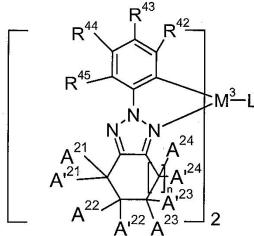
반 데어 샤프 폴 아드리안
프랑스 애프-68220 아젤텔-르-오트 루 뒤 뮤구에 1

특허청구의 범위

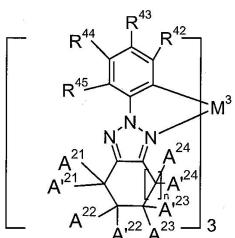
청구항 1

화학식 Va, Vb 또는 Vg의 구조를 갖는 화합물.

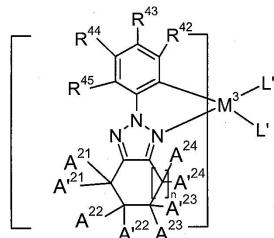
화학식 Va



화학식 Vb



화학식 Vg



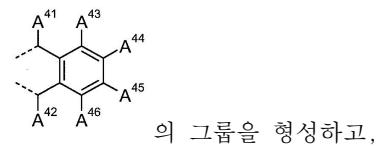
위의 화학식 Va, Vb 및 Vg에서,

M^3 은 Rh, Re 또는 Ir이고,

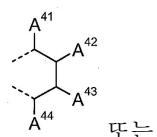
n 은 1이고,

A^{21} , A^{22} , A^{23} 및 A^{24} 는 서로 독립적으로 수소, CN, 할로겐; G에 의해 치환될 수 있는 C_1-C_{24} 알킬, C_1-C_{24} 알콕시, C_1-C_{24} 알킬티오, C_1-C_{24} 페플루오로알킬, C_6-C_{18} 아릴; $-NR^{25}R^{26}$, $-CONR^{25}R^{26}$ 또는 $-COOR^{27}$; 또는 G에 의해 치환될 수 있는 C_2-C_{10} 헥테로아릴; 또는 각각 G에 의해 치환될 수 있는 C_5-C_{12} 사이클로알킬, C_5-C_{12} 사이클로알콕시, 또는 C_5-C_{12} 사이클로알킬티오이거나,

2개의 인접한 라디칼인 A^{21} 과 A^{22} , A^{22} 과 A^{23} , A^{23} 과 A^{24} 는 인접한 원자에 결합하여, 함께 화학식



의 그룹을 형성하고,

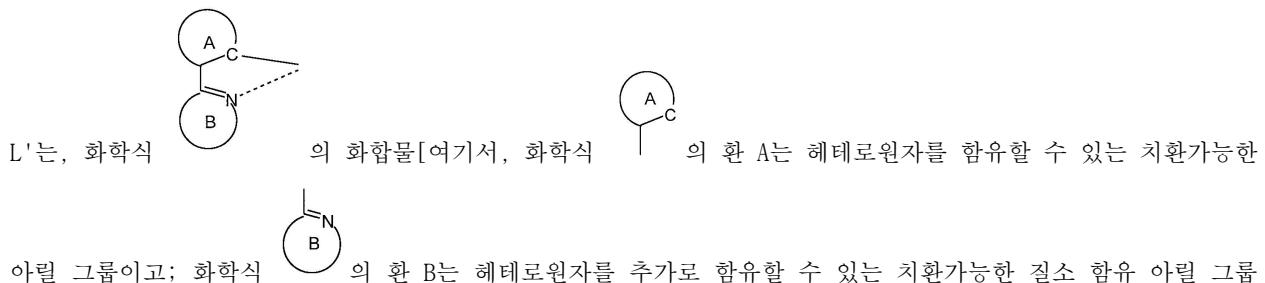


여기서, A^{41} , A^{42} , A^{43} , A^{44} , A^{45} , A^{46} 및 A^{47} 은 서로 독립적으로 H, 할로겐, CN; G에 의해 치환될 수 있는 C_1 - C_{24} 알킬, C_1 - C_{24} 페플루오로알킬, C_1 - C_{24} 알콕시, C_1 - C_{24} 알킬티오, C_6 - C_{18} 아릴, $-NR^{25}R^{26}$, $-CONR^{25}R^{26}$ 또는 $-COOR^{27}$, 또는 C_2 - C_{10} 헵테로아릴이거나,

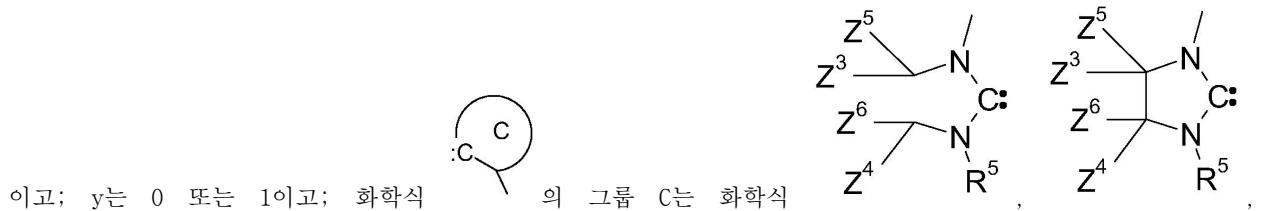
A'^{21} , A'^{22} , A'^{23} 및 A'^{24} 는 각각 독립적으로 수소 또는 C_1 - C_{24} 알킬이거나,

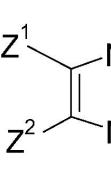
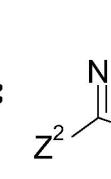
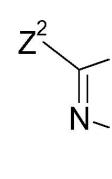
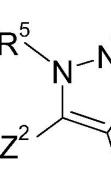
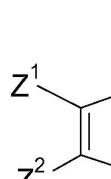
2개의 인접한 라디칼인 A'^{21} 과 A'^{21} , A'^{22} 와 A'^{22} , A'^{23} 과 A'^{23} , A'^{24} 와 A'^{24} 는 동일한 탄소원자에 결합하여, 함께 =0 또는 $=NR^{25}$ 를 형성하고,

G는 C_1 - C_{18} 알킬, $-OR^{305}$, $-SR^{305}$, $-NR^{305}R^{306}$, $-CONR^{305}R^{306}$ 또는 $-CN$ 이고, 여기서, R^{305} 및 R^{306} 은 서로 독립적으로 C_6 - C_{18} 아릴; C_1 - C_{18} 알킬 또는 C_1 - C_{18} 알콕시로 치환된 C_6 - C_{18} 아릴; C_1 - C_{18} 알킬, 또는 $-O-$ 로 차단된 C_1 - C_{18} 알킬이거나, R^{305} 와 R^{306} 은 함께 5원 또는 6원 환을 형성하고,

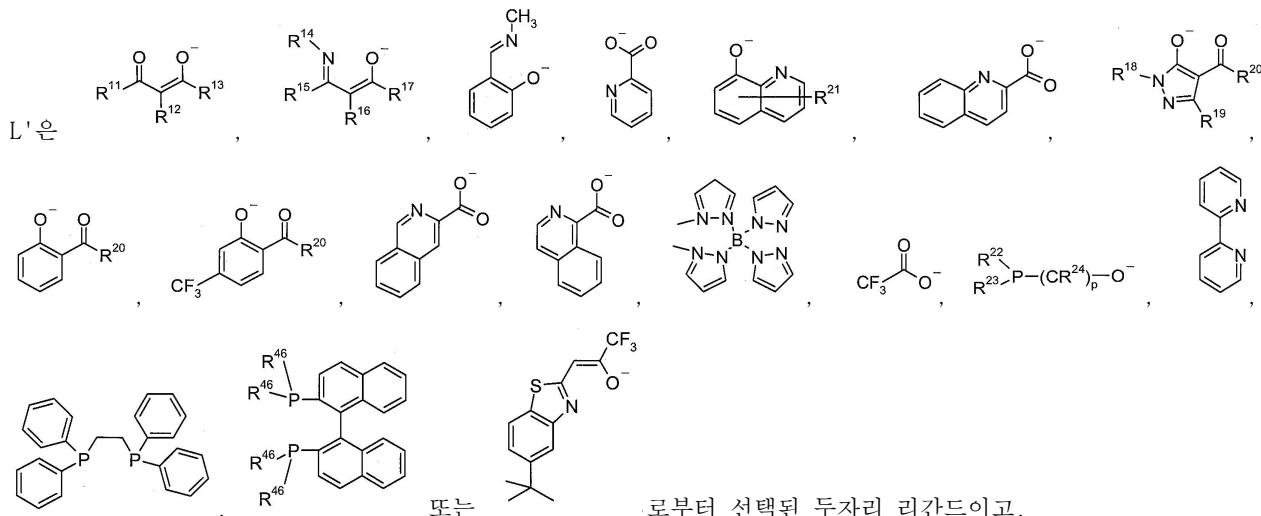


이거나; 환 A는 환 B에 결합되는 환 B와 함께 환을 형성할 수 있다] 또는 화학식
서, R^1 내지 R^4 는 서로 독립적으로 수소, 할로겐, 니트로, 시아노, C_1 - C_4 알킬, C_1 - C_4 페플루오로알킬 또는 C_1 - C_4 알콕시, $-S-C_1-C_4$ 알킬, $-O-C_1-C_4$ 페플루오로알킬, $-SO_2X^{22}$, $-CO_2H$, $-CO_2X^{22}$ (여기서, X^{22} 는 C_1 - C_4 알킬이다); $C_6H_4CF_3$, 사이클로헥실, 치환될 수 있는 C_6 - C_{10} 아릴, 치환될 수 있는 $-O-CH_2-C_6-C_{10}$ 아릴, 또는 치환될 수 있는 $-O-C_6-C_{10}$ 아릴




,

,

,

,

,
의 그룹{여기서, R^5 는 수
소; C_1 - C_{24} 알킬, C_2 - C_{24} 알케닐, C_2 - C_{24} 알키닐, C_2 - C_{24} 알콕시카보닐, 아릴, C_1 - C_{24} 카복실레이트, C_1 - C_{24} 알콕시, C_2 - C_{24} 알케닐옥시, C_2 - C_{24} 알키닐옥시 또는 아릴옥시이고, 상기 아릴옥시는 C_1 - C_8 알킬, 할로겐, C_1 - C_8 알콕시 또는 페닐 그룹으로 치환될 수 있고, 상기 페닐 그룹은 할로겐, C_1 - C_8 알킬 또는 C_1 - C_8 알콕시로 치환될 수 있고; Z^1 , Z^2 , Z^3 , Z^4 , Z^5 및 Z^6 은 서로 독립적으로 수소, C_1 - C_{24} 알킬, C_2 - C_{24} 알케닐, C_2 - C_{24} 알키닐, C_2 - C_{24} 알콕시카보닐, 아릴, C_1 -

C_{24} 카복실레이트, C_1-C_{24} 알콕시, C_2-C_{24} 알케닐옥시, C_2-C_{24} 알키닐옥시 및 아릴옥시로 이루어진 그룹(여기서, Z^1 , Z^2 , Z^3 및 Z^4 각각은 C_1-C_8 알킬, 할로겐, C_1-C_8 알콕시 또는 페닐 그룹으로 치환될 수 있고, 상기 페닐 그룹은 할로겐, C_1-C_8 알킬 또는 C_1-C_8 알콕시로 치환될 수 있거나, Z^1 및 Z^2 는 가능한 경우, 방향족 또는 혼테로방향족 환을 형성하고/하거나, Z^3 , Z^4 , Z^5 및 Z^6 은 가능한 경우, 알킬 또는 혼테로알킬 환을 형성한다)으로부터 선택된다}이다]이나,



로부터 선택된 두자리 리간드이고,

R^{11} 및 R^{15} 은 서로 독립적으로 수소, C_1-C_8 알킬, C_6-C_{18} 아릴, C_2-C_{10} 혼테로아릴 또는 C_1-C_8 페플루오로알킬이고,

R^{12} 및 R^{16} 은 서로 독립적으로 수소 또는 C_1-C_8 알킬이고,

R^{13} 및 R^{17} 은 서로 독립적으로 수소, C_1-C_8 알킬, C_6-C_{18} 아릴, C_2-C_{10} 혼테로아릴, C_1-C_8 페플루오로알킬 또는 C_1-C_8 알콕시이고,

R^{14} 는 C_1-C_8 알킬, C_6-C_{10} 아릴 또는 C_7-C_{11} 아르알킬이고,

R^{18} 은 C_6-C_{10} 아릴이고,

R^{19} 는 C_1-C_8 알킬이고,

R^{20} 은 C_1-C_8 알킬 또는 C_6-C_{10} 아릴이고,

R^{21} 은 수소, 부분적으로 또는 완전히 불소화될 수 있는, C_1-C_8 알킬 또는 C_1-C_8 알콕시이고,

R^{22} 및 R^{23} 은 서로 독립적으로 $C_6(H+F)_5O$ 이고,

R^{24} 는 H 이고,

p 는 2 또는 3이고,

R^{25} 및 R^{26} 은 서로 독립적으로 C_6-C_{18} 아릴, C_7-C_{18} 아르알킬, C_1-C_{24} 알킬 또는 C_5-C_{12} 사이클로알킬이고,

R^{27} 은 C_1-C_{24} 알킬, C_6-C_{18} 아릴 또는 C_7-C_{18} 아르알킬이고,

R^{42} 는 H , F , C_1-C_4 알킬, C_1-C_8 알콕시 또는 C_1-C_4 페플루오로알킬이고,

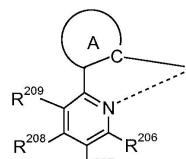
R^{43} 은 H, F, C₁-C₄알킬, C₁-C₄페플루오로알킬, C₁-C₈알콕시 또는 C₆-C₁₀아릴이고,

R^{44} 은 H, F, C₁-C₁₂알킬, C₇-C₁₅페닐알킬, C₁-C₈알콕시 또는 C₁-C₄페플루오로알킬이고,

R^{45} 은 H, F, C₁-C₄알킬, C₁-C₈알콕시 또는 C₁-C₄페플루오로알킬이고,

R^{46} 은 C₁-C₈알킬, C₆-C₁₈아릴, C₁-C₈알콕시, 또는 C₁-C₈알킬에 의해 치환된 C₆-C₁₈아릴이다.

청구항 2



제1항에 있어서, L'가 화학식 $\text{R}^{206}, \text{R}^{207}, \text{R}^{208}$ 및 R^{209} 의 그룹[여기서, $\text{R}^{206}, \text{R}^{207}, \text{R}^{208}$ 및 R^{209} 는 서로 독립적으로 수소, C₁-C₂₄알킬, C₂-C₂₄알케닐, C₂-C₂₄알카닐, 아릴, 헤테로아릴, C₁-C₂₄알콕시, C₁-C₂₄알킬티오, 시아노, 아실, 알킬옥시카보닐, 니트로 그룹 또는 할로겐 원자이고; 환 A는 치환될 수 있는 아릴 또는 헤테로아릴 그룹이거나; 환 A는 환 A에 결합되는 페리딜 그룹과 함께 환을 형성할 수 있고; $\text{R}^{206}, \text{R}^{207}, \text{R}^{208}$ 및 R^{209} 의 알킬 그룹, 알케닐 그룹, 알카닐 그룹, 아릴 그룹, 헤테로아릴 그룹, 알콕시 그룹, 알킬티오 그룹, 아실 그룹 및 알킬옥시카보닐 그룹은 치환될 수 있다]인 화합물.

청구항 3

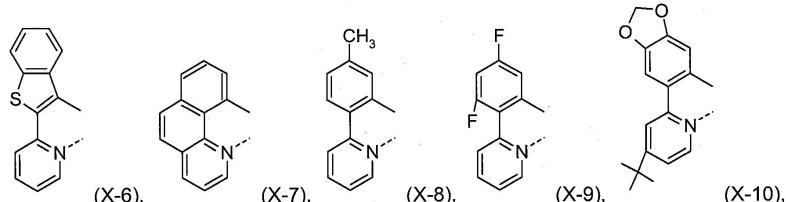
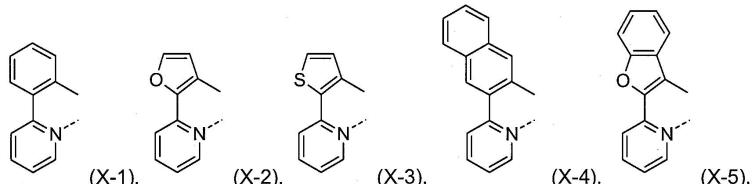
제1항에

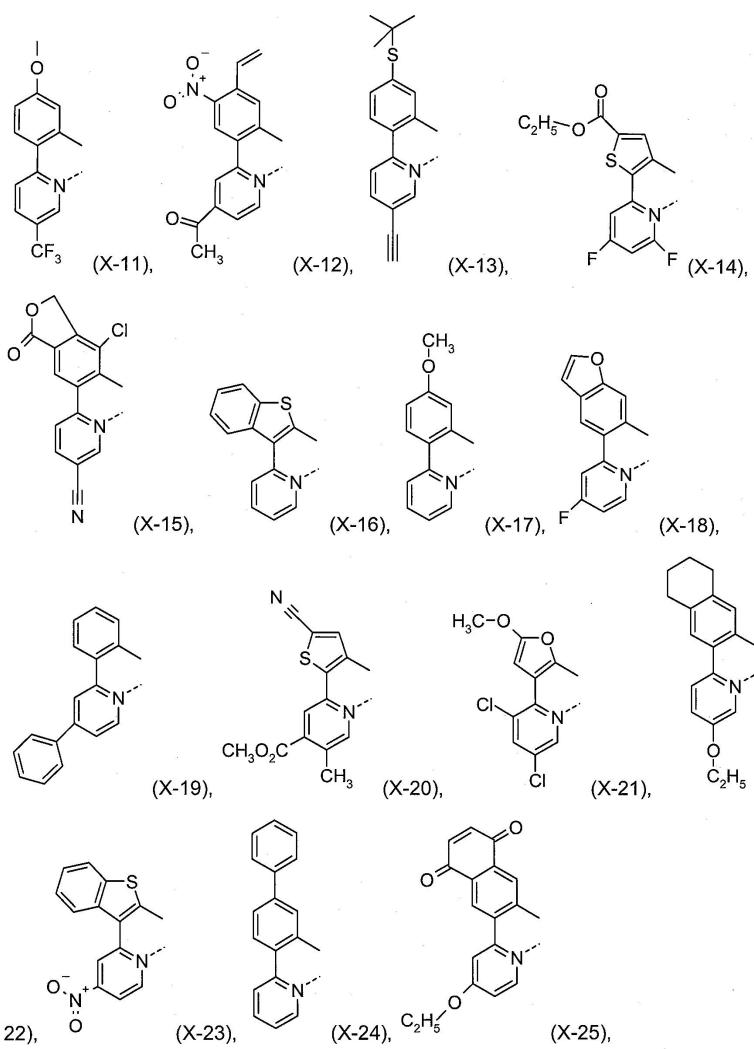
있어서,

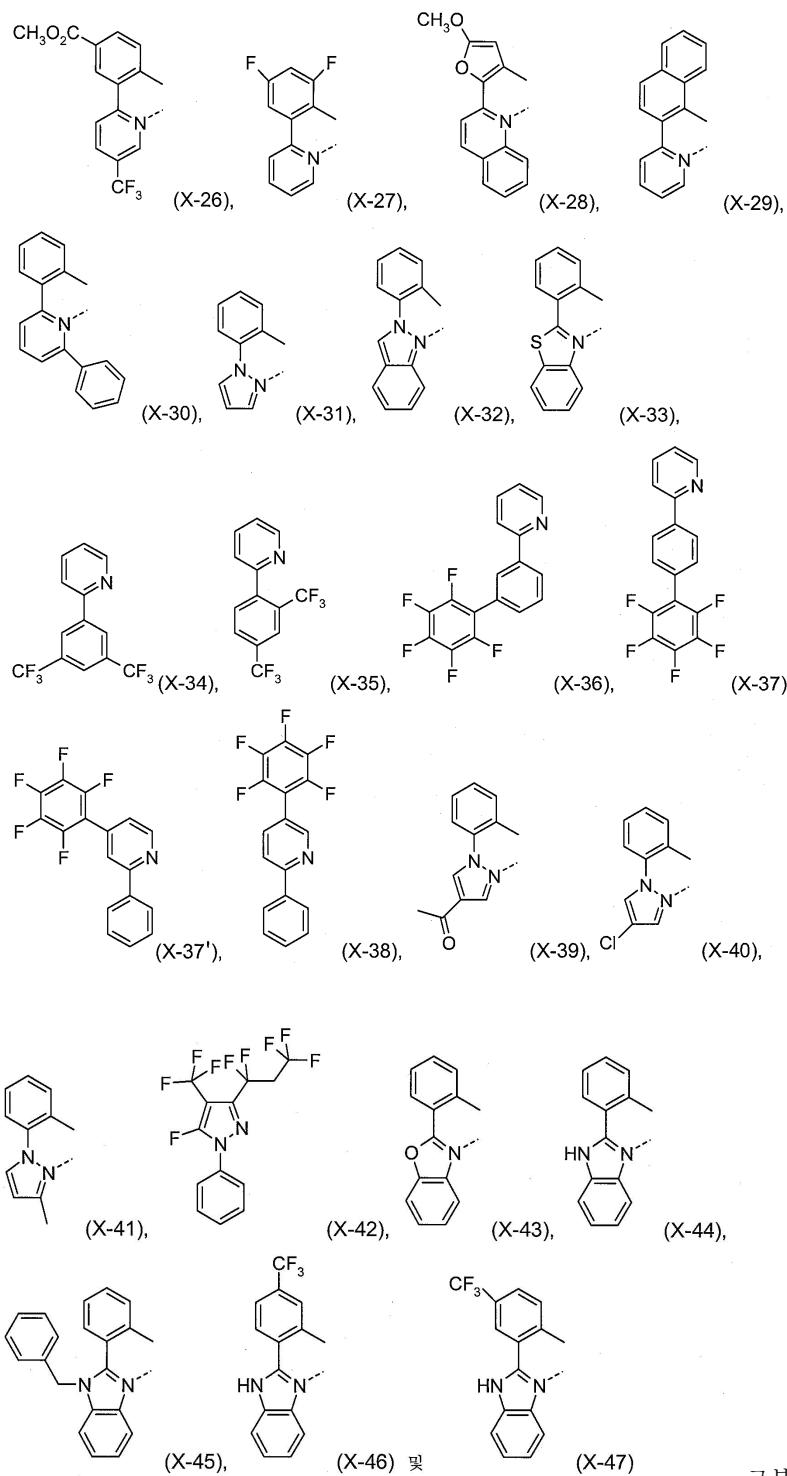
두자리

리간드인

L'가



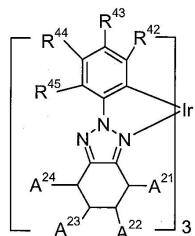




로부터 선택된 두자리 리간드인 화합물.

청구항 4

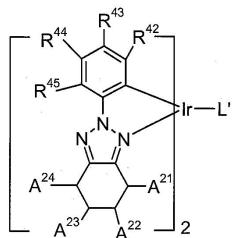
제1항에 있어서, 하기 화학식의 화합물인 화합물.



화합물	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ²⁴	A ²³	A ²²	A ²¹
A-1	H	H	H	H	H	H	H	H
A-2	F	H	H	H	H	H	H	H
A-3	H	H	F	H	H	H	H	H
A-4	F	H	F	H	H	H	H	H
A-5	F	H	H	F	H	H	H	H
A-6	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
A-7	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
A-8	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
A-9	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
A-10	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
A-11	H	H	Ph	H	H	H	H	H
A-12	H	H	OMe	H	H	H	H	H
A-13	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
A-14	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
A-15	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
A-16	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H
A-17	H	²⁾	H	H	H	H	H	H

¹⁾ 이성체의 혼합물.

²⁾ 2,4,4-트리메틸펜트-2-일.

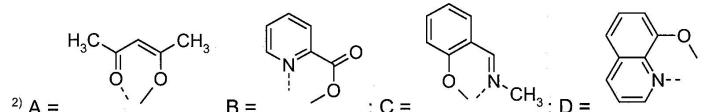


제작번호	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ²⁴	A ²³	A ²²	A ²¹
B-1	A ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
B-2	A ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
B-3	A ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
B-4	A ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
B-5	A ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
B-6	A ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
B-7	A ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
B-8	A ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
B-9	A ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
B-10	A ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-11	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
B-12	A ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
B-13	A ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
B-14	A ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-15	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
B-16	A ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
B-17	B ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
B-18	B ²⁾	F	F	H	H	H	H	H	H
B-19	B ²⁾	H	H	H	F	H	H	H	H
B-20	B ²⁾	F	F	H	F	H	H	H	H

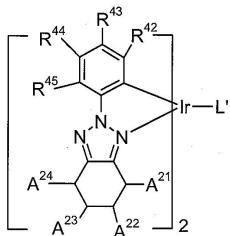
B-21	<u>B²⁾</u>	F	F	H	H	F	H	H	H
B-22	B ²⁾	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
B-23	B ²⁾	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
B-24	B ²⁾	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H	H
B-25	<u>B²⁾</u>	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
B-26	B ²⁾	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H
B-27	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H	H
B-28	<u>B²⁾</u>	H	H	H	OMe	H	H	H	H
B-29	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H
B-30	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
B-31	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
B-32	B ²⁾	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H
B-33	<u>C²⁾</u>	H	H	H	H	H	H	H	H
B-34	C ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
B-35	C ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
B-36	C ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
B-37	<u>C²⁾</u>	F	H	H	F	H	H	H	H
B-38	C ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
B-39	C ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
B-40	C ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
B-41	<u>C²⁾</u>	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
B-42	C ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-43	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
B-44	<u>C²⁾</u>	H	H	OMe	H	H	H	H	H
B-45	C ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
B-46	C ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-47	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
B-48	C ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H

B-49	<u>D²⁾</u>	H	H	H	H	H	H	H	H
B-50	D ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
B-51	D ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
B-52	D ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
B-53	<u>D²⁾</u>	F	H	H	F	H	H	H	H
B-54	D ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
B-55	D ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
B-56	D ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
B-57	<u>D²⁾</u>	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
B-58	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-59	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
B-60	<u>D²⁾</u>	H	H	OMe	H	H	H	H	H
B-61	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
B-62	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-63	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
B-64	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
B-65	A	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
B-66	B	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
B-67	C	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
B-68	D	H	³⁾	H	H	H	H	H	H

1) o] 성체의 혼합물.



³⁾ 2,4,4-트리 메틸펜트-2-올.

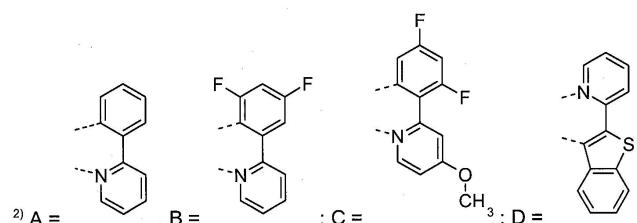


화합물	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ²⁴	A ²³	A ²²	A ²¹
S-1	A ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
S-2	A ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
S-3	A ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
S-4	A ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
S-5	A ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
S-6	A ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
S-7	A ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
S-8	A ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
S-9	A ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
S-10	A ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-11	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
S-12	A ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
S-13	A ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
S-14	A ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-15	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
S-16	A ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
S-17	B ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
S-18	B ²⁾	F	F	H	H	H	H	H	H
S-19	B ²⁾	H	H	H	F	H	H	H	H
S-20	B ²⁾	F	F	H	F	H	H	H	H

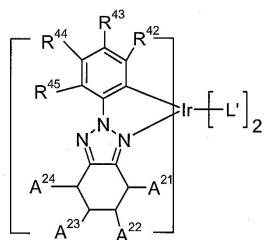
S-21	<u>B²⁾</u>	F	F	H	H	F	H	H	H
S-22	B ²⁾	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
S-23	B ²⁾	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
S-24	B ²⁾	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H	H
S-25	<u>B²⁾</u>	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
S-26	B ²⁾	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H
S-27	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H	H
S-28	<u>B²⁾</u>	H	H	H	OMe	H	H	H	H
S-29	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H
S-30	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
S-31	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H/PPh ¹⁾	Ph/H ¹⁾
S-32	B ²⁾	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H
S-33	<u>C²⁾</u>	H	H	H	H	H	H	H	H
S-34	C ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
S-35	C ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
S-36	C ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
S-37	<u>C²⁾</u>	F	H	H	F	H	H	H	H
S-38	C ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
S-39	C ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
S-40	C ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
S-41	<u>C²⁾</u>	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
S-42	C ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-43	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
S-44	<u>C²⁾</u>	H	H	OMe	H	H	H	H	H
S-45	C ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
S-46	C ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-47	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/PPh ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
S-48	C ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H

S-49	<u>D²⁾</u>	H	H	H	H	H	H	H	H
S-50	D ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
S-51	D ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
S-52	D ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
S-53	<u>D²⁾</u>	F	H	H	F	H	H	H	H
S-54	D ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
S-55	D ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
S-56	D ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
S-57	<u>D²⁾</u>	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
S-58	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-59	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
S-60	<u>D²⁾</u>	H	H	OMe	H	H	H	H	H
S-61	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
S-62	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-63	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
S-64	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
S-65	A	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
S-66	B	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
S-67	C	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
S-68	D	H	³⁾	H	H	H	H	H	H

1) 이성체의 혼합물.



3) 2,4,4-트리메틸펜트-2-일.

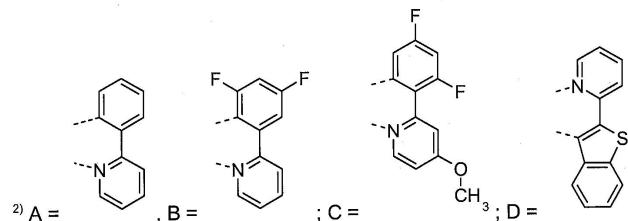


화합물	L'	R^{45}	R^{44}	R^{43}	R^{42}	A^{24}	A^{23}	A^{22}	A^{21}
T-1	$A^{2)}$	H	H	H	H	H	H	H	H
T-2	$A^{2)}$	F	H	H	H	H	H	H	H
T-3	$A^{2)}$	H	H	F	H	H	H	H	H
T-4	$A^{2)}$	F	H	F	H	H	H	H	H
T-5	$A^{2)}$	F	H	H	F	H	H	H	H
T-6	$A^{2)}$	H	H	CF_3	H	H	H	H	H
T-7	$A^{2)}$	H	CF_3	H	CF_3	H	H	H	H
T-8	$A^{2)}$	CF_3	H	H	H	H	H	H	H
T-9	$A^{2)}$	H	CH_3	H	CH_3	H	H	H	H
T-10	$A^{2)}$	H	H	CH_3	H	H	H	H	H
T-11	$A^{2)}$	H	H	Ph	H	H	H	H	H
T-12	$A^{2)}$	H	H	OMe	H	H	H	H	H
T-13	$A^{2)}$	CH_3	CH_3	H	H	H	H	H	H
T-14	$A^{2)}$	CH_3	H	CH_3	H	H	H	H	H
T-15	$A^{2)}$	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
T-16	$A^{2)}$	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
T-17	$B^{2)}$	H	H	H	H	H	H	H	H
T-18	$B^{2)}$	F	F	H	H	H	H	H	H
T-19	$B^{2)}$	H	H	H	F	H	H	H	H
T-20	$B^{2)}$	F	F	H	F	H	H	H	H

T-21	<u>B²⁾</u>	F	F	H	H	F	H	H	H
T-22	B ²⁾	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
T-23	B ²⁾	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
T-24	B ²⁾	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H	H
T-25	<u>B²⁾</u>	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
T-26	B ²⁾	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H
T-27	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H	H
T-28	<u>B²⁾</u>	H	H	H	OMe	H	H	H	H
T-29	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H
T-30	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
T-31	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
T-32	B ²⁾	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H
T-33	<u>C²⁾</u>	H	H	H	H	H	H	H	H
T-34	C ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
T-35	C ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
T-36	C ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
T-37	<u>C²⁾</u>	F	H	H	F	H	H	H	H
T-38	C ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
T-39	C ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
T-40	C ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
T-41	<u>C²⁾</u>	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
T-42	C ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
T-43	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
T-44	<u>C²⁾</u>	H	H	OMe	H	H	H	H	H
T-45	C ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
T-46	C ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
T-47	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
T-48	C ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H

T-49	<u>D²⁾</u>	H	H	H	H	H	H	H	H
T-50	D ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
T-51	D ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
T-52	D ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
T-53	<u>D²⁾</u>	F	H	H	F	H	H	H	H
T-54	D ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
T-55	D ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
T-56	D ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
T-57	<u>D²⁾</u>	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
T-58	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
T-59	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
T-60	<u>D²⁾</u>	H	H	OMe	H	H	H	H	H
T-61	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
T-62	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
T-63	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
T-64	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
T-65	A	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
T-66	B	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
T-67	C	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
T-68	D	H	³⁾	H	H	H	H	H	H

¹⁾ 이성체의 혼합물.



청구항 5

제1항 내지 제4항 중의 어느 한 항에 기재된 화합물을 포함하는 발광층을 포함하는, 유기 전자 장치.

청구항 6

제5항에 있어서, 폴리비닐카바졸, N,N'-디페닐-N,N'-비스(3-메틸페닐)-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), 1,1-비스[(디-4-톨릴아미노)페닐]사이클로헥산(TAPC), N,N'-비스(4-메틸페닐)-N,N'-비스(4-에틸페닐)-[1,1'-(3,3'-디메틸)비페닐]-4,4'-디아민(ETPD), 테트라카이스-(3-메틸페닐)-N,N,N',N'-2,5-페닐렌디아민(PDA), a-페닐-4-N,N-디페닐아미노스티렌(TPS), p-(디에틸아미노)벤즈알데히드 디페닐하이드라존(DEH), 트리페닐아민(TPA), 비스[4-(N,N-디에틸아미노)-2-메틸페닐](4-메틸페닐)메탄(MPMP), 1-페닐-3-[p-(디에틸아미노)스티릴]-5-[p-(디에틸아미노)페닐]파라졸린(PPR 또는 DEASP), 1,2-트랜스-비스(9H-카바졸-9-일)사이클로부탄(DCZB), N,N,N',N'-테트라카이스(4-메틸페닐)-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민(TTB), 포르피린 화합물 및 이들의 배합물로부터 선택된 정공 수송층을 추가로 포함하는, 유기 전자 장치.

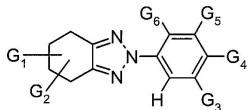
청구항 7

제1항 내지 제4항 중의 어느 한 항에 있어서, 전자 장치에서, 산소 민감성 지시제로서, 인광 지시제로서, 생물 검정에서, 또는 촉매로서 사용되는 화합물.

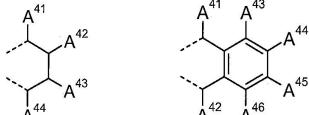
청구항 8

제7항에 있어서, 유기 발광 다이오드(OLED)에서 사용되는 화합물.

청구항 9



화학식 의 화합물[여기서, G₁ 및 G₂는 독립적으로 수소, CN, 할로겐, C₁-C₁₂알킬, C₁-C₁₂할로알킬, C₁-C₁₂알콕시, C₁-C₁₂알킬티오, C₅-C₁₂사이클로알킬, C₅-C₁₂사이클로알콕시, C₅-C₁₂사이클로알킬티오, C₆-C₁₂아릴, C₂-C₁₀페테로아릴, C₇-C₁₅아릴알킬, C₆-C₁₂아릴옥시, C₆-C₁₂아릴아미노이거나; 인접 원자에 결합되는 G₁과 G₂



는 함께 화학식 또는 의 그룹(여기서, A⁴¹, A⁴², A⁴³, A⁴⁴, A⁴⁵, A⁴⁶ 및 A⁴⁷은 각각 독립적으로 H, 할로겐, CN, C₁-C₁₂알킬, C₁-C₁₂할로알킬, C₁-C₁₂알콕시, C₁-C₁₂알킬티오 또는 C₆-C₁₂아릴이다)을 형성하거나; 동일한 탄소원자에 결합한 G₁과 G₂는 함께 =O, =NR²⁵, =N-OR²⁵ 또는 =N-OH(여기서, R²⁵는 C₁-C₁₂알킬 또는 사이클로헥실이다)를 형성하고; G₃, G₄, G₅ 및 G₆은 독립적으로 수소, C₄-C₁₈알킬, C₁-C₈페플루오로알킬 및 플루오로로부터 선택되고; G₃, G₄, G₅ 및 G₆ 중의 하나 이상은 수소와 상이하다].

청구항 10

삭제

청구항 11

삭제

명세서

[0001] 본 발명은 트리아졸을 갖는 전계발광 금속 착체, 이를 제조하기 위한 신규한 중간체, 금속 착체를 포함하는 전자 장치, 및 산소 민감성 지시제, 생물검정에서의 인광성 지시제 및 촉매로서, 전자 장치, 특히 유기 발광 다이오드(OLED)에 사용하기 위한 이의 용도에 관한 것이다.

[0002] 발광하는 유기 전자 장치, 예를 들면, 디스플레이를 구성하는 발광 다이오드는 많은 상이한 종류의 전자 설비에서 존재한다. 모든 상기한 장치에서, 유기 활성 층은 2개의 전기 접촉 층들 사이에 샌드위칭되어 있다. 전기 접촉 층들 중의 1개 이상은 광이 전기 접촉 층을 통해 통과하도록 투광한다. 전기 접촉 층을 통해 전기 인가시, 유기 활성 층은 투광 전기 접촉 층을 통해 발광한다.

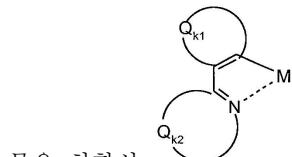
[0003] 유기 전계발광 화합물을 발광 다이오드에서 활성 성분으로서 사용하는 것이 널리 공지되어 있다. 간단한 유기 분자, 예를 들면, 안트라센, 티아디아졸 유도체 및 쿠마린 유도체는 전계발광을 나타내는 것으로 공지되어 있다. 또한, 반전도성 공액 중합체도 전계발광 부품으로서, 예를 들면, 미국 특허공보 제5,247,190B호, 미국 특허공보 제5,408,109B호 및 유럽 공개특허공보 제443 861A호에 기재된 바와 같이 사용되고 있다. 8-하이드록시퀴놀레이트와 3가 금속 이온, 특히 알루미늄파의 착체는 전계발광 부품으로서, 예를 들면, 미국 공개특허공보 제5,552,678A호에 기재된 바와 같이 광범위하게 사용되고 있다.

[0004] 버로우즈(Burrows) 및 톰슨(Thompson)은 fac-트리스(2-페닐페리딘)이리듐을 유기 발광 장치에서 활성 성분으로 사용할 수 있다고 보고한 바 있다[참조: Appl. Phys. Lett. 1999, 75, 4]. 이리듐 화합물이 호스트 전도성 물질에 존재할 때 성능이 최대화된다. 톰슨은 활성 층이 fac-트리스[2-(4',5'-디플루오로페닐)페리딘-C'.sup.2,N]이리듐(III)으로 도핑된 폴리(N-비닐 카바졸)인 장치를 추가로 보고한 바 있다[참조: Polymer Preprints 2000, 41(1), 770].

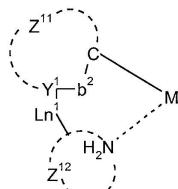
[0005] 문헌[참조: J. A. C. Allison et al., J. Heterocyclic Chem. 12 (1975) 1275-1277]에는, 팔라듐의 2-페닐-1,2,3-트리아졸 클로로 착체 및 클로로화 폐닐 트리아진의 합성에서 촉매로서의 이의 용도가 기재되어 있다.

[0006] 문헌[참조: M. Nonoyama and C. Hayata, *Transition Met. Chem.* 3 (1978) 366-369]에는, 2-아릴-4,5-디메틸-1,2,3-트리아졸[H(C-N)]과 염화팔라듐(II), 염화백금(II), 염화로듐(III) 및 염화이리듐(III)과의 사이클로금속화(cyclometallation)로 $[MC1(C-N)]_2$ (여기서, M은 Pd 또는 Pt이다) 및 $[MC1(C-N)_2]_2$ (여기서, M은 Rh 또는 Ir이다) 화학종이 형성된다고 기재되어 있다. 상기 착체는 피리딘 및 트리-n-부틸포스핀과 같은 한자리 리간드 L과 반응하여 $MC1(C-N)L$ 및 $MC1(C-N)_2L$ 착체를 제공한다.

[0007] 미국 공개특허공보 제20020055014호는 인광 화합물을 포함하는 발광 장치에 관한 것이다. 바람직한 인광 화합

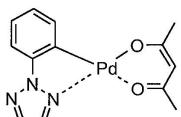


물은 화학식 의 화합물(여기서, M은 전이금속이고, Q_{k1} 은 5원 또는 6원 방향족 환을 형성하는 데 필요한 원자 그룹이고, Q_{k2} 는 5원 또는 6원 방향족 아졸 환을 형성하는 데 필요한 원자 그룹이다)을 포함한다. Q_{k2} 로 완성된 5원 또는 6원 방향족 아졸 환은 트리아졸을 포함할 수 있지만, 1,2,3-트리아졸을 포함하지 않는다.



[0008] 미국 공개특허공보 제20010019782호에는 화학식 의 화합물(여기서, Z^{11} 및 Z^{12} 는 각각 1개 이상의 탄소원자 및 질소원자를 갖는 5원 또는 6원 환을 형성하는 데 필요한 비금속성 원자 그룹이고, 상기 환은 임의로 치환체를 갖거나 다른 환과 축합된 환을 형성하고; Ln^1 은 2가 그룹이고; Y^1 은 질소원자 또는 탄소원자이고; b^2 는 단일 결합 또는 이중 결합이다)을 포함하는 발광 물질이 기재되어 있다. Z^{11} 과 Z^{12} 로 형성된 5원 또는 6원 환의 바람직한 예들 중에서, 1,2,3-트리아졸 환 및 1,2,4-트리아졸 환이 있다. 2가 그룹 Ln^1 은 단일 결합을 포함하지 않는다.

[0009] 벤조이미다졸계 리간드를 함유하는 인광 비스-사이클로금속화 이리듐 착체가 문헌[참조: W.-S. Huang et al. in *Chem. Mater.* 16(2004) 2480-2488]에 기재되어 있다.

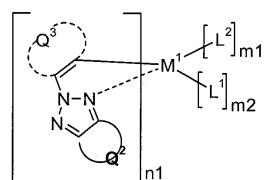


[0010] 화학식 의 사이클로백금화 금속 착체의 1H 및 ^{13}C NMR은 문헌[참조: P. J. Steel, G. B. Caygill, *Journal of Organometallic Chemistry* 327 (1987) 101-114]에 기재되어 있다.

[0011] 그러나, 효율이 개선된 전계발광 화합물이 계속해서 요구되어 왔다.

[0012] 따라서, 본 발명은 화학식 I의 화합물(즉, 금속 착체), 및 추가로 이의 제조방법, 금속 착체를 포함하는 전자 장치, 및 산소 민감성 지시제, 생물검정에서의 인광성 지시제 및 촉매로서, 전자 장치, 특히 유기 발광 다이오드(OLED)에 사용하기 위한 이의 용도에 관한 것이다.

화학식 I



[0013]

[0014] 위의 화학식 I에서,

[0015] $n1$ 은 1 내지 3의 정수이고,

[0016] m_1 및 m_2 는 0, 1 또는 2의 정수이고,

[0017] M^1 은 원자량이 40을 초과하는 금속이고,

[0018] L^1 은 한자리 리간드 또는 두자리 리간드이고,

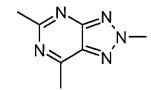
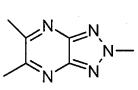
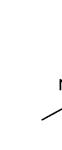
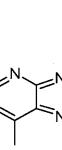
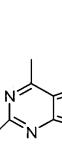
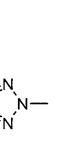
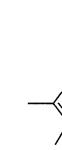
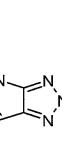
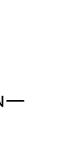
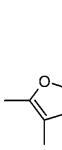
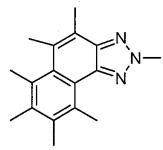
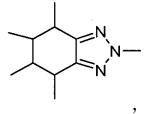
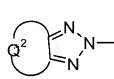
[0019] L^2 는 한자리 리간드이고,

[0020] Q^2 는 임의로 치환될 수 있는, 환화된 카보사이클릭 또는 헤테로사이클릭 비방향족 환을 트리아졸 환의 결합 탄소 원자와 함께 형성하는 유기 결합 그룹이며,

[0021] Q^3 은 임의로 치환될 수 있는, 축합 방향족 또는 헤테로방향족 환을 형성하는 그룹이다.

[0022] 본 발명은 이의 탄소원자를 통한 트리아졸 환화로부터 비방향족 카보사이클릭 또는 헤테로사이클릭 환으로 유도된 하나 이상의 리간드, 특히, 2,4,5,6,7-펜타하이드로-벤조트리아졸을 포함하는 금속 착체에 관한 것이다. 본 발명과 관련하여 펜타하이드로-벤조트리아졸 화합물은 (카보사이클릭) 벤조트리아졸 또는 헤테로-벤조트리아졸을 의미한다.

[0023] 위의 화학식 I에 함유된, 트리아졸 리간드의 화학식



또는 의 그룹을 포함한다. 잔기의 개방 원자는 이의 치환이 제한되지 않는 공유 결합을 나타낸다고 이해한다. 본 발명에 따르면, 금속 착체는 위의 트리아졸 리간드 중의 하나 이상을 포함하며, 즉 위의 트리아졸 리간드 2종, 3종 또는 그 이상을 포함한다. 따라서, 위의 화학식에서 각각의 개방 선은 동일한 리간드의 또 다른 부분에 대한 결합의 위치(치환 포함), 또는 추가로 수소원자를 나타낸다. 예를 들면,

화학식 은 특히,

[0024] 4-페닐아미노-6,6-디메틸-4,5,6,7-테트라하이드로-벤조트리아졸-2-일,

[0025] 4-옥소-6,6-디메틸-4,5,6,7-테트라하이드로-벤조트리아졸-2-일,

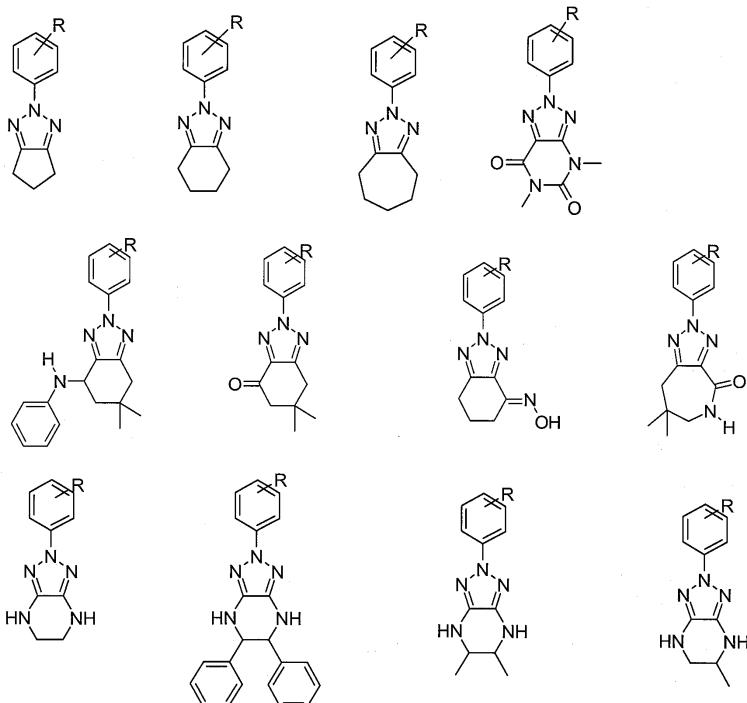
[0026] 4-하이드록시아미노-4,5,6,7-테트라하이드로-벤조트리아졸-2-일,

[0027] 5-플루오로-4,5,6,7-테트라하이드로-벤조트리아졸-2-일,

[0028] 5-트리플루오로메틸-4,5,6,7-테트라하이드로-벤조트리아졸-2-일을 포함한다.

[0029]

적합한 트리아졸 리간드의 몇 가지 예는 다음 화학식의 리간드를 포함한다:



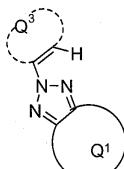
[0030]

[0031]

[여기서, R은 수소, C₁-C₈알킬, 하이드록실 그룹, 머캅토 그룹, C₁-C₈알콕시, C₁-C₈알킬티오, 할로겐, 할로-C₁-C₈알킬, 시아노 그룹, 알데히드 그룹, 케톤 그룹, 카복실 그룹, 에스테르 그룹, 카바모일 그룹, 아미노 그룹, 니트로 그룹 및 실릴 그룹으로부터 선택된다]

[0032]

적합한 트리아졸 리간드는 예를 들면, 이의 불포화 전구체(불포화 환 Q¹을 함유하는 아래의 화학식 참조)를 수소화시킨 다음, 당해 기술분야에 공지된 방법에 따라 제조할 수 있다. 트리아졸로페페라진 등의 헤테로사이클릭 유도체의 제조방법은 예를 들면, 문헌[참조: Sato et al., *J. Organic Chemistry* 1978, 43, 341]에 기재되어 있거나, 상기 문헌에 기재된 공정에 따를 수 있다.



[0033]

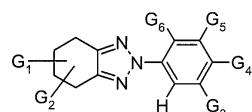
환 Q¹을 함유하는 상기 트리아졸 리간드(화학식:)의 유사체[여기서, Q¹은 불포화됨을 제외하고는 상기 리간드의 Q²에 상응한다(즉, 예를 들면, 벤조트리아졸의 경우, 환 시스템에 에틸렌계 이중 결합의 최대 가능한 수를 함유한다)]는 종종 공지되어 있거나, 공지된 공정에 따라 제조할 수 있다[예를 들면, 제W003/105538호, 제W005/054212호, 및 상기 문헌에 인용된 문헌 참조].

[0034]

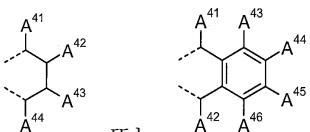
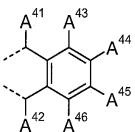
이의 탄소원자를 통하여 비방향족 환으로 환화되고 본 발명 내에서 트리아졸 리간드로서 유용한 트리아졸의 몇 가지 추가의 제조방법은 제W005/093007호 및 문헌[참조: Abdel Hamid et al., *Egypt. Organic Preparations and Procedures International* (1993), 25(5), 569-75 (CAN 120:217442)]에 기재되어 있다.

[0035]

본 발명 내에서 유용한 몇 가지 트리아졸 리간드는 신규한 화합물이다. 따라서, 본 발명은 또한 화학식



의 화합물[여기서, G₁ 및 G₂는 독립적으로 수소, CN, 할로겐, C₁-C₁₂알킬, C₁-C₁₂할로알킬, C₁-C₁₂알콕시, C₁-C₁₂알킬티오, C₅-C₁₂사이클로알킬, C₅-C₁₂사이클로알콕시, C₅-C₁₂사이클로알킬티오, C₆-C₁₂아릴, C₂-C₁₀헤테로아릴, C₇-C₁₅아릴알킬, C₆-C₁₂아릴옥시, C₆-C₁₂아릴아미노이거나; 이웃 원자에 결합한 G₁과 G₂는 함께 화학식

식  또는 의 그룹(여기서, A^{41} , A^{42} , A^{43} , A^{44} , A^{45} , A^{46} 및 A^{47} 은 각각 독립적으로 H, 할로

겐, CN, C_1 - C_{12} 알킬, C_1 - C_{12} 할로알킬, C_1 - C_{12} 알콕시, C_1 - C_{12} 알킬티오 또는 C_6 - C_{12} 아릴이다), 특히 화학식  또는

을 형성하거나; 동일한 탄소원자에 결합한 G_1 과 G_2 는 함께 $=O$, $=NR^{25}$, $=N-OR^{25}$ 또는 $=N-OH$ (여기서, R^{25} 는 C_1 - C_{12} 알킬 또는 사이클로헥실이다)를 형성하고; G_3 , G_4 , G_5 및 G_6 은 독립적으로 수소, C_4 - C_{18} 알킬, C_1 - C_8 페플루오로알킬, 플루오로로부터 선택되고; G_3 , G_4 , G_5 및 G_6 중의 하나 이상은 수소와 상이하며; 특히 G_3 , G_4 , G_5 및 G_6 중의 하나는 CF_3 또는 F이고, 다른 것들은 수소 또는 F이다]에 관한 것이다.



[0036] 화학식 의 특정 예는 Y^1 , Y^2 및 Y^3 의 정의에서 아래에 제시한다.

[0037] 용어 "리간드"은 금속 이온의 배위권(coordination sphere)에 연결된 분자, 이온 또는 원자를 의미한다. 용어 "착체"는, 명사로서 사용될 때, 1개 이상의 금속 이온 및 1개 이상의 리간드를 갖는 화합물을 의미한다. 용어 "그룹"은 유기 화합물에서 치환체 또는 착체에서 리간드와 같은 화합물의 일부를 의미한다. 용어 "면(facia 1)"은 팔면체 기하를 갖는 착체 Ma_3b_3 의 하나의 이성체를 의미하며, 여기서, 3개의 "a" 그룹은 모두 인접하여, 즉 팔면체의 하나의 삼각형 면의 모서리에 있다. 용어 "자오선"은 팔면체 기하를 갖는 착체 Ma_3b_3 의 하나의 이성체를 의미하며, 여기서, 2개의 "a" 그룹이 서로에 대해 트랜스 위치가 되도록, 즉 3개의 "a" 그룹이 3개의 공면 위치(coplanar position)에 자리하여, 자오선으로서 생각될 수 있는 배위권을 가로지르는 원호를 형성하도록, 3개의 "a" 그룹이 3개의 위치를 차지한다. 용어 "인접한"은, 장치에서 층을 언급하는 데 사용될 때, 반드시 하나의 층이 또 다른 층에 바로 뒤따른다는 것을 의미하지 않는다. 용어 "광활성"은 전계발광현상 및/또는 광민감도를 나타내는 어떠한 물질이라도 의미한다.

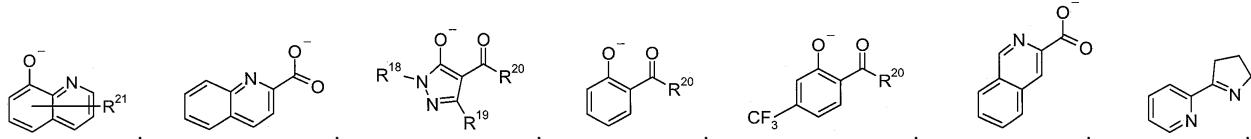
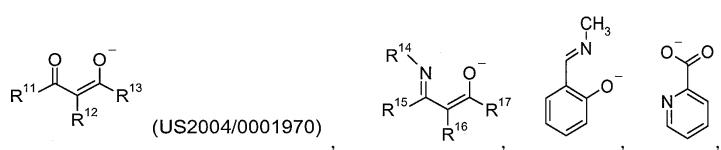
[0038] 금속은 일반적으로 원자량이 40을 초과하는 금속 M^1 이다.

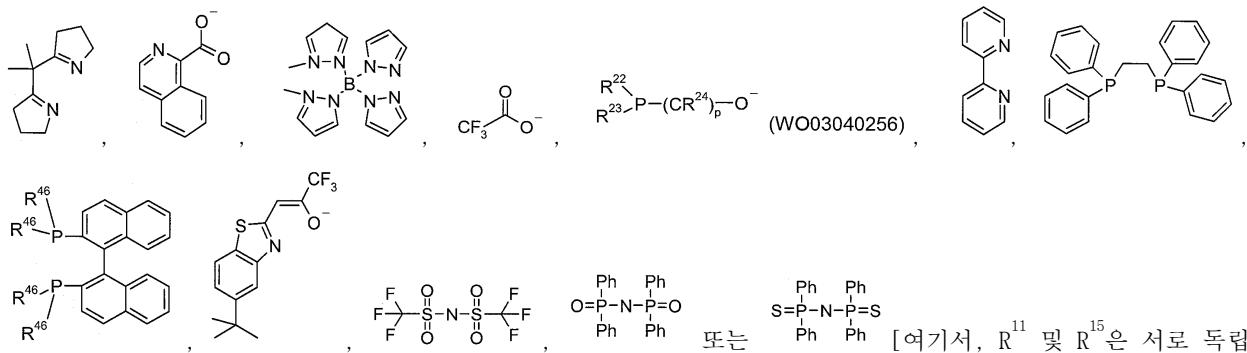
[0039] 바람직하게는, 금속 M^1 은 Fe, Ru, Ni, Co, Ir, Pt, Pd, Rh, Re, Os, Tl, Pb, Bi, In, Sn, Sb, Te, Ag 및 Au로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

[0040] 보다 바람직하게는, 금속은 Ir, Rh 및 Re과 Pt 및 Pd로부터 선택되며, Ir이 가장 바람직하다.

[0041] 리간드는 바람직하게는 1가 음이온 두자리 리간드이다. 일반적으로 상기한 리간드는 배위 원자로서 N, O, P 또는 S를 갖고 이리듐에 배위될 때 5원 또는 6원 환을 형성한다. 적합한 배위 그룹은 아미노, 이미노, 아미도, 알콕사이드, 카복실레이트, 포스피노, 티올레이트 등을 포함한다. 상기한 리간드에 대한 적합한 모 화합물의 예로는 β -디카보닐(β -에놀레이트 리간드) 및 이의 N 및 S 동족체; 아미노 카복실산(아미노카복실레이트 리간드); 피리딘 카복실산(이미노카복실레이트 리간드); 살리실산 유도체(살리실레이트 리간드); 하이드록시퀴놀린(하이드록시퀴놀리네이트 리간드) 및 이의 S 동족체; 및 디아릴포스피노알칸올(디아릴포스피노알콕사이드 리간드)을 포함한다.

[0042] 두자리 리간드 L^1 또는 L' 의 예로는, 화학식





적으로 수소, C₁-C₈알킬, C₆-C₁₈아릴, C₂-C₁₀헥테로아릴 또는 C₁-C₈페플루오로알킬이고; R¹² 및 R¹⁶은 서로 독립적으로 수소 또는 C₁-C₈알킬이고; R¹³ 및 R¹⁷은 서로 독립적으로 수소, C₁-C₈알킬, C₆-C₁₈아릴, C₂-C₁₀헥테로아릴, C₁-C₈페플루오로알킬 또는 C₁-C₈알콕시이고; R¹⁴는 C₁-C₈알킬, C₆-C₁₀아릴 또는 C₇-C₁₁아르알킬이고; R¹⁸은 C₆-C₁₀아릴이고; R¹⁹는 C₁-C₈알킬이고; R²⁰은 C₁-C₈알킬 또는 C₆-C₁₀아릴이고; R²¹은 수소, C₁-C₈알킬 또는 부분적으로 또는 완전히 플루오르화될 수 있는 C₁-C₈알콕시이고; R²² 및 R²³은 서로 독립적으로 C_n(H+F)_{2n+1} 또는 C₆(H+F)₅이고; R²⁴는 각각의 경우에 동일하거나 상이할 수 있고 H 또는 C_n(H+F)_{2n+1}로부터 선택되고; p는 2 또는 3이며; R⁴⁶은 C₁-C₈알킬, C₆-C₁₈아릴, 또는 C₁-C₈알킬로 치환된 C₆-C₁₈아릴이다]이 있다.

[0043] 화학식 R²²-P-(CR²⁴)_p-O⁻의 적합한 포스피노 알콕사이드 리간드(국제 공개공보 제03040256호)의 예로는 3-(디페닐포스피노)-1-옥시프로판[dppO], 1,1-비스(트리플루오로메틸)-2-(디페닐포스피노)-에톡사이드[tfmdpeO]가 있다.

[0044] 리간드 L이 유도되는 화학식 R¹¹-C(=O)-CH(R¹²)-C(=O)-R¹³의 특히 적합한 화합물 HL의 예로는 (2,4-펜탄디오네이트

[acac]), (2,2,6,6-테트라메틸-3,5-헵탄디오네이트

[TMH]), (1,3-디페닐-1,3-프로판디오네이트[DI]),

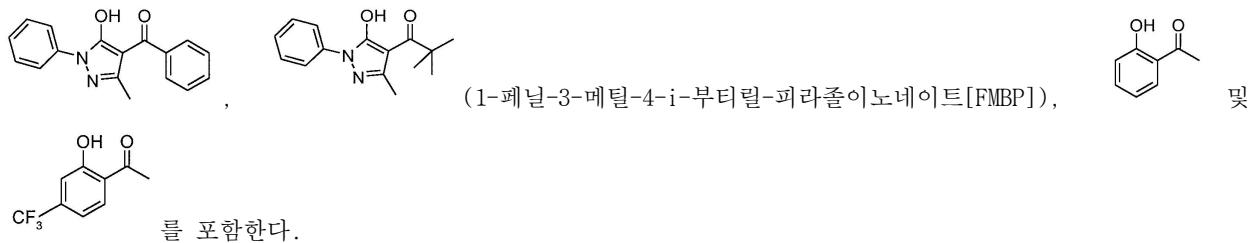
(4,4,4-트리플루오로-1-(2-티에닐)-1,3-부탄디오네이트[TTFA]),

(7,7-디메틸-1,1,1,2,2,3,3-헵타플루오로-4,6-옥탄디오네이트[FOD]),

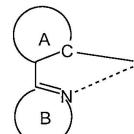
(1,1,1,3,5,5-헵타플루오로-2,4-펜탄디오네이트[F7acac]),
오로-2,4-펜탄디오네이트[F6acac]),

(1,1,1,5,5,5-헥사플루

[0045] (1,1,1,5,5,5-헥사플루



[0046] 하이드록시퀴놀린 모 화합물 HL은 부분적으로 또는 완전히 플루오르화될 수 있는 알킬 또는 알콕시 그룹과 같은 그룹으로 치환될 수 있다. 일반적으로, 상기한 화합물은 시판중이다. 적합한 하이드록시퀴놀리네이트 리간드 L의 예로는 8-하이드록시퀴놀리네이트[8hq], 2-메틸-8-하이드록시퀴놀리네이트[M-8hq], 10-하이드록시벤조퀴놀리네이트[10-hbq]를 포함한다.

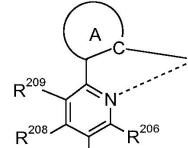
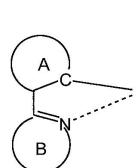


[0047] 본 발명의 추가의 양태에 있어서, 두자리 리간드, L¹ 또는 L'은 화학식

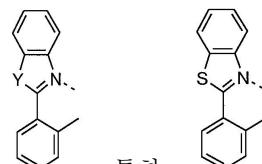


의 환 A는 헤테로원자를 임의로 함유할 수 있는 임의로 치환된 아릴 그룹이고; 화학식
의 환 B는 임의로 헤테로원자를 추가로 함유할 수 있는 임의로 치환된 질소 함유 아릴 그룹이거나; 환 A는 환 A에 결합된 환 B와 함께 환을 형성할 수 있다)이다.

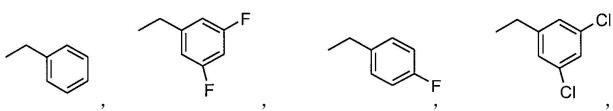
[0048] 바람직한 환 A는 페닐 그룹, 치환된 페닐 그룹, 나프틸 그룹, 치환된 나프틸 그룹, 푸릴 그룹, 치환된 푸릴 그룹, 벤조푸릴 그룹, 치환된 벤조푸릴 그룹, 티에닐 그룹, 치환된 티에닐 그룹, 벤조티에닐 그룹, 치환된 벤조티에닐 그룹 등을 포함한다. 치환된 페닐 그룹, 치환된 나프틸 그룹, 치환된 푸릴 그룹, 치환된 벤조푸릴 그룹, 치환된 티에닐 그룹 및 치환된 벤조티에닐 그룹에서 치환체는 C₁-C₂₄알킬 그룹, C₂-C₂₄알케닐 그룹, C₂-C₂₄알키닐 그룹, 아릴 그룹, 헤테로아릴 그룹, C₁-C₂₄알콕시 그룹, C₁-C₂₄알킬티오 그룹, 시아노 그룹, C₂-C₂₄아실 그룹, C₁-C₂₄알킬옥시카보닐 그룹, 니트로 그룹, 할로겐 원자, 알킬렌디옥시 그룹 등, 예를 들면, C₁-C₂₄할로알킬을 포함한다.



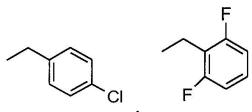
[0049] 상기한 양태에서, 화학식
의 두자리 리간드는 바람직하게는 화학식
의 그룹(여기서, R²⁰⁶, R²⁰⁷, R²⁰⁸ 및 R²⁰⁹는 서로 독립적으로 수소, C₁-C₂₄알킬, C₂-C₂₄알케닐, C₂-C₂₄알키닐, 아릴, 헤테로아릴, C₁-C₂₄알콕시, C₁-C₂₄알킬티오, 시아노, 아실, 알킬옥시카보닐, 니트로 그룹 또는 할로겐 원자이고; 환 A는 임의로 치환된 아릴 또는 헤테로아릴 그룹이거나; 환 A는 환 A에 결합된 피리딜 그룹과 함께 환을 형성할 수 있고; R²⁰⁶, R²⁰⁷, R²⁰⁸ 및 R²⁰⁹인 알킬 그룹, 알케닐 그룹, 알키닐 그룹, 아릴 그룹, 헤테로아릴 그룹, 알콕시 그룹, 알킬티오 그룹, 아실 그룹 및 알킬옥시카보닐 그룹은 치환될 수 있다)이다.



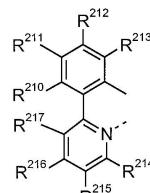
[0050] 두자리 리간드 L¹, L' 또는 L"의 바람직한 부류의 예로는 화학식
의 화합물[여기서, Y는 S, O, NR²⁰⁰이고; R²⁰⁰은 수소, 시아노, C₁-C₄알킬, C₂-C₄알케닐, 임의로 치환된 C₆-C₁₀아릴, 특히 페닐, -(CH₂)_r-



Ar(여기서, Ar은 임의로 치환된 C_6 - C_{10} 아릴, 특히

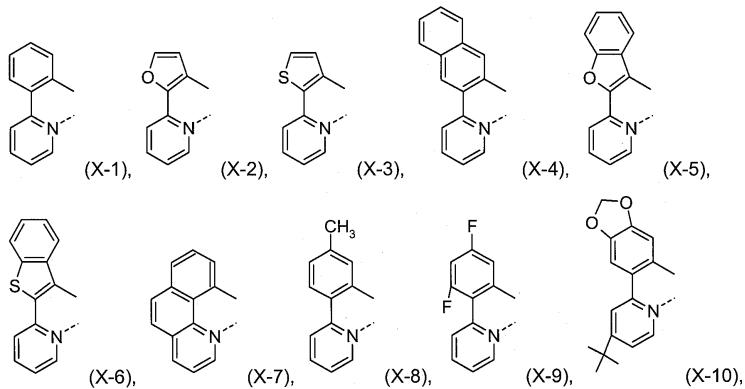


, 그룹 $-(CH_2)_rX^{20}$ 이고; r' 은 1 내지 5의 정수이고; X^{20} 은 할로겐, 특히 F 또는 Cl; 하이드록시, 시아노, $-O-C_1-C_4$ 알킬, 디(C_1-C_4 알킬)아미노, 아미노 또는 시아노; 그룹 $-(CH_2)_rOC(O)(CH_2)_{r''}CH_3$ 이고; r 은 1 또는 2이고; r'' 은 0 또는 1이다),  $-NH-Ph$, $-C(O)CH_3$, $-CH_2-O-(CH_2)_2-Si(CH_3)_3$, 또는 이다]이 있다.

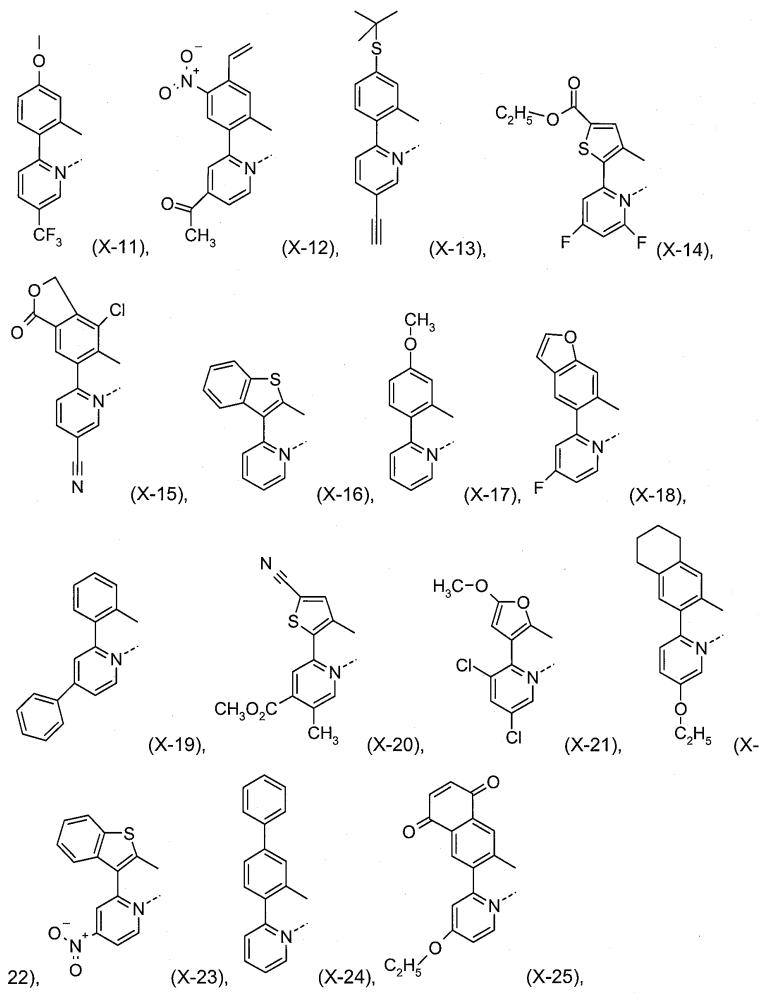


[0051] 두자리 리간드 L^1 , L' 또는 L'' 의 또 다른 바람직한 부류는 화학식 R^{214} 의 화합물[여기서, R^{214} 는 수소, 할로겐, 특히 F 또는 Cl; 니트로, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 페플루오로알킬, C_1-C_4 알콕시 또는 임의로 치환된 C_6 - C_{10} 아릴, 특히 폐닐이고; R^{215} 는 수소, 할로겐, 특히 F 또는 Cl; C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 페플루오로알킬, 임의로 치환된 C_6 - C_{10} 아릴, 특히 폐닐 또는 임의로 치환된 C_6 - C_{10} 페플루오로아릴, 특히 C_6F_5 이고; R^{216} 은 수소, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 페플루오로알킬, 임의로 치환된 C_6 - C_{10} 아릴, 특히 폐닐이고; R^{217} 은 수소, 할로겐, 특히 F 또는 Cl; 니트로, 시아노, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 페플루오로알킬, C_1-C_4 알콕시 또는 임의로 치환된 C_6 - C_{10} 아릴, 특히 폐닐이고; R^{218} 은 수소이고; R^{219} 은 수소, 할로겐, 특히 F 또는 Cl; 니트로, 시아노, C_1-C_4 알킬, C_2-C_4 알케닐, C_1-C_4 페플루오로알킬, $-O-C_1-C_4$ 페플루오로알킬, 트리(C_1-C_4 알킬)실라닐, 특히 트리(메틸)실라닐, 임의로 치환된 C_6 - C_{10} 아릴, 특히 폐닐 또는 임의로 치환된 C_6 - C_{10} 페플루오로아릴, 특히 C_6F_5 이고; R^{220} 은 수소, 할로겐, 특히 F 또는 Cl; 니트로, 하이드록시, 머캅토, 아미노, C_1-C_4 알킬, C_2-C_4 알케닐, C_1-C_4 페플루오로알킬, C_1-C_4 알콕시, $-O-C_1-C_4$ 페플루오로알킬, $-S-C_1-C_4$ 알킬, 그룹 $(CH_2)_rX^{20}$ (여기서, r 은 1 또는 2이고; X^{20} 은 할로겐, 특히 F 또는 Cl; 하이드록시, 시아노, $-O-C_1-C_4$ 알킬, 디(C_1-C_4 알킬)아미노, $-CO_2X^{21}$ 이고, X^{21} 은 H 또는 C_1-C_4 알킬; $-CH=CHCO_2X^{22}$ 이고; X^{22} 은 C_1-C_4 알킬; $-CH(O)$, $-SO_2X^{23}$, $-SOX^{23}$, $-NC(O)X^{23}$, $-NSO_2X^{23}$, $-NHX^{23}$, $-N(X^{23})_2$ 이고; X^{23} 은 C_1-C_4 알킬; 트리(C_1-C_4 알킬)실록산일, 임의로 치환된 $-O-C_6-C_{10}$ 아릴, 특히 폐녹시, 사이클로헥실, 임의로 치환된 C_6-C_{10} 아릴, 특히 폐닐 또는 임의로 치환된 C_6-C_{10} 페플루오로아릴, 특히 C_6F_5 이다)이고; R^{221} 은 수소, 니트로, 시아노, C_1-C_4 알킬, C_2-C_4 알케닐, C_1-C_4 페플루오로알킬, $-O-C_1-C_4$ 페플루오로알킬, 트리(C_1-C_4 알킬)실라닐 또는 임의로 치환된 C_6-C_{10} 아릴, 특히 폐닐이다]이 있다.

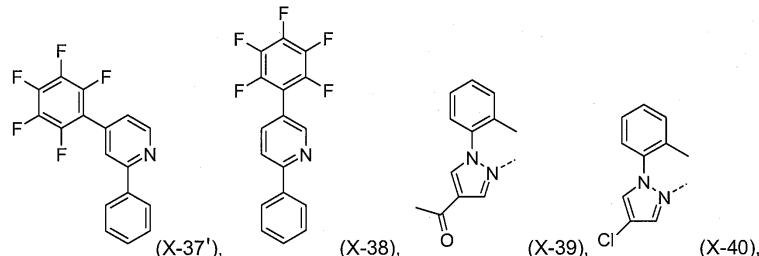
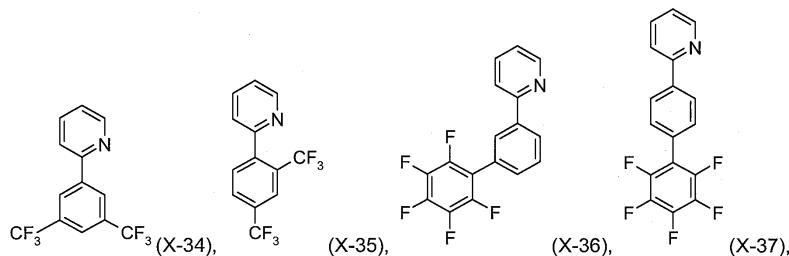
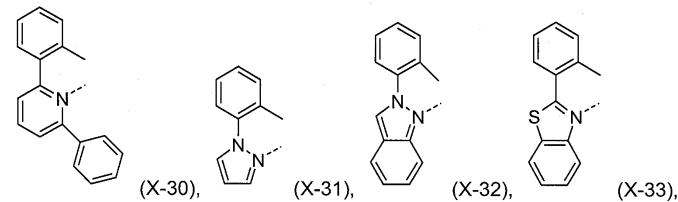
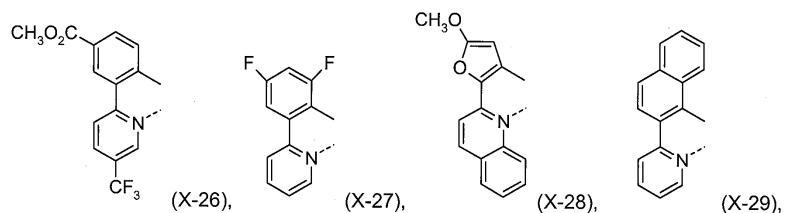
[0052] 두자리 리간드, L^1 , L' 또는 L'' 의 특정한 예로는 다음 화합물(X-1) 내지 (X-47)이 있다.



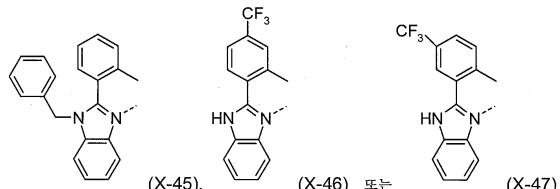
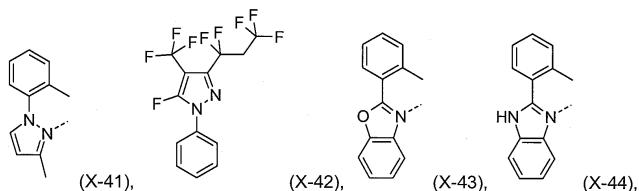
[0053]



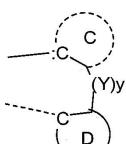
[0054]



[0055]



[0056]



[여기서, 화학식



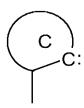
의 그룹 C는 헤



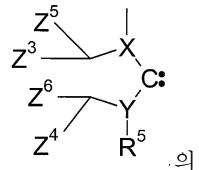
의 그룹 D는 헤

[0057] 두자리 리간드인 L^1 , L' 의 또 다른 바람직한 부류는, 화학식

테로원자를 임의로 함유할 수 있는, 비환식 카벤 또는 사이클릭 카벤(환 C)이고; 화학식
로원자를 임의로 함유할 수 있는, 임의로 치환된 아릴 그룹이고; Y는 $-C(=O)-$ 또는 $-C(X^1)_2-$ (여기서, X^1 은 수소
또는 C_{1-4} 알킬, 특히 수소이다)이며; y는 0, 1, 특히 0이다]으로 나타낸다.



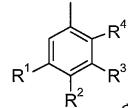
[0058] 화학식 의 그룹이 비활식 친핵성 카벤인 경우, 이는 바람직하게는 화학식



그룹[여기서, $X = Y = N$, B 또는 P 이다], 화학식의 그룹[여기서, X^1 은 N 또는 P 이고; Y^1 은 S 또는 O , $>SiXX^3$ 또는 $>CZ^5Z^3$ 이고; X^2 및 X^3 은 서로 독립적으로 C_1-C_4 알킬이며; R^5 , Z^3 , Z^4 , Z^5 및 Z^6 은 아래에 정의한 바와 같다]이다.



[0059] y 는 0 또는 1, 특히 0이다. 화학식의 환 D 는 바람직하게는 화학식



의 그룹[여기서, R^1 내지

R^4 는 치환체이고, 함께 환을 형성할 수 있다]이다.

[0060] R^1 , R^2 , R^3 및 R^4 는 서로 독립적으로 수소, 할로겐, 특히 F 또는 Cl ; 니트로, 시아노, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 페플루오로알킬 또는 C_1-C_4 알콕시, $-S-C_1-C_4$ 알킬, $-O-C_1-C_4$ 페플루오로알킬, $-SO_2X^{22}$, $-CO_2H$, $-CO_2X^{22}$ (여기서, X^{22} 은 C_1-C_4 알킬이다); $C_6H_4CF_3$, 사이클로헥실, 임의로 치환된 C_6-C_{10} 아릴, 특히 페닐, 임의로 치환된 $-O-CH_2-C_6-C_{10}$ 아릴, 특히 벤질옥시, 또는 임의로 치환된 $-O-C_6-C_{10}$ 아릴, 특히 페녹시이다.

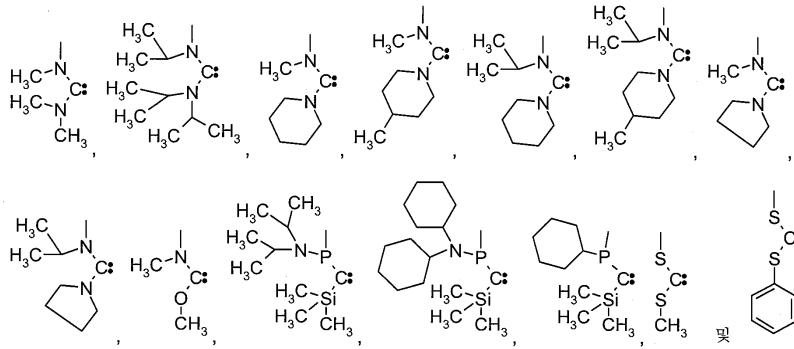
[0061] R^1 은 바람직하게는 수소, 할로겐, 특히 F 또는 Cl ; 니트로, 시아노, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 페플루오로알킬 또는 C_1-C_4 알콕시이다.

[0062] R^2 는 바람직하게는 수소, 니트로, 시아노, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 페플루오로알킬, C_1-C_4 알콕시, $-S-C_1-C_4$ 알킬, $-O-C_1-C_4$ 페플루오로알킬, $-SO_2X^{22}$, $-CO_2X^{22}$ (여기서, X^{22} 은 C_1-C_4 알킬; $C_6H_4CF_3$, 또는 임의로 치환된 $-O-C_6-C_{10}$ 아릴, 특히 페녹시이다)이다.

[0063] R^3 은 바람직하게는 수소, 니트로, 시아노, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 페플루오로알킬, C_1-C_4 알콕시, $-S-C_1-C_4$ 알킬 또는 $-O-C_1-C_4$ 페플루오로알킬이다.

[0064] R^4 는 바람직하게는 수소이다.

[0065] 위에서 지정된 그룹에 대한 가능성을 명시한 예는 다음과 같다:

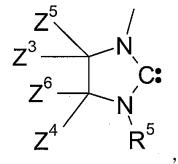


[0066]

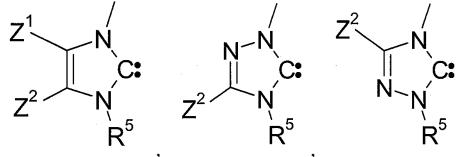


화학식

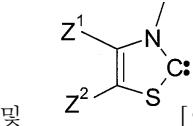
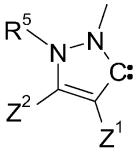
(환 C)의 사이클릭 카벤이 비환식 카벤보다 바람직하다. 환 C의 예로는, 화학식



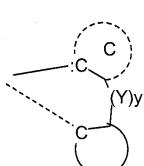
특히



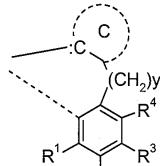
또는

[여기서, R⁵는 치환체, 특히

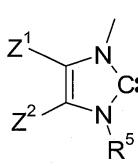
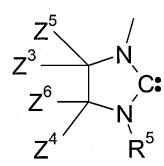
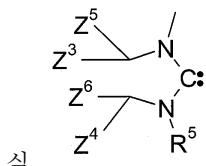
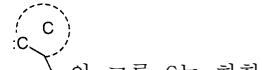
수소; C₁-C₂₄알킬, C₂-C₂₄알케닐, C₂-C₂₄알카닐, C₂-C₂₄알콕시카보닐, 아릴, C₁-C₂₄카복실레이트, C₁-C₂₄알콕시, C₂-C₂₄알케닐옥시, C₂-C₂₄알카닐옥시 또는 아릴옥시이고, 이는 C₁-C₈알킬, 할로겐, C₁-C₈알콕시 또는 페닐 그룹으로 임의로 치환될 수 있고, 이는 할로겐, C₁-C₈알킬 또는 C₁-C₈알콕시로 치환될 수 있고; Z¹, Z², Z³, Z⁴, Z⁵ 및 Z⁶은 서로 독립적으로 수소, C₁-C₂₄알킬, C₂-C₂₄알케닐, C₂-C₂₄알카닐, C₂-C₂₄알콕시카보닐, 아릴, C₁-C₂₄카복실레이트, C₁-C₂₄알콕시, C₂-C₂₄알케닐옥시, C₂-C₂₄알카닐옥시 및 아릴옥시로 이루어진 그룹(여기서, Z¹, Z², Z³ 및 Z⁴ 각각은 C₁-C₈알킬, 할로겐, C₁-C₈알콕시 또는 페닐 그룹으로 임의로 치환되고, 이는 할로겐, C₁-C₈알킬 또는 C₁-C₈알콕시로 임의로 치환될 수 있거나, Z¹ 및 Z²는 가능한 경우, 방향족 또는 헤테로방향족 환을 형성하고/하거나, Z³, Z⁴, Z⁵ 및 Z⁶은 가능한 경우, 알킬 또는 헤테로알킬 환을 형성한다)으로부터 선택된다]이 있다.



상기 양태에서, 화학식

의 리간드(L¹)는 바람직하게는 화학식의 그룹[여기서, R¹

내지 R⁴는 치환체이고, 함께 환을 형성할 수 있고; y는 0 또는 1, 특히 0이고, 화학식

또는 Z²-C⁶의 그룹(친핵성 카벤){여기서, R⁵는 치환체, 특히 수소; C₁-C₂₄알킬, C₂-C₂₄알케닐, C₂-C₂₄알카닐, C₂-C₂₄알콕시카보닐, 아릴, C₁-C₂₄카복실레이트, C₁-C₂₄알콕시, C₂-C₂₄알케닐옥시, C₂-C₂₄알카닐옥시 또는 아릴옥시이고, 이는 C₁-C₈알킬, 할로겐, C₁-C₈알콕시 또는 페닐 그룹으로 임의로 치환될 수 있고, 이는 할로겐, C₁-C₈알킬 또는 C₁-C₈알콕시로 임의로 치환될 수 있고; Z¹, Z², Z³, Z⁴, Z⁵ 및 Z⁶은 서로 독립적으로 수소, C₁-C₂₄알킬, C₂-C₂₄알케닐, C₂-C₂₄알카닐, C₂-C₂₄알콕시카보닐, 아릴, C₁-C₂₄카복실레이트, C₁-C₂₄알콕시, C₂-C₂₄알케닐옥시, C₂-C₂₄알카닐옥시 또는 아릴옥시로 이루어진 그룹(여기서, Z¹, Z², Z³ 및 Z⁴ 각각은 C₁-C₈알킬, 할로겐, C₁-C₈알콕시 또는 페닐 그룹으로 임의로 치환되고, 이는 할로겐, C₁-C₈알킬 또는 C₁-C₈알콕시로 임의로 치환될 수 있거나; Z³, Z⁴, Z⁵ 및 Z⁶은 가능한 경우, 알킬 또는 헤테로알킬 환을 형성한다)으로부터 선택된다}이다.

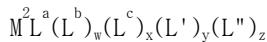
그룹 C는 화학식

내지 R⁴는 치환체이고, 함께 환을 형성할 수 있고; y는 0 또는 1, 특히 0이고, 화학식

- 30 -

[0069] 본 발명의 바람직한 양태에서, 상기 화합물은 화학식 II로 나타낸다.

화학식 II



[0071] 위의 화학식 II에서,

[0072] w 는 0 또는 1이고,

[0073] x 는 0 또는 1이고,

[0074] y 는 0, 1 또는 2이고,

[0075] z 는 0 또는 1이고,

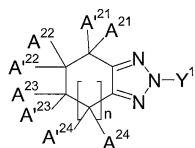
[0076] M^2 는 Pt, Pd, Rh, Re 또는 Ir이고,

[0077] L' 은 두자리 리간드 또는 한자리 리간드이며, 단 L' 이 한자리 리간드이면 $y+z$ 는 2이고, L' 이 두자리 리간드이면 z 는 0이고,

[0078] L'' 은 한자리 리간드이고,

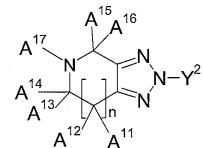
[0079] L^a , L^b 및 L^c 는 서로 동일하거나 상이하고, L^a , L^b 및 L^c 는 각각 화학식 IIIa, 화학식 IIIb 또는 IV의 구조를 갖는다.

화학식 IIIa



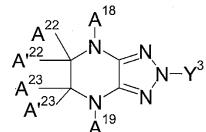
[0080]

화학식 IIIb



[0081]

화학식 IV



[0082]

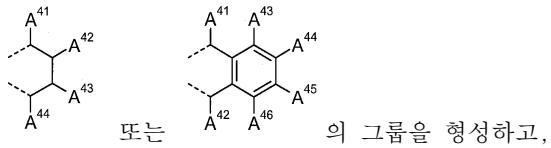
[0083] 위의 화학식 IIIa, IIIb 및 IV에서,

[0084] n 은 0, 1 또는 2, 특히 1이고,

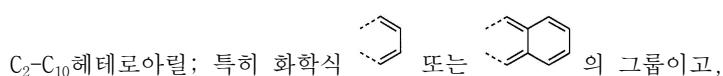
[0085] A^{12} , A^{14} , A^{16} , A^{21} , A^{22} , A^{23} 및 A^{24} 는 서로 독립적으로 수소, CN, 할로겐; G에 의해 임의로 치환된, C_1-C_{24} 알킬, C_1-C_{24} 알콕시, C_1-C_{24} 알킬티오, C_1-C_{24} 페플루오로알킬, C_6-C_{18} 아릴; $-NR^{25}R^{26}$, $-CONR^{25}R^{26}$ 또는 $-COOR^{27}$; 또는 G에 의해 임의로 치환된 C_2-C_{10} 페로아릴; 또는 각각 G에 의해 임의로 치환된, C_5-C_{12} 사이클로알킬, C_5-C_{12} 사이클로알콕시,

C_5-C_{12} 사이클로알킬티오; 특히 화학식  또는 의 그룹이거나,

2개의 일접한 라디칼 A^{12} 와 A^{14} , A^{14} 와 A^{17} , A^{17} 과 A^{16} , A^{21} 과 A^{22} , A^{22} 과 A^{23} , A^{23} 과 A^{24} , A^{18} 과 A^{22} , 또는 A^{23} 과 A^{19} 는 일



A^{41} , A^{42} , A^{43} , A^{44} , A^{45} , A^{46} 및 A^{47} 은 서로 독립적으로 H, 할로겐, CN; G로 임의로 치환될 수 있는 C_1-C_{24} 알킬, C_1-C_{24} 페플루오로알킬, C_1-C_{24} 알콕시, C_1-C_{24} 알킬티오, C_6-C_{18} 아릴; $-NR^{25}R^{26}$, $-CONR^{25}R^{26}$, $-COOR^{27}$ 또는



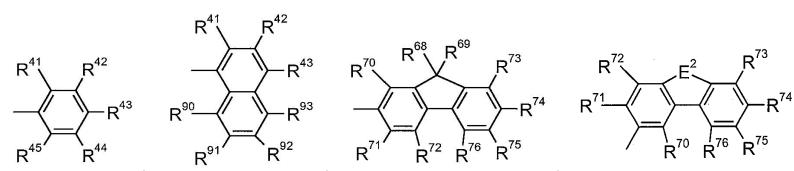
[0088] $A^{11}, A^{13}, A^{15}, A^{21}, A'^{22}, A'^{23}$ 및 A'^{24} 는 각각 돌립적으로 수소 또는 C_1-C_{24} 로 킬이거나.

[0089] 2개의 인접한 라디칼 A^{11} 과 A^{12} , A^{13} 과 A^{14} , A^{15} 와 A^{16} , A^{21} 과 A^{21} , A^{22} 과 A^{22} , A^{23} 과 A^{23} 또는 A^{24} 와 A^{24} 는 동일한 탄소원자에 결합하여, 함께 $=O$, $=NR^{25}$, $=N-OR^{25}$ 또는 $=N-OH$ 를 형성하고,

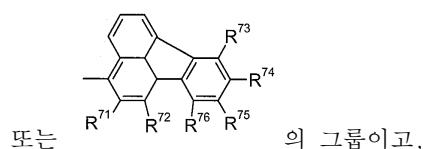
[0090] E^1 은 0, S 또는 NR^{25} 이 고,

[0091] R^{25} 및 R^{26} 은 서로 독립적으로 C_6-C_{18} 아릴, C_7-C_{18} 아르알킬 또는 C_1-C_{24} 알킬이고,

[0092] R^{27} 은 C_1-C_{24} 알킬, C_6-C_{18} օ}릴 또는 C_7-C_{18} օ}르알킬이고,



[0093] Y^1 , Y^2 및 Y^3 을 서로 돌립적으로 화학식

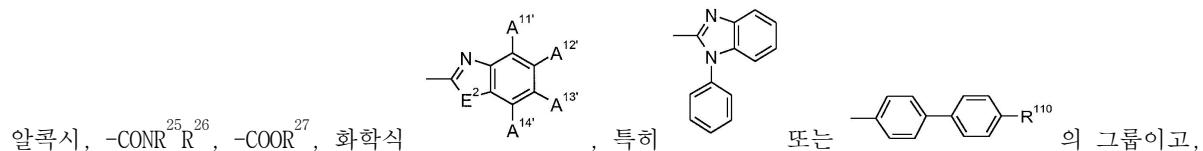


[0094] R^{41} 은 M^2 에 대한 결합이고.

[0095] \mathbb{R}^{71} 은 \mathbb{M}^2 에 대한 결합이고.

[0096] R^{42} 는 수소 또는 C_1-C_{24} 알킬, CN, F로 치환된 C_1-C_{24} 알킬, 할로젠, 특히 F, C_6-C_{18} 아릴, C_1-C_{12} 알킬로 치환된 C_6-C_{18} 아릴 또는 C_1-C_8 알콕시이고,

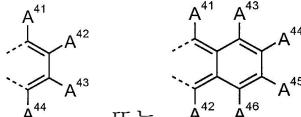
[0097] R^{43} 은 수소, CN, 할로겐, 특히 F, F로 치환된 C_1-C_{24} 알킬, C_6-C_{18} 아릴, C_1-C_{12} 알킬로 치환된 C_6-C_{18} 아릴, 또는 C_1-C_8



[0098] E^2 는 $-S-$, $-O-$ 또는 $-NR^{25'}$ -이고,

[0099] 여기서, $R^{25'}$ 은 C_1-C_{24} 알킬 또는 C_6-C_{10} 아릴이고,

[0100] R^{110} 은 H , CN , C_1-C_{24} 알킬, C_1-C_{24} 알콕시, C_1-C_{24} 알킬티오, $-NR^{25}R^{26}$, $-CONR^{25}R^{26}$ 또는 $-COOR^{27}$ 이거나,



[0101] R^{42} 및 R^{43} 은 화학식 또는 의 그룹이고,

[0102] A^{41} , A^{42} , A^{43} , A^{44} , A^{45} , A^{46} 및 A^{47} 은 서로 독립적으로 H , 할로겐, CN , G 로 임의로 치환될 수 있는 C_1-C_{24} 알킬, C_1-C_{24} 퍼플루오로알킬, C_1-C_{24} 알콕시, C_1-C_{24} 알킬티오, C_6-C_{18} 아릴, $-NR^{25}R^{26}$, $-CONR^{25}R^{26}$ 또는 $-COOR^{27}$ 또는 C_2-C_{10} 헤테로아릴; 특히 화학식 또는 의 그룹이고,

[0103] R^{44} 는 수소, CN 또는 C_1-C_{24} 알킬, F 로 치환된 C_1-C_{24} 알킬, 할로겐, 특히 F , C_6-C_{18} 아릴, C_1-C_{12} 알킬로 치환된 C_6-C_{18} 아릴 또는 C_1-C_8 알콕시이고,

[0104] R^{45} 는 수소, CN 또는 C_1-C_{24} 알킬, F 로 치환된 C_1-C_{24} 알킬, 할로겐, 특히 F , C_6-C_{18} 아릴, C_1-C_{12} 알킬로 치환된 C_6-C_{18} 아릴 또는 C_1-C_8 알콕시이고,

[0105] $A^{11'}$, $A^{12'}$, $A^{13'}$ 및 $A^{14'}$ 은 서로 독립적으로 H , 할로겐, CN , C_1-C_{24} 알킬, C_1-C_{24} 알콕시, C_1-C_{24} 알킬티오, $-NR^{25}R^{26}$, $-CONR^{25}R^{26}$ 또는 $-COOR^{27}$ 이고,

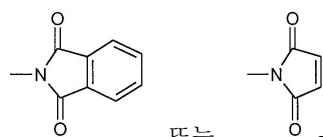
[0106] R^{68} 및 R^{69} 는 서로 독립적으로 1개 또는 2개의 산소원자로 차단될 수 있는 C_1-C_{24} 알킬, 특히 C_4-C_{12} 알킬, 특히 헥실, 헵틸, 2-에틸헥실 및 옥틸이고,

[0107] R^{70} , R^{72} , R^{73} , R^{74} , R^{75} , R^{76} , R^{90} , R^{91} , R^{92} 및 R^{93} 은 서로 독립적으로 H , 할로겐, 특히 F , CN , C_1-C_{24} 알킬, C_6-C_{10} 아릴, C_1-C_{24} 알콕시, C_1-C_{24} 알킬티오, $-NR^{25}R^{26}$, $-CONR^{25}R^{26}$ 또는 $-COOR^{27}$ 이고,

[0108] 여기서, R^{25} , R^{26} 및 R^{27} 은 위에서 정의한 바와 같고,

[0109] G 는 C_1-C_{18} 알킬, $-OR^{305}$, $-SR^{305}$, $-NR^{305}R^{306}$, $-CONR^{305}R^{306}$ 또는 $-CN$ 이고,

[0110] 여기서, R^{305} 및 R^{306} 은 서로 독립적으로 C_6-C_{18} 아릴; C_1-C_{18} 알킬 또는 C_1-C_{18} 알콕시로 치환된 C_6-C_{18} 아릴; C_1-C_{18} 알킬 또는 $-O-$ 로 차단된 C_1-C_{18} 알킬이거나,



[0111] 여기서, R^{305} 와 R^{306} 은 함께 5원 또는 6원 환, 특히 또는 화학식 을 형성한다.

[0112] 중심 금속 원자(예: M^1 , M^2 또는 M^3 ; 특히 Ir)가 착체에 존재하는 리간드에 의해 6배위된 화합물, 즉

[0113] 1개의 두자리 리간드와 4개의 한자리 리간드를 함유하는 착체,

[0114] 2개의 두자리 리간드와 2개의 한자리 리간드를 함유하는 착체 또는

[0115] 3개의 두자리 리간드를 함유하고 한자리 리간드를 함유하지 않는 착체가 바람직하다.

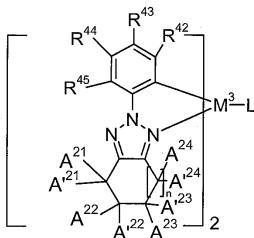
[0116] 또한, 중심 금속 원자(예: M^1 , M^2 또는 M^3 ; 특히 Pd, Pt)가 착체에 존재하는 리간드에 의해 6배위된 화합물, 즉

[0117] 1개의 두자리 리간드와 2개의 한자리 리간드를 함유하는 착체 또는

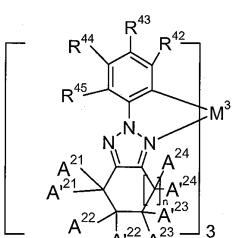
[0118] 2개의 두자리 리간드를 함유하고 한자리 리간드를 함유하지 않는 착체가 바람직하다.

[0119] 상기 양태에서, $w = 1$, $x = 1$, $y = 0$, 및 $z = 0$ 인 화합물, 그리고 $w = 1$, $x = 0$, $y = 1$ 및 $z = 0$ 인 화합물, 또는 화학식 V_a, V_b, V_c, V_d, V_e, V_f 또는 V_g의 구조를 갖는 화합물이 보다 바람직하다.

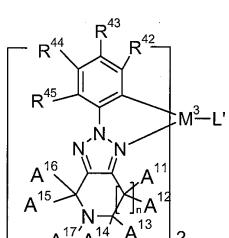
화학식 V_a



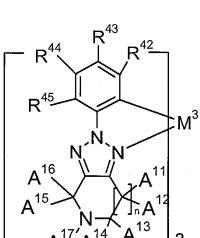
화학식 V_b



화학식 V_c



화학식 V_d



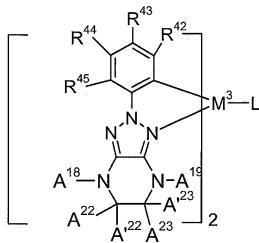
[0120]

[0121]

[0122]

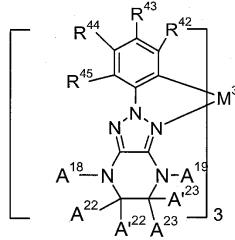
[0123]

화학식 Ve



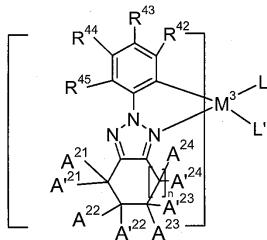
[0124]

화학식 Vf



[0125]

화학식 Vg



[0126]

[0127] 위의 화학식 Va 내지 Vg에서,

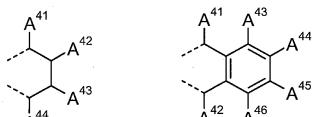
[0128] M^3 은 Rh 또는 Re, 특히 Ir이고,

[0129] n은 0, 1 또는 2, 특히 1이고,

[0130] A^{12} , A^{14} , A^{16} , A^{21} , A^{22} , A^{23} 및 A^{24} 는 서로 독립적으로 수소, CN, 할로겐; G에 의해 임의로 치환된 C_1-C_{24} 알킬, C_1-C_{24} 알콕시, C_1-C_{24} 알킬티오, C_1-C_{24} 페플루오로알킬, C_6-C_{18} 아릴; $-NR^{25}R^{26}$, $-CONR^{25}R^{26}$ 또는 $-COOR^{27}$; 또는 G에 의해 임의로 치환된 C_2-C_{10} 헵테로아릴; 또는 각각 G에 의해 임의로 치환된 C_5-C_{12} 사이클로알킬, C_5-C_{12} 사이클로알콕시,

C_5-C_{12} 사이클로알킬티오; 특히 화학식  또는 의 그룹이거나,

[0131] 2개의 인접한 라디칼인 A^{12} 와 A^{14} , A^{14} 와 A^{17} , A^{17} 과 A^{16} , A^{21} 과 A^{22} , A^{22} 과 A^{23} , A^{23} 과 A^{24} , A^{18} 과 A^{22} , 또는 A^{23} 과 A^{19} 는

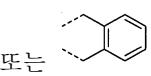


인접한 원자에 결합하여, 함께 화학식

또는

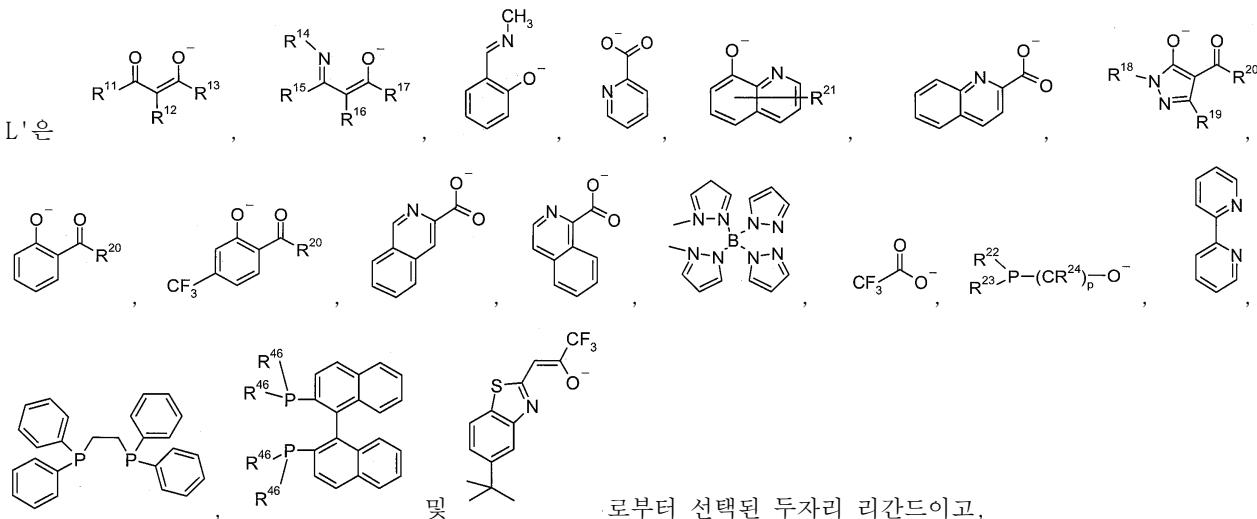
의 그룹을 형성하고,

[0132] A^{41} , A^{42} , A^{43} , A^{44} , A^{45} , A^{46} 및 A^{47} 은 서로 독립적으로 H, 할로겐, CN; G에 의해 임의로 치환될 수 있는 C_1-C_{24} 알킬, C_1-C_{24} 페플루오로알킬, C_1-C_{24} 알콕시, C_1-C_{24} 알킬티오, C_6-C_{18} 아릴; $-NR^{25}R^{26}$, $-CONR^{25}R^{26}$, $-COOR^{27}$ 또는 C_2-C_{10} 헵-

테로아릴; 특히 화학식  또는 의 그룹이고,

[0133] A^{11} , A^{13} , A^{15} , A'^{21} , A'^{22} , A'^{23} 및 A'^{24} 는 각각 독립적으로 수소 또는 C_1-C_{24} 알킬이거나,

[0134] 2개의 인접한 라디칼인 A^{11} 과 A^{12} , A^{13} 과 A^{14} , A^{15} 와 A^{16} , A'^{21} 과 A^{21} , A'^{22} 와 A^{22} , A'^{23} 과 A^{23} , 또는 A'^{24} 와 A^{24} 는 동일한 탄소원자에 결합하여, 함께 $=O$ 또는 $=NR^{25}$ 를 형성하고,



[0136] R^{11} 및 R^{15} 는 서로 독립적으로 수소, C_1-C_8 알킬, C_6-C_{18} 아릴, C_2-C_{10} 테로아릴 또는 C_1-C_8 페플루오로알킬이고,

[0137] R^{12} 및 R^{16} 은 서로 독립적으로 수소 또는 C_1-C_8 알킬이고,

[0138] R^{13} 및 R^{17} 은 서로 독립적으로 수소, C_1-C_8 알킬, C_6-C_{18} 아릴, C_2-C_{10} 테로아릴, C_1-C_8 페플루오로알킬 또는 C_1-C_8 알콕시이고,

[0139] R^{14} 는 C_1-C_8 알킬, C_6-C_{10} 아릴 또는 C_7-C_{11} 아르알킬이고,

[0140] R^{18} 은 C_6-C_{10} 아릴이고,

[0141] R^{19} 는 C_1-C_8 알킬이고,

[0142] R^{20} 은 C_1-C_8 알킬 또는 C_6-C_{10} 아릴이고,

[0143] R^{21} 은 수소, 부분적으로 또는 완전히 불소화될 수 있는, C_1-C_8 알킬 또는 C_1-C_8 알콕시이고,

[0144] R^{22} 및 R^{23} 은 서로 독립적으로 $C_n(H+F)_{2n+1}$ 또는 $C_6(H+F)_5$ 이고,

[0145] R^{24} 는 각각 동일하거나 상이할 수 있으며, H 및 $C_n(H+F)_{2n+1}$ 로부터 선택되고,

[0146] p 는 2 또는 3이고,

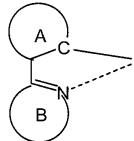
[0147] R^{42} 는 H , F , C_1-C_4 알킬, C_1-C_8 알콕시 또는 C_1-C_4 페플루오로알킬이고,

[0148] R^{43} 은 H , F , C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 페플루오로알킬, C_1-C_8 알콕시 또는 C_6-C_{10} 아릴이고,

[0149] R^{44} 는 H, F, C_1-C_{12} 알킬, C_7-C_{15} 페닐알킬, C_1-C_8 알콕시 또는 C_1-C_4 페플루오로알킬이고,

[0150] R^{45} 는 H, F, C_1-C_4 알킬, C_1-C_8 알콕시 또는 C_1-C_4 페플루오로알킬이고,

[0151] R^{46} 은 C_1-C_8 알킬, C_6-C_{18} 아릴, C_1-C_8 알콕시 또는 C_1-C_8 알킬에 의해 치환된 C_6-C_{18} 아릴이거나,



[0152] 두자리 리간드인 L' 은 화학식 의 리간드(L''), 특히 위에서 기재한 화합물 (X-1) 내지 (X-47)이다.

[0153] 몇 가지 특정한 주요 화합물에서는,

[0154] A^{11} 및 A^{12} 가 독립적으로 수소 또는 C_1-C_4 알킬, 특히 수소이고,

[0155] A^{13} 이 수소이고,

[0156] A^{14} 가 수소이고,

[0157] A^{15} 가 수소이고, A^{16} 이 수소이거나, A^{15} 와 A^{16} 이 함께 옥소를 형성하고,

[0158] A^{17} 이 수소 또는 C_1-C_4 알킬이고,

[0159] A^{18} 및 A^{19} 가 독립적으로 수소 또는 C_1-C_4 알킬이고,

[0160] A^{21} 이 수소, C_1-C_4 알킬, 페닐, 페닐아미노이고, A^{21} 이 수소 또는 C_1-C_4 알킬이거나, A^{21} 과 A^{21} 이 함께 옥소, 하이드록시아미노 또는 C_1-C_4 알콕시아미노를 형성하고,

[0161] A^{22} 가 수소, C_1-C_4 알킬, 페닐아미노 또는 C_6-C_{10} 아릴이고,

[0162] A^{22} 가 수소이고,

[0163] A^{23} 이 수소, C_1-C_4 알킬, 페닐아미노 또는 C_6-C_{10} 아릴이고,

[0164] A^{23} 이 수소 또는 C_1-C_4 알킬이고,

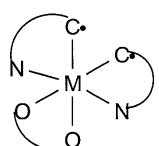
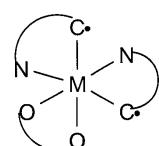
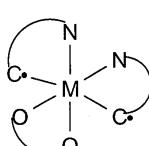
[0165] A^{24} 및 A^{24} 가 각각 수소이고,

[0166] R^{42} 가 H, F, C_1-C_4 알킬, C_1-C_8 알콕시 또는 C_1-C_4 페플루오로알킬이고,

[0167] R^{43} 이 H, F, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 페플루오로알킬, C_1-C_8 알콕시 또는 C_6-C_{10} 아릴이고,

[0168] R^{44} 가 H, F, C_1-C_{12} 알킬, C_7-C_{15} 페닐알킬, C_1-C_8 알콕시 또는 C_1-C_4 페플루오로알킬이고,

[0169] R^{45} 가 H, F, C_1-C_4 알킬, C_1-C_8 알콕시 또는 C_1-C_4 페플루오로알킬이다.



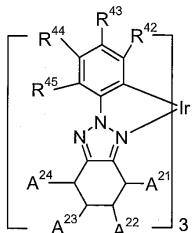
[0170] 화학식 $(L^a)_2ML'$ 의 금속 치환의 경우, 화학식

의 3가지

이성체(여기서, La는 $\text{C}\cdot\text{N}$ 이고, L'은 OO 이다)가 존재할 수 있다.

[0171] 일부 경우, 이성체의 혼합물이 수득된다. 종종 혼합물은 개별적인 이성체를 분리시키지 않고 사용될 수 있다.

[0172] 현재 가장 바람직한 화합물중 일부를 아래에 나타내며, 기호는 위에서 정의한 바와 같거나 특히 기재된 바와 같다.

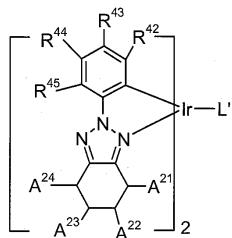


화합물	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ²⁴	A ²³	A ²²	A ²¹
A-1	H	H	H	H	H	H	H	H
A-2	F	H	H	H	H	H	H	H
A-3	H	H	F	H	H	H	H	H
A-4	F	H	F	H	H	H	H	H
A-5	F	H	H	F	H	H	H	H
A-6	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
A-7	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
A-8	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
A-9	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
A-10	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
A-11	H	H	Ph	H	H	H	H	H
A-12	H	H	OMe	H	H	H	H	H
A-13	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
A-14	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
A-15	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
A-16	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H
A-17	H	²⁾	H	H	H	H	H	H

¹⁾ o이성체의 혼합물.

²⁾ 2,4,4-트리메틸펜트-2-일.

[0173]



제작번호	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ²⁴	A ²³	A ²²	A ²¹
B-1	A ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
B-2	A ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
B-3	A ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
B-4	A ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
B-5	A ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
B-6	A ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
B-7	A ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
B-8	A ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
B-9	A ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
B-10	A ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-11	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
B-12	A ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
B-13	A ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
B-14	A ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-15	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
B-16	A ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
B-17	B ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
B-18	B ²⁾	F	F	H	H	H	H	H	H
B-19	B ²⁾	H	H	H	F	H	H	H	H
B-20	B ²⁾	F	F	H	F	H	H	H	H

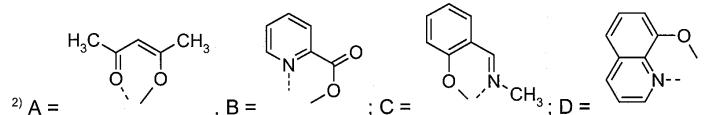
[0174]

B-21	<u>B²⁾</u>	F	F	H	H	F	H	H	H
B-22	B ²⁾	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
B-23	B ²⁾	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
B-24	B ²⁾	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H	H
B-25	<u>B²⁾</u>	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
B-26	B ²⁾	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H
B-27	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H	H
B-28	<u>B²⁾</u>	H	H	H	OMe	H	H	H	H
B-29	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H
B-30	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
B-31	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
B-32	B ²⁾	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H
B-33	<u>C²⁾</u>	H	H	H	H	H	H	H	H
B-34	C ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
B-35	C ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
B-36	C ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
B-37	<u>C²⁾</u>	F	H	H	F	H	H	H	H
B-38	C ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
B-39	C ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
B-40	C ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
B-41	<u>C²⁾</u>	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
B-42	C ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-43	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
B-44	<u>C²⁾</u>	H	H	OMe	H	H	H	H	H
B-45	C ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
B-46	C ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-47	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
B-48	C ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H

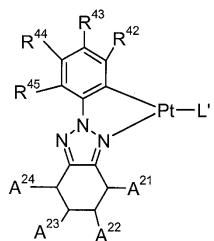
[0175]

B-49	<u>D²⁾</u>	H	H	H	H	H	H	H	H
B-50	D ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
B-51	D ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
B-52	D ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
B-53	<u>D²⁾</u>	F	H	H	F	H	H	H	H
B-54	D ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
B-55	D ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
B-56	D ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
B-57	<u>D²⁾</u>	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
B-58	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-59	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
B-60	<u>D²⁾</u>	H	H	OMe	H	H	H	H	H
B-61	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
B-62	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-63	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
B-64	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
B-65	A	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
B-66	B	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
B-67	C	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
B-68	D	H	³⁾	H	H	H	H	H	H

1) o] 성체의 혼합물.



³⁾ 2,4,4-트리 메틸펜트-2-올.



화합물	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ²⁴	A ²³	A ²²	A ²¹
H-1	A ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
H-2	A ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
H-3	A ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
H-4	A ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
H-5	A ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
H-6	A ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
H-7	A ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
H-8	A ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
H-9	A ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
H-10	A ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
H-11	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
H-12	A ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
H-13	A ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
H-14	A ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
H-15	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
H-16	A ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
H-17	B ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
H-18	B ²⁾	F	F	H	H	H	H	H	H
H-19	B ²⁾	H	H	H	F	H	H	H	H
H-20	B ²⁾	F	F	H	F	H	H	H	H

[0177]

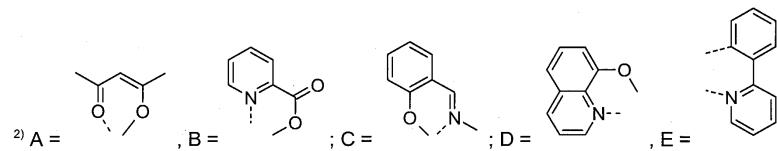
H-21	<u>B²⁾</u>	F	F	H	H	F	H	H	H
H-22	<u>B²⁾</u>	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
H-23	<u>B²⁾</u>	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
H-24	<u>B²⁾</u>	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H	H
H-25	<u>B²⁾</u>	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
H-26	<u>B²⁾</u>	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H
H-27	<u>B²⁾</u>	H	H	H	Ph	H	H	H	H
H-28	<u>B²⁾</u>	H	H	H	OMe	H	H	H	H
H-29	<u>B²⁾</u>	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H
H-30	<u>B²⁾</u>	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
H-31	<u>B²⁾</u>	H	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
H-32	<u>B²⁾</u>	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H
H-33	<u>C²⁾</u>	H	H	H	H	H	H	H	H
H-34	<u>C²⁾</u>	F	H	H	H	H	H	H	H
H-35	<u>C²⁾</u>	H	H	F	H	H	H	H	H
H-36	<u>C²⁾</u>	F	H	F	H	H	H	H	H
H-37	<u>C²⁾</u>	F	H	H	F	H	H	H	H
H-38	<u>C²⁾</u>	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
H-39	<u>C²⁾</u>	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
H-40	<u>C²⁾</u>	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
H-41	<u>C²⁾</u>	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
H-42	<u>C²⁾</u>	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
H-43	<u>C²⁾</u>	H	H	Ph	H	H	H	H	H
H-44	<u>C²⁾</u>	H	H	OMe	H	H	H	H	H
H-45	<u>C²⁾</u>	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
H-46	<u>C²⁾</u>	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
H-47	<u>C²⁾</u>	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
H-48	<u>C²⁾</u>	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H

[0178]

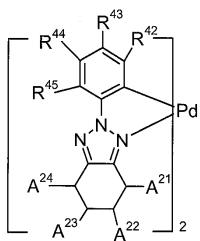
H-49	<u>D²⁾</u>	H	H	H	H	H	H	H	H
H-50	D ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
H-51	D ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
H-52	D ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
H-53	<u>D²⁾</u>	F	H	H	F	H	H	H	H
H-54	D ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
H-55	D ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
H-56	D ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
H-57	<u>D²⁾</u>	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
H-58	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
H-59	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
H-60	<u>D²⁾</u>	H	H	OMe	H	H	H	H	H
H-61	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
H-62	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
H-63	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
H-64	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
H-65	A	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
H-66	B	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
H-67	C	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
H-68	D	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
H-69	<u>E²⁾</u>	H	H	H	H	H	H	H	H
H-70	E ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
H-71	E ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
H-72	E ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
H-73	<u>E²⁾</u>	F	H	H	F	H	H	H	H
H-74	E ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
H-75	E ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
H-76	E ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H

[0179]

H-77	<u>E²⁾</u>	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
H-78	E ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
H-79	E ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
H-80	<u>E²⁾</u>	H	H	OMe	H	H	H	H	H
H-81	E ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
H-82	E ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
H-83	E ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
H-84	E ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
H-85	E ²⁾	H	³⁾	H	H	H	H	H	H

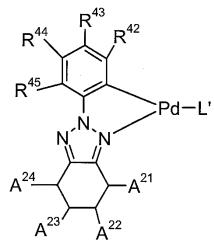
¹⁾ 이성체의 혼합물.

[0180]



화합물	R⁴⁵	R⁴⁴	R⁴³	R⁴²	A²⁴	A²³	A²²	A²¹
M-1	H	H	H	H	H	H	H	H
M-2	F	H	H	H	H	H	H	H
M-3	H	H	F	H	H	H	H	H
M-4	F	H	F	H	H	H	H	H
M-5	F	H	H	F	H	H	H	H
M-6	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
M-7	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
M-8	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
M-9	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
M-10	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
M-11	H	H	Ph	H	H	H	H	H
M-12	H	H	OMe	H	H	H	H	H
M-13	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
M-14	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
M-15	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
M-16	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H

¹⁾ 이 성체의 혼합물.



화학분류	L'	R^{45}	R^{44}	R^{43}	R^{42}	A^{24}	A^{23}	A^{22}	A^{21}
N-1	A^{21}	H	H	H	H	H	H	H	H
N-2	A^{21}	F	H	H	H	H	H	H	H
N-3	A^{21}	H	H	F	H	H	H	H	H
N-4	A^{21}	F	H	F	H	H	H	H	H
N-5	A^{21}	F	H	H	F	H	H	H	H
N-6	A^{21}	H	H	CF_3	H	H	H	H	H
N-7	A^{21}	H	CF_3	H	CF_3	H	H	H	H
N-8	A^{21}	CF_3	H	H	H	H	H	H	H
N-9	A^{21}	H	CH_3	H	CH_3	H	H	H	H
N-10	A^{21}	H	H	CH_3	H	H	H	H	H
N-11	A^{21}	H	H	Ph	H	H	H	H	H
N-12	A^{21}	H	H	OMe	H	H	H	H	H
N-13	A^{21}	CH_3	CH_3	H	H	H	H	H	H
N-14	A^{21}	CH_3	H	CH_3	H	H	H	H	H
N-15	A^{21}	H	H	Ph	H	H	$H/Ph^{11)}$	$Ph/H^{11)}$	H
N-16	A^{21}	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
N-17	B^{21}	H	H	H	H	H	H	H	H
N-18	B^{21}	F	F	H	H	H	H	H	H
N-19	B^{21}	H	H	H	F	H	H	H	H
N-20	B^{21}	F	F	H	F	H	H	H	H

[0182]

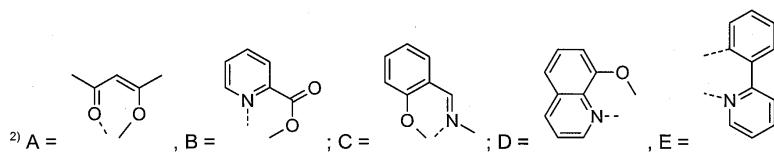
N-21	<u>B²⁾</u>	F	F	H	H	F	H	H	H
N-22	B ²⁾	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
N-23	B ²⁾	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
N-24	B ²⁾	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H	H
N-25	<u>B²⁾</u>	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
N-26	B ²⁾	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H
N-27	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H	H
N-28	<u>B²⁾</u>	H	H	H	OMe	H	H	H	H
N-29	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H
N-30	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
N-31	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
N-32	B ²⁾	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H
N-33	<u>C²⁾</u>	H	H	H	H	H	H	H	H
N-34	C ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
N-35	C ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
N-36	C ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
N-37	<u>C²⁾</u>	F	H	H	F	H	H	H	H
N-38	C ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
N-39	C ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
N-40	C ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
N-41	<u>C²⁾</u>	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
N-42	C ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
N-43	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
N-44	<u>C²⁾</u>	H	H	OMe	H	H	H	H	H
N-45	C ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
N-46	C ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
N-47	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
N-48	C ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H

[0183]

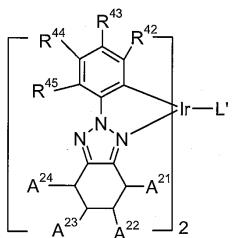
N-49	<u>D²⁾</u>	H	H	H	H	H	H	H	H
N-50	D ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
N-51	D ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
N-52	D ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
N-53	<u>D²⁾</u>	F	H	H	F	H	H	H	H
N-54	D ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
N-55	D ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
N-56	D ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
N-57	<u>D²⁾</u>	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
N-58	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
N-59	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
N-60	<u>D²⁾</u>	H	H	OMe	H	H	H	H	H
N-61	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
N-62	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
N-63	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
N-64	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
N-65	A	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
N-66	B	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
N-67	C	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
N-68	D	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
N-69	<u>E²⁾</u>	H	H	H	H	H	H	H	H
N-70	E ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
N-71	E ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
N-72	E ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
N-73	<u>E²⁾</u>	F	H	H	F	H	H	H	H
N-74	E ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
N-75	E ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
N-76	E ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H

[0184]

N-77	<u>E²⁾</u>	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
N-78	E ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
N-79	E ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
N-80	<u>E²⁾</u>	H	H	OMe	H	H	H	H	H
N-81	E ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
N-82	E ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
N-83	E ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
N-84	E ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
N-85	E ²⁾	H	³⁾	H	H	H	H	H	H

¹⁾ o] 성체의 혼합물.³⁾ 2,4,4-트리메틸펜트-2-일.

[0185]



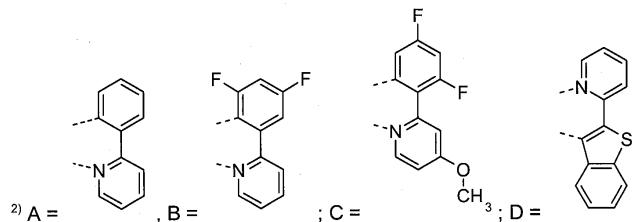
화합물	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ²⁴	A ²³	A ²²	A ²¹
S-1	A ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
S-2	A ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
S-3	A ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
S-4	A ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
S-5	A ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
S-6	A ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
S-7	A ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
S-8	A ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
S-9	A ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
S-10	A ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-11	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
S-12	A ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
S-13	A ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
S-14	A ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-15	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
S-16	A ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
S-17	B ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
S-18	B ²⁾	F	F	H	H	H	H	H	H
S-19	B ²⁾	H	H	H	F	H	H	H	H
S-20	B ²⁾	F	F	H	F	H	H	H	H

S-21	<u>B²⁾</u>	F	F	H	H	F	H	H	H
S-22	B ²⁾	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
S-23	B ²⁾	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
S-24	B ²⁾	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H	H
S-25	<u>B²⁾</u>	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
S-26	B ²⁾	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H
S-27	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H	H
S-28	<u>B²⁾</u>	H	H	H	OMe	H	H	H	H
S-29	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H
S-30	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
S-31	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
S-32	B ²⁾	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H
S-33	<u>C²⁾</u>	H	H	H	H	H	H	H	H
S-34	C ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
S-35	C ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
S-36	C ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
S-37	<u>C²⁾</u>	F	H	H	F	H	H	H	H
S-38	C ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
S-39	C ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
S-40	C ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
S-41	<u>C²⁾</u>	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
S-42	C ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-43	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
S-44	<u>C²⁾</u>	H	H	OMe	H	H	H	H	H
S-45	C ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
S-46	C ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-47	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
S-48	C ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H

[0187]

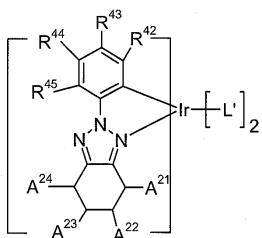
S-49	<u>D²⁾</u>	H	H	H	H	H	H	H	H
S-50	D ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
S-51	D ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
S-52	D ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
S-53	<u>D²⁾</u>	F	H	H	F	H	H	H	H
S-54	D ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
S-55	D ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
S-56	D ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
S-57	<u>D²⁾</u>	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
S-58	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-59	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
S-60	<u>D²⁾</u>	H	H	OMe	H	H	H	H	H
S-61	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
S-62	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-63	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
S-64	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
S-65	A	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
S-66	B	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
S-67	C	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
S-68	D	H	³⁾	H	H	H	H	H	H

1) 이성체의 혼합물.



3) 2,4,4-트리메틸펜트-2-일.

[0188]



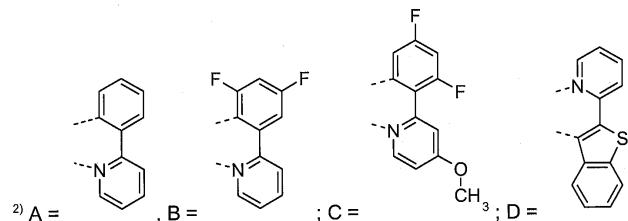
화합물	L'	R^{45}	R^{44}	R^{43}	R^{42}	A^{24}	A^{23}	A^{22}	A^{21}
T-1	$A^{2)}$	H	H	H	H	H	H	H	H
T-2	$A^{2)}$	F	H	H	H	H	H	H	H
T-3	$A^{2)}$	H	H	F	H	H	H	H	H
T-4	$A^{2)}$	F	H	F	H	H	H	H	H
T-5	$A^{2)}$	F	H	H	F	H	H	H	H
T-6	$A^{2)}$	H	H	CF_3	H	H	H	H	H
T-7	$A^{2)}$	H	CF_3	H	CF_3	H	H	H	H
T-8	$A^{2)}$	CF_3	H	H	H	H	H	H	H
T-9	$A^{2)}$	H	CH_3	H	CH_3	H	H	H	H
T-10	$A^{2)}$	H	H	CH_3	H	H	H	H	H
T-11	$A^{2)}$	H	H	Ph	H	H	H	H	H
T-12	$A^{2)}$	H	H	OMe	H	H	H	H	H
T-13	$A^{2)}$	CH_3	CH_3	H	H	H	H	H	H
T-14	$A^{2)}$	CH_3	H	CH_3	H	H	H	H	H
T-15	$A^{2)}$	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
T-16	$A^{2)}$	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
T-17	$B^{2)}$	H	H	H	H	H	H	H	H
T-18	$B^{2)}$	F	F	H	H	H	H	H	H
T-19	$B^{2)}$	H	H	H	F	H	H	H	H
T-20	$B^{2)}$	F	F	H	F	H	H	H	H

[0189]

T-21	<u>B²⁾</u>	F	F	H	H	F	H	H	H
T-22	B ²⁾	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
T-23	B ²⁾	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
T-24	B ²⁾	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H	H
T-25	<u>B²⁾</u>	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
T-26	B ²⁾	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H
T-27	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H	H
T-28	<u>B²⁾</u>	H	H	H	OMe	H	H	H	H
T-29	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H
T-30	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
T-31	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
T-32	B ²⁾	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H
T-33	<u>C²⁾</u>	H	H	H	H	H	H	H	H
T-34	C ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
T-35	C ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
T-36	C ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
T-37	<u>C²⁾</u>	F	H	H	F	H	H	H	H
T-38	C ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
T-39	C ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
T-40	C ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
T-41	<u>C²⁾</u>	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
T-42	C ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
T-43	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
T-44	<u>C²⁾</u>	H	H	OMe	H	H	H	H	H
T-45	C ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
T-46	C ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
T-47	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
T-48	C ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H

[0190]

T-49	D ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
T-50	D ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
T-51	D ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
T-52	D ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
T-53	D ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
T-54	D ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
T-55	D ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
T-56	D ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
T-57	D ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
T-58	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
T-59	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
T-60	D ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
T-61	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
T-62	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
T-63	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/Ph ¹⁾	H
T-64	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
T-65	A	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
T-66	B	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
T-67	C	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
T-68	D	H	³⁾	H	H	H	H	H	H

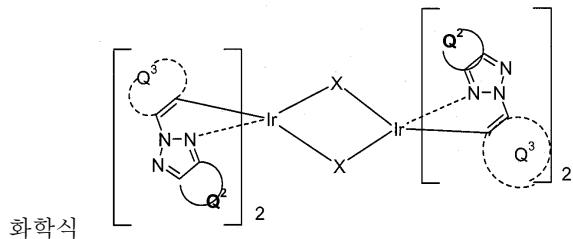
¹⁾ 이성체의 혼합물.

[0191]

[0192] 본 발명의 금속 착체는 선행 기술에 공지된 일반적인 방법에 따라 제조할 수 있다. 화학식 $Ir(L^a)_3$ 의 이리듐 금속 착체를 제조하기 위한 편리한 1단계 방법은 시판중인 이리듐 트리클로라이드 수화물을 은 트리플루오로아세테이트 3당량의 존재하에 및 임의로 용매(예: 할로겐계 용매, 알코올계 용매, 에테르계 용매, 에스테르계 용매, 케톤계 용매, 니트릴계 용매 및 물)의 존재하에 과량의 L^aH 와 반응시킴을 포함한다. 트리스-사이클로금속화 이리듐 착체는 종래의 방법으로 분리하고 정제한다. 몇몇의 경우에, 이성체들의 혼합물이 수득된다. 종종 혼합물은 각각의 이성체들을 분리하지 않고 사용할 수 있다.

[0193] 우선 화학식 $\begin{array}{c} X \\ | \\ L^a \backslash Ir \backslash L^a \\ | \\ O \\ | \\ L^a \end{array}$ 또는 $\begin{array}{c} L^a \backslash Ir \backslash Cl \backslash L^a \\ | \\ Cl \\ | \\ L^a \end{array}$ 의 중간체 이리듐 이량체(여기서, X는 H, 메틸 또는 에틸이고, L^a 는 상기에서 정의한 바와 같다)를 제조한 후, HL' 를 첨가하여, 예를 들면, 화학식 $Ir(L^a)_2L'$ 의 이리듐 금속 착체를 제조할 수 있다. 우선 이리듐 트리클로라이드 수화물을 HL' 와 반응시키고 NaX 를 첨가하고 이리듐 트리클로라이드 수화물을 적합한 용매, 예를 들면, 2-에톡시에탄올 속에서 HL' 와 반응시켜 이리듐 이량체를 일반적으로 제조할 수 있다.

[0194] 따라서, 동일한 Ir 중심 원자에 결합한, 본 발명의 2개의 트리아졸 리간드와, 추가의 두자리 리간드로서, 추가의 중심 원자에 배위된 2개의 할로겐 원자 또는 할콜레이트 잔기를 함유하는 착체, 즉 이량체 착체, 예를 들면,



[0195] 할로겐(또는 할로)은 불소, 염소, 브롬 및 요오드이다.

[0196] C₁–C₂₄알킬은 측쇄 또는 직쇄 라디칼, 예를 들면, 메틸, 에틸, 프로필, 이소프로필, n-부틸, 2급-부틸, 이소부틸, 3급-부틸, 2-에틸부틸, n-펜틸, 이소펜틸, 1-메틸펜틸, 1,3-디메틸부틸, n-헥실, 1-메틸헥실, n-헵틸, 이소헵틸, 1,1,3,3-테트라메틸부틸, 1-메틸헵틸, 3-메틸헵틸, n-옥틸, 2-에틸헥실, 1,1,3-트리메틸헥실, 1,1,3,3-테트라메틸펜틸, 노닐, 데실, 운데실, 1-메틸운데실, 도데실, 1,1,3,3,5,5-헥사메틸헥실, 트리데실, 테트라데실, 펜타데실, 헥사데실, 헵타데실, 옥타데실, 아이코실 또는 도코실이다.

[0197] C₁–C₂₄퍼플루오로알킬은 측쇄 또는 직쇄 라디칼, 예를 들면, -CF₃, -CF₂CF₃, -CF₂CF₂CF₃, -CF(CF₃)₂, -(CF₂)₃CF₃ 및 -C(CF₃)₃이다.

[0198] C₁–C₂₄알콕시 라디칼은 직쇄 또는 측쇄 알콕시 라디칼, 예를 들면, 메톡시, 에톡시, n-프로록시, 이소프로록시, n-부톡시, 2급-부톡시, 3급-부톡시, 아밀옥시, 이소아밀옥시 또는 3급-아밀옥시, 헵틸옥시, 옥틸옥시, 이소옥틸옥시, 노닐옥시, 데실옥시, 운데실옥시, 도데실옥시, 테트라데실옥시, 펜타데실옥시, 헥사데실옥시, 헵타데실옥시 및 옥타데실옥시이다.

[0199] C₂–C₂₄알케닐 라디칼은 직쇄 또는 측쇄 알케닐 라디칼, 예를 들면, 비닐, 알릴, 메트알릴, 이소프로펜일, 2-부텐일, 3-부텐일, 이소부텐일, n-펜타-2,4-디에닐, 3-메틸-부트-2-엔일, n-옥트-2-엔일, n-도데크-2-엔일, 이소도데칸일, n-도데크-2-엔일 또는 n-옥타데크-4-엔일이다.

[0200] C₂–C₂₄알키닐은 직쇄형 또는 측쇄형이고, 바람직하게는 치환되지 않거나 치환될 수 있는 C₂–C₈알키닐, 예를 들면, 에틴일, 1-프로핀-3-일, 1-부탄-4-일, 1-펜틴-5-일, 2-메틸-3-부탄-2-일, 1,4-펜타디인-3-일, 1,3-펜타디인-5-일, 1-헥신-6-일, 시스-3-메틸-2-펜텐-4-인-1-일, 트랜스-3-메틸-2-펜텐-4-인-1-일, 1,3-헥사디인-5-일, 1-옥탄-8-일, 1-노닌-9-일, 1-데킨-10-일 또는 1-테트라코신-24-일이다.

[0201] C₄–C₁₈사이클로알킬, 특히 C₅–C₁₂사이클로알킬은 바람직하게는 C₅–C₁₂사이클로알킬 또는 1개 내지 3개의 C₁–C₄알킬 그룹으로 치환된 C₅–C₁₂사이클로알킬이고, 예를 들면, 사이클로펜틸, 메틸사이클로펜틸, 디메틸사이클로펜틸, 사이클로헥실, 메틸사이클로헥실, 디메틸사이클로헥실, 트리메틸사이클로헥실, 3급-부틸사이클로헥실, 사이클로헵틸, 사이클로옥틸, 사이클로노닐, 사이클로데실, 사이클로도데실, 1-아다만틸 또는 2-아다만틸이다. 사이클로헥실, 1-아다만틸 및 사이클로펜틸이 가장 바람직하다.

[0202] S, O 또는 NR²⁵로 차단된 C₄–C₁₈사이클로알킬의 예로는 피페리딜, 피페라지닐 및 모르폴리닐이 있다.

[0203] C₂–C₂₄알케닐은, 예를 들면, 비닐, 알릴, 부텐일, 펜텐일, 헥센일, 헵텐일 또는 옥텐일이다.

[0204] 아릴은 일반적으로 C₆–C₃₀아릴, 바람직하게는 임의로 치환될 수 있는 C₆–C₂₄아릴, 예를 들면, 페닐, 4-메틸페닐, 4-메톡시페닐, 나프틸, 비페닐릴, 2-플루오르에닐, 펜안트릴, 안트릴, 테트라실, 펜타실, 헥사실, 테르페닐릴 또는 쿠아드페닐릴; 또는 1개 내지 3개의 C₁–C₄알킬 그룹으로 치환된 페닐, 예를 들면, o-메틸페닐, m-메틸페닐, p-메틸페닐, 2,3-디메틸페닐, 2,4-디메틸페닐, 2,5-디메틸페닐, 2,6-디메틸페닐, 3,4-디메틸페닐, 3,5-디메틸페닐, 2-메틸-6-에틸페닐, 4-3급-부틸페닐, 2-에틸페닐 또는 2,6-디에틸페닐이다.

[0205] C₇–C₂₄아르알킬 라디칼은 바람직하게는 치환될 수 있는 C₇–C₁₅아르알킬 라디칼, 예를 들면, 벤질, 2-벤질-2-프로필, β-펜에틸, α-메틸벤질, α, α-디메틸벤질, ω-페닐-부틸, ω-페닐-옥틸, ω-페닐-도데실; 또는 페닐 환에서 1개 내지 3개의 C₁–C₄알킬 그룹으로 치환된 페닐-C₁–C₄알킬, 예를 들면, 2-메틸-벤질, 3-메틸벤질, 4-메틸벤

질, 2,4-디메틸벤질, 2,6-디메틸벤질 또는 4-3급-부틸벤질 또는 3-메틸-5-(1',1',3',3'-테트라메틸-부틸)-벤질이다.

[0206] 헤테로아릴은 일반적으로 C_2 - C_{26} 헤테로아릴, 즉 5개 내지 7개의 환 원자를 갖는 환 또는 축합된 환 시스템(여기서, 질소, 산소 또는 황은 가능한 헤테로 원자이다)이고, 일반적으로 6개 이상의 공액된 p-전자를 갖는 5개 내지 30개의 원자를 갖는 불포화된 헤�테로사이클릭 라디칼이고, 예를 들면, 치환되지 않거나 치환될 수 있는 티에닐, 벤조[b]티에닐, 디벤조[b,d]티에닐, 티안트레닐, 푸릴, 푸르푸릴, 2H-피라닐, 벤조푸라닐, 이소벤조푸라닐, 디벤조푸라닐, 페녹시티에닐, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 피리딜, 비피리딜, 트리아지닐, 피리미디닐, 피라지닐, 피리다지닐, 인돌리지닐, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 푸리닐, 퀴놀리지닐, 신놀릴, 이소신놀릴, 프탈라지닐, 나프티리디닐, 시녹살리닐, 시나졸리닐, 신놀리닐, 프테리디닐, 카바졸릴, 카볼리닐, 벤조트리아졸릴, 벤즈옥사졸릴, 웬안트리디닐, 아크리디닐, 페리미디닐, 웬안트롤리닐, 페나지닐, 이소티아졸릴, 페노티아지닐, 이소옥사졸릴, 푸라자닐 또는 웬옥사지닐이다.

[0207] C_6 - C_{18} 사이클로알콕시는, 예를 들면, 사이클로펜틸옥시, 사이클로헥실옥시, 사이클로헵틸옥시 또는 사이클로옥틸옥시 또는 1개 내지 3개의 C_1 - C_4 알킬로 치환된 사이클로알콕시, 예를 들면, 메틸사이클로펜틸옥시, 디메틸사이클로펜틸옥시, 메틸사이클로헥실옥시, 디메틸-사이클로헥실옥시, 트리메틸사이클로헥실옥시 또는 3급-부틸사이클로헥실옥시이다.

[0208] C_6 - C_{24} 아릴옥시는 일반적으로 페녹시 또는 1개 내지 3개의 C_1 - C_4 알킬 그룹으로 치환된 페녹시, 예를 들면, o-메틸페녹시, m-메틸페녹시, p-메틸페녹시, 2,3-디메틸페녹시, 2,4-디메틸페녹시, 2,5-디메틸페녹시, 2,6-디메틸페녹시, 3,4-디메틸페녹시, 3,5-디메틸페녹시, 2-메틸-6-에틸페녹시, 4-3급-부틸페녹시, 2-에틸페녹시 또는 2,6-디에틸페녹시이다.

[0209] C_6 - C_{24} 아르알콕시는 일반적으로 페닐- C_1 - C_9 알콕시, 예를 들면, 벤질옥시, α -메틸벤질옥시, α , α -디메틸벤질옥시 또는 2-페닐에톡시이다.

[0210] C_1 - C_{24} 알킬티오 라디칼은 직쇄 또는 측쇄 알킬티오 라디칼, 예를 들면, 메틸티오, 에틸티오, 프로필티오, 이소프로필티오, n-부틸티오, 이소부틸티오, 웬틸티오, 이소펜틸-티오, 헥실티오, 헵틸티오, 옥틸티오, 테트라데실티오, 헥사데실티오 또는 옥타데실티오이다. C_1 - C_{24} 알킬셀레늄 및 C_1 - C_{24} 알킬텔루륨은 각각 C_1 - C_{24} 알킬Se- 및 C_1 - C_{24} 알킬Te-이다.

[0211] 상기 언급한 그룹의 가능한 치환체는 C_1 - C_8 알킬, 하이드록실 그룹, 머캅토 그룹, C_1 - C_8 알콕시, C_1 - C_8 알킬티오, 할로겐, 할로- C_1 - C_8 알킬, 시아노 그룹, 알데히드 그룹, 케톤 그룹, 카복실 그룹, 에스테르 그룹, 카바모일 그룹, 아미노 그룹, 니트로 그룹 또는 실릴 그룹이다.

[0212] 용어 "할로알킬"은 상기 언급한 알킬 그룹이 할로겐으로 부분 또는 완전 치환된 그룹, 예를 들면, 트리플루오로메틸 등을 의미한다. "알데히드 그룹, 케톤 그룹, 에스테르 그룹, 카바모일 그룹 및 아미노 그룹"은 C_1 - C_{24} 알킬 그룹, C_4 - C_{18} 사이클로알킬 그룹, C_6 - C_{30} 아릴 그룹, C_7 - C_{24} 아르알킬 그룹 또는 헤�테로사이클릭 그룹에 의해 치환된 그룹(여기서, 알킬 그룹, 사이클로알킬 그룹, 아릴 그룹, 아르알킬 그룹 및 헤�테로사이클릭 그룹은 치환되지 않거나 치환될 수 있다)을 포함한다. 용어 "실릴 그룹"은 화학식 $-SiR^{105}R^{106}R^{107}$ 의 그룹(여기서, R^{105} , R^{106} 및 R^{107} 은 서로 독립적으로 C_1 - C_8 알킬 그룹, 특히 C_1 - C_4 알킬 그룹, C_6 - C_{24} 아릴 그룹 또는 C_7 - C_{12} 아르알킬그룹, 예를 들면, 트리메틸실릴 그룹이다)을 의미한다.

[0213] 치환체가 그룹에서 1회 이상 존재하면, 상기 치환체들은 각각의 경우에 상이할 수 있다.

[0214] 또한, 본 발명은 금속 치환체를 포함하는 전자 장치 및 이의 제조방법에 관한 것이다. 전자 장치는 2개의 전기 접촉 층(장치의 1개 이상의 층은 금속 치환체 화합물을 포함한다) 사이에 위치한 1개 이상의 유기 활성 물질을 포함할 수 있다. 전자 장치는 애노드 층(a), 캐소드 층(e) 및 활성 층(c)을 포함할 수 있다. 애노드 층(a)에 인접하여 임의의 정공 주입/수송 층(b)이 있고, 캐소드 층(e)에 인접하여 임의의 전자 주입/수송 층(d)이 있다. 층(b) 및 층(d)는 전하 수송 층의 예이다.

[0215] 활성 층(c)은 상기 기재된 금속 치환체를 대략 1중량부% 이상 포함할 수 있다.

[0216] 몇몇의 양태에서, 활성 층(c)은 Alq₃과 같은 호스트 전하 수송 물질이 필요하지 않을 수 있으므로 실질적으로 100% 금속 착체일 수 있다. "실질적으로 100%"는 금속 착체가 층에서 유일한 물질이라는 것을 의미하고, 층을 형성하는 공정으로부터의 불순물 또는 우연한 부산물의 가능성을 예외로 갖는다. 또한, 몇몇의 양태에서, 금속 착체는 일반적으로 활성 층(c) 내에서 전하 수송을 돋는 데 사용할 수 있는 호스트 물질 내의 도편트일 수 있다. 여타의 금속 착체를 포함하는 활성 층(c)은 작은 분자 활성 물질일 수 있다.

[0217] 장치는 애노드 층(a) 또는 캐소드 층(e)에 인접한 지지체 또는 기판(도시하지 않음)을 포함할 수 있다. 가장 빈번하게는, 지지체는 애노드 층(a)에 인접한다. 지지체는 가요성 또는 경질의 유기물 또는 무기물일 수 있다. 일반적으로, 유리 또는 가요성 유기 필름을 지지체로서 사용한다. 애노드 층(a)은 캐소드 층(e)과 비교하여 정공을 주입하는 데 보다 효과적인 전극이다. 애노드는 금속, 혼합된 금속, 합금, 금속 산화물 또는 혼합된 금속 산화물을 함유하는 물질을 포함할 수 있다. 애노드 층(a) 내의 적합한 금속 원소는 4족, 5족, 6족 및 8족 내지 11족 전이금속을 포함할 수 있다. 애노드 층(a)이 투광성인 경우, 12족, 13족 및 14족 금속의 혼합 금속 산화물, 예를 들면, 인듐주석 산화물을 사용할 수 있다. 애노드 층(a)에 대한 물질의 몇몇 비제한적인 특정한 예로는 인듐주석 산화물("ITO"), 알루미늄주석 산화물, 금, 은, 구리, 니켈 및 셀레늄이 포함된다.

[0218] 애노드 층(a)은 화학적 또는 물리적 증착 공정 또는 스픬-캐스트 공정에 의해 형성될 수 있다. 화학적 증착은 플라즈마 증진되는 화학적 증착("PECVD") 또는 금속 유기 화학적 증착("MOCVD")으로서 수행할 수 있다.

[0219] 물리 증착은 모든 형태의 스퍼터링(예: 이온 빔 스퍼터링), e-빔 증발 및 저항 증발을 포함할 수 있다.

[0220] 특정한 형태의 물리 증착은 rf 마그네트론 스퍼터링 또는 유도 결합 플라즈마 물리적 증착("ICP-PVD")을 포함한다. 상기 부착 기술은 반도체 제조 분야에서 널리 공지되어 있다.

[0221] 정공 수송 층(b)은 애노드에 인접할 수 있다. 정공을 수송하는 작은 분자 화합물 및 중합체 둘 다를 사용할 수 있다.

[0222] 통상적으로 사용되는 정공 수송 분자는 N,N'-디페닐-N,N'-비스(3-메틸페닐)-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD) 및 비스[4-(N,N-디에틸아미노)-2-메틸페닐](4-메틸페닐) 메탄(MPMP) 이외에, 폴리비닐-카바졸, 1,1-비스[(디-4-톨릴아미노)페닐]사이클로헥산(TAPC); N,N'-비스(4-메틸페닐)-N,N'-비스(4-에틸페닐)-[1,1'-(3,3'-디메틸)비페닐]-4,4'-디아민(ETPD); 테트라키스-(3-메틸페닐)-N,N,N',N'-2,5-페닐렌디아민(PDA); a-페닐-4-N,N-디페닐아미노스티렌(TPS); p-(디에틸아미노)벤즈알데히드 디페닐하이드라존(DEH); 트리페닐아민(TPA); 1-페닐-3-[p-(디에틸아미노)스티릴]-5-[p-(디에틸아미노)페닐]파라졸린(PPR 또는 DEASP); 1,2-트랜스-비스(9H-카바졸-9-일)사이클로부탄(DCZB); N,N,N',N'-테트라키스(4-메틸페닐)-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민(TTB); 및 포르피린 화합물, 예를 들면, 구리 프탈로시아닌을 포함한다.

[0223] 통상적으로 사용되는 정공 수송 중합체는 폴리비닐카바졸, (페닐메틸) 폴리실란, 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)(PEDOT) 및 폴리아닐린이다. 정공 수송 분자, 예를 들면, 상기 언급된 분자를 중합체, 예를 들면, 폴리스티렌 및 폴리카보네이트에 도핑하여 정공 수송 중합체를 수득할 수 있다.

[0224] 정공 주입/수송 층(b)은 스픬 코팅, 캐스팅 및 인쇄, 예를 들면, 그래비어 인쇄를 포함하는 여타의 종래의 방법을 사용하여 형성할 수 있다. 또한, 잉크젯 인쇄, 열 패턴 형성 또는 화학적 또는 물리적 증착에 의해 층을 도포할 수 있다.

[0225] 일반적으로, 애노드 층(a) 및 정공 주입/수송 층(b)은 동일한 리소그래피 작업 동안 패턴화시킨다. 패턴은 목적하는 바대로 변할 수 있다. 예를 들면, 제1 전기 접촉 층 물질을 도포하기 전에 패턴화된 마스크 또는 레지스트를 제1 가요성 복합재 장벽 구조체에 위치시키는 방식으로 층을 형성할 수 있다. 또는, 층을 전체 층(또한, 소위 블랭킷 부착)으로서 도포하고 후속적으로, 예를 들면, 패턴화된 레지스트 층 및 습윤 화학 또는 건조 애칭 기술을 사용하여 패턴화시킬 수 있다. 또한, 상기 분야에 널리 공지된 패턴 형성에 대한 다른 공정을 사용할 수 있다. 전자 장치가 어레이 내에 위치할 때, 애노드 층(a) 및 정공 주입/수송 층(b)은 일반적으로 실질적으로 동일한 방향으로 확장되는 길이를 갖는 실질적으로 평행인 스트립으로 형성된다.

[0226] 활성 층(c)은 본원에 기재된 금속 착체를 포함할 수 있다. 선택된 특정한 물질은 특정한 이용 분야, 공정 동안 사용되는 전위차 또는 다른 인자에 의해 좌우될 수 있다. 활성 층(c)은 여기자가 방출 물질로부터 광전자 방출 메카니즘을 통해 흐르도록 전자, 정공 및/ 또는 여기자를 포획할 수 있는 방출 물질로 도핑된 전자 및/또는 정공을 수송할 수 있는 호스트 물질을 포함할 수 있다. 활성 층(c)은 수송 특성과 방출 특성이 조합된 단독 물질을 포함할 수 있다. 방출 물질이 도편트 또는 주성분이더라도, 활성 층은 방출 물질의 방출을 조율하는 다른

물질, 예를 들면, 도편트를 포함할 수 있다. 활성 층(c)은 조합되어 목적하는 스펙트럼의 광을 방출할 수 있는 복수의 방출 물질을 포함할 수 있다. 인광 방출 물질의 예로는 본 발명의 금속 착체를 포함한다. 형광 방출 물질의 예로는 DCM 및 DMQA를 포함한다. 호스트 물질의 예로는 Alq₃, CBP 및 mCP를 포함한다. 방출 및 호스트 물질의 예는 전문이 참조 문헌으로 인용된 미국 특허공보 제6,303,238 B호에 기재되어 있다.

[0227] 활성 층(c)은 스핀 코팅, 캐스팅 및 인쇄를 포함하는 여타의 종래의 기술에 의해 용액으로부터 도포할 수 있다. 활성 유기 물질은 물질의 성질에 따라 증착 공정으로 직접 도포할 수 있다.

[0228] 임의의 층(d)은 전자 주입/수송을 촉진시키고, 또한 층 계면에서 퀸칭 반응을 막기 위한 완충 층 또는 구속 층을 제공하는 둘 다의 기능을 수행할 수 있다. 보다 자세하게는, 층(d)은 전자 이동성을 향상시키고, 층(c) 및 층(e)가 달리 직접 접촉되어 있다면 퀸칭 반응의 가능성을 감소시킬 수 있다. 임의의 층(d)을 위한 물질의 예로는 금속 킬레이트화 옥시노이드 화합물[예: Alq₃ 등]; 폐난트롤린계 화합물[예: 2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린("DDPA"), 4,7-디페닐-1,10-페난트롤린("DPA") 등]; 아졸 화합물[예: 2-(4-비페닐릴)-5-(4-t-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸("PBD") 등, 3-(4-비페닐릴)-4-페닐-5-(4-t-부틸페닐)-1,2,4-트리아졸("TAZ") 등]; 다른 유사한 화합물; 또는 여타의 하나 이상의 이들의 배합물을 포함한다. 또는, 임의의 층(d)은 무기물일 수 있고, BaO, LiF, Li₂O 등을 포함한다.

[0229] 전자 주입/수송 층(d)은 스핀 코팅, 캐스팅 및 인쇄, 예를 들면, 그래비어 인쇄를 포함하는 여타의 종래의 방법을 사용하여 형성할 수 있다. 또한, 층은 잉크젯 인쇄, 열 패턴 형성 또는 화학 또는 물리 증착에 의해 도포할 수 있다.

[0230] 캐소드 층(e)은 전자 또는 음전하 캐리어를 주입하는 데 특히 효율적인 전극이다. 캐소드 층(e)은 제1 전기 접촉 층(상기 경우에, 애노드 층(a))보다 일함수가 낮은 여타의 금속 또는 비금속일 수 있다. 제2 전기 접촉 층을 위한 물질은 1족(예: Li, Na, K, Rb, Cs), 2족 알칼리 토금속, 12족 금속, 희토류, 란탄족(예: Ce, Sm, Eu 등) 및 악티늄족의 알칼리 금속으로부터 선택될 수 있다. 또한, 알루미늄, 인듐, 칼슘, 바륨, 이트륨 및 마그네슘 및 이들의 배합물과 같은 물질을 사용할 수 있다. 또한, Li 함유 유기금속성 화합물, LiF 및 Li₂O는 유기 층과 캐소드 층 사이에 부착되어 작동 전압을 낮출 수 있다. 캐소드 층(e)을 위한 물질의 특정한 비제한적인 예로는 바륨, 리튬, 세륨, 세슘, 유로퓸, 류비듐, 이트륨, 마그네슘 또는 사마륨을 포함한다.

[0231] 캐소드 층(e)은 일반적으로 화학 또는 물리 증착 공정에 의해 형성한다. 일반적으로, 캐소드 층은 애노드 층(a) 및 임의의 정공 주입 층(b)과 관련하여 상기 기재된 바대로 패턴화시킬 수 있다. 상기 장치가 어레이 내에 위치할 때, 캐소드 층(e)은 캐소드 층 스트립의 길이가 실질적으로 동일한 방향으로 확장되고 애노드 층 스트립의 길이에 실질적으로 수직인, 실질적으로 평행인 스트립으로 패턴화될 수 있다.

[0232] 화소라고 불리는 전자 소자는 교차점(어레이를 평면 또는 상부에서 조망할 때, 애노드 층 스트립이 캐소드 층 스트립과 교차하는 지점)에서 형성된다.

[0233] 다른 양태에 있어서, 추가의 층(들)이 유기 전자 장치 내에 존재할 수 있다. 예를 들면, 정공 주입 층(b)과 활성 층(c) 사이의 층(도시하지 않음)은 양전하 수송, 층들 사이의 밴드-캡 매칭, 보호층으로서의 기능 등을 촉진시킬 수 있다. 유사하게, 전자 주입 층(d)과 캐소드 층(e) 사이의 추가의 층(도시하지 않음)은 음전하 수송, 층들 사이의 밴드-캡 매칭, 보호층으로서의 기능 등을 촉진시킬 수 있다. 상기 분야에 공지되어 있는 층을 사용할 수 있다. 몇몇 또는 모든 층은 표면 처리하여 전하 캐리어 수송 효율을 증가시킬 수 있다. 제조 비용, 제조 복잡성 또는 가능한 다른 인자에 의해 장치에 높은 장치 효율을 제공하고자 하는 목표를 조절함으로써, 각각의 성분 층에 대한 물질의 선택을 결정할 수 있다.

[0234] 전하 수송 층(b) 및 전하 수송 층(d)은 일반적으로 활성 층(c)으로서 동일한 형태이다. 보다 자세하게는, 활성 층(c)이 작은 분자 화합물을 갖는 경우, 전하 수송 층(b) 및 전하 수송 층(d)은, 이들중 한 층 또는 두 층 모두가 존재하는지 여부에 따라, 상이한 작은 분자 화합물을 가질 수 있다. 활성 층(c)이 중합체를 갖는 경우, 전하 수송 층(b) 및 전하 수송 층(d)은, 이들중 한 층 또는 두 층 모두가 존재하는지 여부에 따라, 상이한 중합체를 가질 수도 있다. 또한, 활성 층(c)은 작은 분자 화합물일 수 있고, 이의 여타의 인접한 전하 수송 층은 중합체일 수 있다.

[0235] 각각의 기능적 층은 하나 이상의 층으로 이루어질 수 있다. 예를 들면, 캐소드 층은 1족 금속 층 및 알루미늄 층을 포함할 수 있다. 1족 금속은 활성 층(c)에 더 가까이 위치할 수 있고, 알루미늄은 1족 금속을 물과 같은 환경 오염으로부터 예방하는 데 도움을 줄 수 있다.

[0236] 제한하려는 것은 아니지만, 상이한 층은 하기 범위의 두께를 가질 수 있다: 무기 애노드 층(a), 일반적으로 대략 500nm 이하, 예를 들면, 대략 50 내지 200nm; 임의의 정공 주입 층(b), 일반적으로 대략 100nm 이하, 예를 들면, 대략 50 내지 200nm; 활성 층(c), 일반적으로 대략 100nm 이하, 예를 들면, 대략 10 내지 80nm; 임의의 전자 주입 층(d), 일반적으로 대략 100nm 이하, 예를 들면, 대략 10 내지 80nm; 및 캐소드 층(e), 일반적으로 대략 1000nm 이하, 예를 들면, 대략 30 내지 500nm. 애노드 층(a) 또는 캐소드 층(e)이 적어도 일부 광을 투과할 필요가 있다면, 상기한 층의 두께는 대략 100nm를 초과하지 않을 것이다.

[0237] 장치에서 전자-정공 재조합 구역의 위치 및 이에 따른 장치의 방출 스펙트럼은 각각의 층의 상대 두께에 영향을 받을 수 있다. 예를 들면, 전위 발광 화합물, 예를 들면, Alq₃이 전자 수송 층(d)에서 사용되는 경우, 전자-정공 재조합 구역은 Alq₃ 층 내에 존재할 수 있다.

[0238] 이어서, 방출은 Alq₃의 방출일 수 있고, 목적하는 날카로운 방출이 아닐 수 있다. 따라서, 전자-정공 재조합 구역이 발광 층[즉, 활성 층(c)] 내에 존재하도록 전자-수송 층의 두께가 선택되어야 한다. 층 두께의 목적하는 비율은 사용된 물질의 정확한 성질에 의존할 수 있다.

[0239] 장치에서 다른 층을 최적화시켜 금속 착체로 제조된 장치의 효율을 추가로 개선시킬 수 있다. 예를 들면, 보다 효과적인 캐소드, 예를 들면, Ca, Ba, Mg/Ag 또는 LiF/Al을 사용할 수 있다. 또한, 자동 전압의 감소로 생성되고 양자 효율을 증가시키는 고르지 않은 기판 및 정공 수송 물질을 사용할 수 있다. 또한, 추가의 층을 다양한 층의 에너지 수준을 만들고, 전계발광을 촉진시키기 위해 첨가할 수 있다.

[0240] 전자 장치의 사용에 따라, 활성 층(c)은 (예를 들면, 발광 다이오드에서) 신호에 의해 활성화되는 발광 층 또는 방사 에너지에 반응하고 이용되는 전위차(예: 겹출기 또는 전압 전지)의 존재 또는 부재하에 신호를 발생시키는 물질의 층일 수 있다. 방사 에너지에 반응할 수 있는 전자 장치의 예로는 광전도성 전지, 광레지스터, 광스위치, 광트랜지스터 및 광전관 및 광전압 전지로부터 선택된다. 숙련된 당업자는 명세서를 숙독한 후, 이의 특정한 용도를 위해 물질(들)을 선택할 수 있다.

[0241] OLED에서, 캐소드(e) 및 애노드(a) 층 각각으로부터 광활성 층(c)으로 주입되는 전자 및 정공은 활성 층(c)에서 음으로 및 양으로 충전된 폴라론을 형성한다. 상기한 폴라론은 인가된 전기장의 영향하에, 반대로 하전된 종류와 폴라론 여기자를 형성하고 후속적으로 방사 재조합을 겪으면서 이동한다. 일반적으로 대략 20볼트 미만이고 몇몇 경우에 대략 5볼트 이하인 애노드와 캐소드 사이의 충분한 전위차를 장치에 인가할 수 있다. 실제 전위차는 큰 전자 부품에서 장치의 사용에 의존할 수 있다. 많은 양태에서, 애노드 층(a)은 양 전압을 갖고 캐소드 층(e)은 전자 장치의 자동 동안 실질적으로 바닥 전위 또는 0볼트이다. 배터리 또는 다른 전력원(들)은 회로의 일부로서 전자 장치와 전기적으로 연결될 수 있다.

[0242] 다른 양태에 있어서, 인 함유 금속 착체 화합물을 층(b) 또는 층(d)에서 전하 수송 물질로서 사용할 수 있다.

[0243] 효과적이 되도록 층(b), 층(c) 또는 층(d)을 사용할 때 상기 화합물이 고체 매트릭스 희석제(예: 호스트 전하 수송 물질) 속에 존재할 필요는 없다. 층의 총 중량부를 기준으로 하여, 금속 착체 화합물이 대략 1중량부% 이상인 층 및 착체 화합물이 실질적으로 100% 이하인 층을 활성 층(c)으로서 사용할 수 있다. 추가의 물질은 착체 화합물과 활성 층(c)에 존재할 수 있다. 예를 들면, 형광 염료가 발광 색상을 변경하기 위해 존재할 수 있다.

[0244] 또한, 희석제를 첨가할 수 있다. 희석제는 중합체성 물질, 예를 들면, 폴리(N-비닐 카바졸) 및 폴리실란일 수 있다. 또한, 희석제는 작은 분자, 예를 들면, 4,4'-N,N'-디카바졸 비페닐 또는 3급 방향족 아민일 수 있다. 희석제를 사용할 때, 착체 화합물은 일반적으로, 층의 총 중량부를 기준으로 하여, 소량으로, 일반적으로 20중량부% 미만, 바람직하게는 10중량부% 미만으로 존재한다.

[0245] 금속 착체를 전자 장치 이외의 분야에서 사용할 수 있다. 예를 들면, 금속 착체를 촉매 또는 지시제(예: 산소 감지 지시제, 생체검정에서의 인광 지시제 등)로서 사용할 수 있다.

[0246] 다음 실시예는 본 발명의 특정한 특성 및 이점을 설명한다. 이는 본 발명을 예시하려는 것이지 제한하려는 것이 아니다. 달리 언급하지 않는 한, 모든 백분율은 중량 기준이고, "밤새"란, 14 내지 16시간의 기간 동안 방치하는 것이며, 실온이란, 20 내지 25°C의 온도를 말한다.

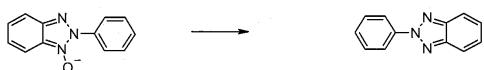
실시예

실시예 1: 중간체



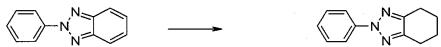
[0248] **공정:** 질소 스트림하에 아세트산나트륨 35g(0.426mol)을 실온에서 에탄올 200ml 중의 페닐하이드라진 30.7g(0.284mol)에 가한다. 15ml(0.142mol)의 1-플루오로-2-니트로벤젠을 실온에서 가한다. 반응 혼합물을 환류 가열하고, 이 온도에서 2시간 동안 유지시키고, 추가의 에탄올 60ml로 희석하고, 밤새 환류 온도에서 교반하고, 증발시킨다. 잔사에 TBME 200ml와 물 150ml를 가하고, 유기 상을 분리하고, 물로 2회 세척하고, 황산나트륨으로 건조시키고, 여과하고, 증발시켰다. 수율: 오렌지색 오일 37.0g

실시예 2: 벤조트리아졸 중간체를 수득하는 환원 공정



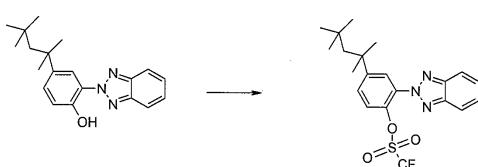
[0250] **공정:** 수산화나트륨 80g(2mol)을 에탄올 800ml 중의 실시예 1의 생성물 37g(0.142mol)의 용액에 5회로 나누어 가한다. 온도를 환류 온도로 상승시킨다. 혼합물을 60°C로 냉각시키고, 나트륨 티오설페이트 29g(0.312mol)을 가하고, 반응 혼합물을 환류 가열하고, 상기 온도에서 밤새 유지시키고, 증발시킨다. 잔사에 TBME 300ml 및 물 300ml를 가하고, 수성 상을 분리하고, TBME 150ml로 추출한다. 합한 유기 상을 물로 2회 세척하고, 황산나트륨으로 건조시키고, 여과하고, 증발시킨다. 고체 잔사를 실리카 겔상 컬럼(헥산/ 4% TBME)으로 정제한다. 수율: 갈색 고체 10.2g(37%).

실시예 3: 리간드 1



[0252] **공정:** 2-페닐-2-H-벤조트리아졸 1.0g(5mmol) 및 Ba₂SO₄상 Pd/ 5% 53mg(0.025mmol)을 아세트산 15ml에 가하고, 30°C/ 3bar에서 5시간 동안 수소화시킨다. 반응 혼합물을 셀라이트로 여과시킨다. 여액을 증발시키고, 잔사를 툴루엔 10ml와 교반하고, 증발시킨다. 수율: 회백색 고체 1.0g(100%).

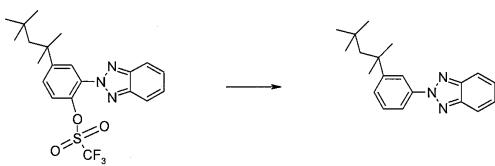
실시예 4: 중간체



[0254] **공정:** 질소 스트림하에 2-벤조트리아졸-2-일-4-(1,1,3,3-테트라메틸-부틸)-페놀 16.6g(0.0513mol)과 피리딘 10ml(0.29mol)를 실온에서 디클로로메탄 500ml에 가한다. 트리플루오로메탄설휐산 무수물 10ml(0.062mol)를 최대 30°C에서 10분 동안 적가한다. 황색 용액을 실온에서 밤새 교반하고, 물로 2회 세척하고, 황산나트륨으로 건조시키고, 여과하고, 증발시킨다. 유상 잔사를 실리카 겔상 컬럼(헥산/ 5% 에틸 아세테이트)으로 정제한다. 수율: 무색 오일 23.4g(~100%).

[0259]

실시예 5: 중간체



[0260]

[0261]

공정: 질소 스트립하에 트리플루오로-메탄설�onium 2-벤조트리아졸-2-일-4-(1,1,3,3-테트라메틸-부틸)-페닐 에스테르 18g(0.04mol), 트리에틸아민 16.5ml(0.12mol), 포름산 3.0ml(0.08mol), 아세트산팔라듐(II) 0.18g(0.0008mol), 트리페닐 포스핀 0.42g(0.0016mol)을 실온에서 디클로로메탄 80ml에 가한다. 반응 혼합물을 80°C에서 2.5시간 동안 교반하고, 실온으로 냉각시킨다. TBME 200ml 및 물 200ml를 가하고, 수성상을 분리하고, TBME 150ml로 추출한다. 합한 유기상을 물로 2회 세척하고, 황산나트륨으로 건조시키고, 증발시킨다. 유상 잔사를 실리카 젤상 컬럼(헥산/ 10% 에틸 아세테이트)으로 정제한다. 수율: 백색 고체로서의 생성물 11g(91%).

[0262]

실시예 6: 리간드 2



[0263]

[0264]

공정: 2-[3-(1,1,3,3-테트라메틸-부틸)-페닐]-2H-벤조트리아졸 1.23g(0.004mol) 및 Ba2SO4상 Pd/ 5% 42mg (0.02mmol)을 아세트산 30ml에 가하고, 30°C/ 3bar에서 5시간 동안 수소화시킨다. 반응 혼합물을 셀라이트로 건조시키고, 여액을 증발시킨다. 잔사를 툴루엔 10ml와 교반하고, 증발시킨다. 수율: 회백색 고체 1.27(100%).

[0265]

실시예 7: 중간체



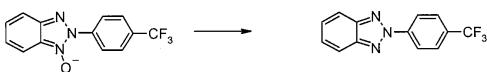
[0266]

[0267]

공정: 질소 스트립하에 아세트산나트륨 3.5g(0.043mol)을 실온에서 에탄올 26ml 중의 4-(트리플루오로메틸)페닐 하이드라진 5g(0.028mol)의 용액에 가한다. 1-플루오로-2-니트로벤젠 1.5ml(0.014mol)를 실온에서 가한다. 반응 혼합물을 환류 가열하고, 이 온도에서 5일 동안 유지시키고, 증발시킨다. 잔사에 에틸 아세테이트 100ml와 물 50ml를 가한다. 수성상을 분리하고, 에틸 아세테이트 50ml로 추출한다. 합한 유기상을 물로 2회 세척하고, 황산나트륨으로 건조시키고, 여과하고, 증발시킨다. 고체 잔사를 실리카 젤상 컬럼(헥산/ 25% TBME)으로 정제한다. 수율: 오렌지색 고체 1.7g(40%).

[0268]

실시예 8: 중간체



[0269]

[0270]

공정: 수산화나트륨 2.8g(0.07mol)을 에탄올 30ml 중의 실시예 7의 생성물 1.7g(0.005mol)의 용액에 가한다. 나트륨 티오설레이트 1.95g(0.011mol)을 가한다. 반응 혼합물을 환류 온도로 가열하고, 이 온도에서 4시간 동안 유지시키고, 증발시킨다. 잔사에 TBME 50ml와 물 30ml를 가하고, 수성상을 분리하고, TBME 15ml로 추출한다. 합한 유기상을 물로 2회 세척하고, 황산나트륨으로 건조시키고, 여과하고, 증발시킨다. 고체 잔사를 실리카 젤상 컬럼(헥산/ 5% 에틸 아세테이트)으로 정제한다. 수율: 황색 고체 1.2g(81%).

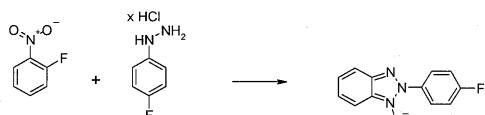
[0271] 실시예 9: 리간드 3



[0272]

[0273] 공정: 2-(4-트리플루오로메틸-페닐)-2H-벤조트리아졸 0.525g(2.0mmol) 및 Ba_2SO_4 상 Pd/ 5% 21mg(0.01mmol)을 아세트산 10mℓ에 가하고, 30℃/ 3bar에서 9시간 동안 수소화시킨다. 반응 혼합물을 셀라이트로 여과시키고, 여액을 증발시킨다. 잔사를 툴루엔 10mℓ와 교반하고, 증발시킨다. 수율: 회백색 고체 0.48g(90%).

[0274] 실시예 10: 중간체



[0275]

[0276] 공정: 질소 스트림하에 탄산나트륨 1.06g(0.01mol)을 실온에서 에탄을 20mℓ 중의 4-플루오로페닐하이드라진 하이드로클로라이드 3.3g(0.02mol)의 혼탁액에 가한다. 혼합물을 50℃로 가열하고, 아세트산나트륨 3.2g(0.03mol)과 1-플루오로-2-나트로벤젠 1.04mℓ(0.01mol)를 가한다. 혼합물을 환류 가열하고, 이 온도에서 18시간 동안 교반하고, 증발시킨다. 잔사에 에틸 아세테이트 140mℓ와 물 100mℓ를 가한다. 수성 상을 분리하고, 에틸 아세테이트 140mℓ로 추출한다. 합한 유기 상을 물로 2회 세척하고, 황산나트륨으로 건조시키고, 여과하고, 증발시킨다. 고체 잔사를 실리카 젤상 컬럼(헥산/ 25% 에틸 아세테이트)으로 정제한다. 수율: 회백색 고체 1.3g(53%).

[0277] 실시예 11: 중간체



[0278]

[0279] 공정: 수산화나트륨 2.97g(74mmol)을 에탄을 32mℓ 중의 실시예 10의 생성물 1.3g(5.3mmol)의 용액에 가한다. 나트륨 티오설페이트 2.0g(11.7mmol)을 가한다. 반응 혼합물을 환류 가열하고, 이 온도에서 4시간 동안 유지시키고, 증발시킨다. 잔사에 TBME 50mℓ와 물 30mℓ를 가하고, 수성 상을 분리하고, TBME 15mℓ로 추출한다. 합한 유기 상을 물로 2회 세척하고, 황산나트륨으로 건조시키고, 여과하고, 증발시킨다. 고체 잔사를 실리카 젤상 컬럼(헥산/ 5% 에틸 아세테이트)으로 정제한다. 수율: 황색 고체 0.87g(77%).

[0280] 실시예 12: 리간드 4

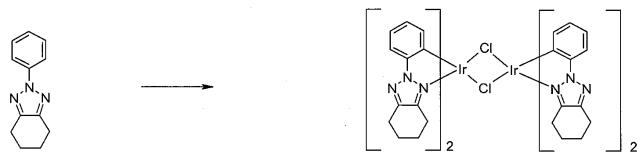


[0281]

[0282] 공정: 2-(4-플루오로-페닐)-2H-벤조트리아졸 0.425g(2mmol) 및 Ba_2SO_4 상 Pd/ 5% 20mg(0.01mmol)을 아세트산 10mℓ에 가하고, 30℃/ 3bar에서 5시간 동안 수소화시킨다. 반응 혼합물을 셀라이트로 여과하고, 여액을 증발시킨다. 잔사를 툴루엔 10mℓ와 교반하고, 증발시킨다. 수율: 회백색 고체 0.43g(99%).

[0283]

실시예 13: 촉체 1



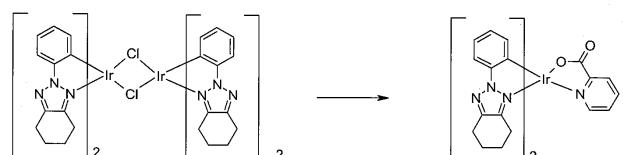
[0284]

[0285]

공정: 2-페닐-4,5,6,7-테트라하이드로-2H-벤조트리아졸 1g(5mmol) 및 삼염화이리듐 0.75g(2.5mmol)을 에톡시에탄올 12ml와 물 4ml의 혼합물에 가한다. 혼합물을 16시간 동안 환류 가열한다. 실온으로 냉각시킨 후, 물 12ml를 녹색 혼탁액에 가한다. 침전물을 여과하고, 에탄올과 헥산으로 세척하고, 실온에서 감압하에 건조시킨다. 수율: 녹색 고체 1.16g (74%)(융점: 439°C)

[0286]

실시예 14: 촉체 2



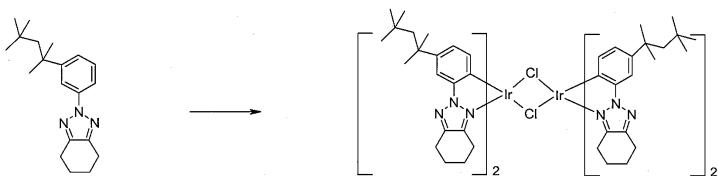
[0287]

[0288]

공정: 실시예 13에 따라 수득한 이량체 0.125g(0.1mmol)과 2-페놀산 0.025g(0.2mmol)을 1,2-디클로로에탄 8ml에 가한다. 혼합물을 4시간 동안 환류 가열한 다음, 증발시킨다. 고체 잔사를 실리카 젤상 컬럼 크로마토그래피(에틸 아세테이트/ 5% 메탄올)로 정제한다. 수율: 황색 고체 0.12g(68%).

[0289]

실시예 15: 촉체 3

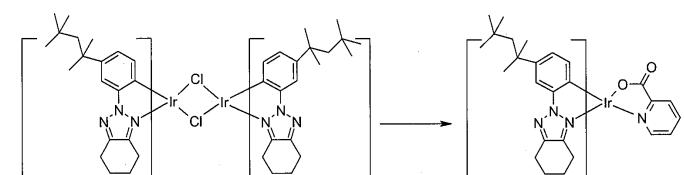


[0290]

공정: 2-[3-(1,1,3,3-테트라메틸-부틸)-페닐]-4,5,6,7-테트라하이드로-2H-벤조트리아졸 0.31g(0.43mmol)과 삼염화이리듐 0.15g(0.5mmol)을 2-에톡시에탄올 12ml와 물 4ml의 혼합물에 가한다. 혼합물을 16시간 동안 환류 가열한다. 실온으로 냉각시킨 후, 물 1ml를 황색 혼탁액에 가한다. 침전물을 여과하고, 에탄올과 헥산으로 세척하고, 감압하에 실온에서 건조시킨다. 수율: 황색 고체 0.30g(71%)(융점: 384°C)

[0292]

실시예 16: 촉체 4



[0293]

[0294]

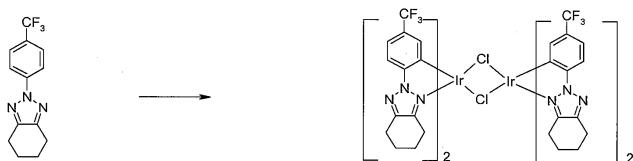
공정: 실시예 15에 따라 수득한 이량체 0.085g(0.05mmol)과 2-페놀산 0.013g(0.1mmol)을 1,2-디클로로에탄 48ml에 가한다. 혼합물을 3시간 동안 환류 가열하고, 증발시킨다. 잔사를 실리카 젤 컬럼(에틸 아세테이트/ 메탄올 5%)으로 정제한다. 수율: 녹황색 고체 0.08g(85%)(융점: 276°C).

[0295]

위에서 나타낸 공정에 따라, 다음 착체를 제조한다:

[0296]

실시예 17: 착체 5



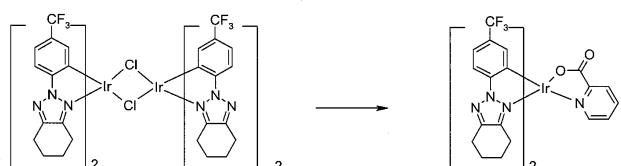
[0297]

[0298]

공정: 2-(4-트리플루오로메틸-페닐)-4,5,6,7-테트라하이드로-2H-벤조트리아졸 0.47g(1.76mmol)과 삼염화이리듐 0.263g(0.88mmol)을 2-에톡시에탄올 4.2mℓ와 물 1.4mℓ의 혼합물에 가한다. 혼합물을 16시간 동안 환류 가열한다. 실온으로 냉각시킨 후, 물 3mℓ를 녹색 혼탁액에 가한다. 침전물을 여과하고, 에탄올과 헥산으로 세척하고, 감압하에 실온에서 건조시킨다. 수율: 녹색 고체 0.37g(55%).

[0299]

실시예 18: 착체 6



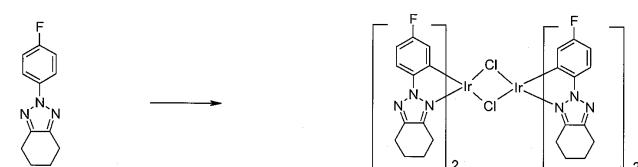
[0300]

[0301]

공정: 실시예 17에 따라 수득한 이랑체 0.152g(0.1mmol)과 2-피콜린산 0.025g(0.2mmol)을 1,2-디클로로에탄 8mℓ에 가한다. 혼합물을 16시간 동안 가열하고, 증발시킨다. 고체 잔사를 실리카겔상 컬럼(에틸 아세테이트/5% 메탄올)으로 정제한다. 수율: 황색 고체 0.12g(70%)(용점: 334°C).

[0302]

실시예 19: 착체 7



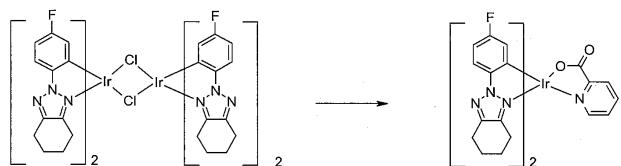
[0303]

[0304]

공정: 2-(4-플루오로-페닐)-4,5,6,7-테트라하이드로-2H-벤조트리아졸 0.42g(1.93mmol)과 삼염화이리듐 수화물 0.29g(0.97mmol)을 2-에톡시에탄올 4.6mℓ와 물 1.2mℓ의 혼합물에 가한다. 혼합물을 16시간 동안 환류 가열한다. 실온으로 냉각시킨 후, 물 4mℓ를 황색 혼탁액에 가한다. 침전물을 여과하고, 에탄올과 헥산으로 세척하고, 실온에서 감압하에 건조시킨다. 수율: 황색 고체 0.512g(80%)(용점: 433°C).

[0305]

실시예 20: 착체 8



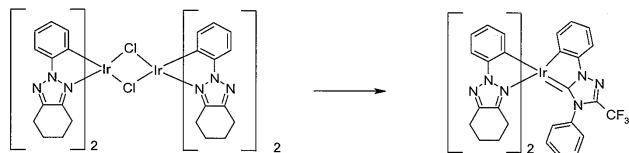
[0306]

[0307]

공정: 실시예 19에 따라 수득한 이랑체 0.132g(0.1mmol)과 2-피콜린산 0.025g(0.2mmol)을 1,2-디클로로에탄 8mℓ에 가한다. 혼합물을 2시간 동안 환류 가열하고, 증발시킨다. 잔사를 실리카겔상 컬럼(에틸 아세테이트/

5% 메탄올)으로 정제한다. 수율: 황색 고체 0.11g(74%)(융점: 315°C).

[0308] 실시예 21: 촉체 9



[0309]

공정: 1,4-디페닐-3-(트리플루오로메틸)-4H-1,2,4-트리아졸-1-이움 퍼클로레이트 0.093g(0.4mmol)을 오르토-크실렌 5mL 중의 칼륨 3급 부록사이드 0.045g(0.4mmol)와 함께 슬렌크관에 넣고, 질소하에 130°C에서 3시간 동안 교반한다. 최종적으로, 실시예 13에 따라 수득한 이량체 0.062g(0.05mmol)을 가하고, 동일한 온도에서 밤새 교반한다. 용매를 냉각시킨 후, 증발시켜 제거한다. 조 생성물을 용출제 혼합물로서 헥산/ 디클로로메탄/ 메탄올을 사용하여 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 생성물 0.05g(46%)을 수득한다.

[0311] 적용 실시예 1

[0312] 단일 유기 층을 갖는 유기 발광 장치를 다음의 방법으로 제조한다: 유리 기판 위에 두께 100nm의 ITO 필름을 스퍼터링 및 이후 패턴화에 의해 형성한다. 산소-플라즈마 처리된 ITO 필름 위로, 두께 80nm의 정공 주입층을 PEDOT:PSS(Baytron P)를 사용하여 스핀-코팅한 다음, 200°C에서(5분) 가열하여 형성한다. 툴루엔 10g 중의 촉체 2(실시예 14) 5mg과 폴리플루오렌(평균 분자량 140,000) 95mg을 스핀 코팅(2,000rpm; 10초)으로 도포하여 두께 80nm를 수득한다. 이렇게 처리한 기판을 진공 부착 챔버에 넣고, 바름 층 50nm에 이어서 알루미늄 층 100nm를 부착시켜 2층 전극 구조를 갖는 캐소드를 형성한다. 장치를 1mA/cm²(8V)의 전류 밀도에서 구동시키면, 투명한 밝은 백색 발광(CIE 0.30, 0.33)이 관찰된다.