



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2018년12월18일
(11) 등록번호 10-1929837
(24) 등록일자 2018년12월11일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07F 7/08 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
- (52) CPC특허분류
C07F 7/08 (2013.01)
H01L 51/0062 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2017-7020130(분할)
- (22) 출원일자(국제) 2009년10월07일
심사청구일자 2017년07월19일
- (85) 번역문제출일자 2017년07월19일
- (65) 공개번호 10-2017-0086704
- (43) 공개일자 2017년07월26일
- (62) 원출원 특허 10-2011-7010505
원출원일자(국제) 2009년10월07일
심사청구일자 2014년09월26일
- (86) 국제출원번호 PCT/EP2009/063036
- (87) 국제공개번호 WO 2010/040777
국제공개일자 2010년04월15일
- (30) 우선권주장
08166034.2 2008년10월07일
유럽특허청(EPO)(EP)
08166046.6 2008년10월07일
유럽특허청(EPO)(EP)
- (56) 선행기술조사문헌
KR101761236 B1*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

- (73) 특허권자
유디씨 아일랜드 리미티드
아일랜드 더블린 15 발리쿨린 블랜차즈타운 코퍼
레이트 파크 2
오스람 오엘이디 게엠베하
독일 레겐스부르크 베르너베르크슈트라세 2 (우:
93049)
오엘이디웍스 게엠베하
독일 52068 아헨 필립스슈트라세 8
- (72) 발명자
헤우서, 카르스텐
독일, 91056 에틀란젠, 제오르그-프랭크-스트라세
17
헌즈, 아비드
독일, 91056 에틀란젠, 아파트먼트 62, 헤인리츠
-키르츠너-스트라세 32
(뒷면에 계속)
- (74) 대리인
김진희, 김태홍

전체 청구항 수 : 총 16 항

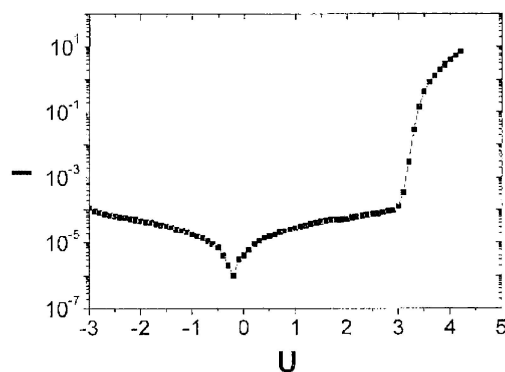
심사관 : 지무근

(54) 발명의 명칭 **축합환계로 치환된 실물 및 유기전자소자에서의 그 용도**

(57) 요약

본 발명은 축합환계로 치환된 실물의 유기전자소자에서의 용도, 축합환계로 치환된 특정한 실물 및 유기전자소자에서의 그 용도에 관한 것이다.

대표도 - 도1a



(52) CPC특허분류

H01L 51/0094 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

H01L 51/5096 (2013.01)

(72) 발명자

슈미드, 건터

독일, 91334 험호펜, 랑게 스트라쎄 13

크라우서, 랄프

독일, 91058 에를란겐, 라티보어스트라쎄 10

랭거, 니콜

독일, 68163 만헤임, 슈왈츠왈드스트라쎄 97

몰트, 올리버

독일, 69469 웨인헤임, 윈터가쎄 46

돌만, 코린나

독일, 67098 배드 더크헤임, 파투기서 스트라쎄 21

푸츠, 에블린

독일, 98199 만헤임, 탄하우서링 75

루돌프, 진스

독일, 67547 뎀스, 뎀헬름-루츠너-스트라쎄 2

렌나츠, 크리스티안

독일, 67105 쉬퍼스탓트, 한스-페만-스트라쎄 24

와타나베, 소이치

독일, 68161 만헤임, 34, 에스6

쉴르크네츠, 크리스티안

독일, 68305 만헤임, 윈켈웨그 52

와겐블라스트, 게하드

독일, 67157 와첸헤임, 암 주데낙커 8

반 엘스버겐, 볼커

독일, 52080 아첸, 아우프 더 홀스 94비

보너, 허벌트, 프리드리치

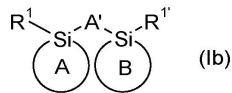
독일, 52076 아첸, 마르웨그 7

명세서

청구범위

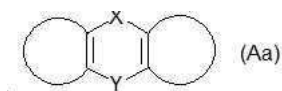
청구항 1

하기 화학식(Ib)의 화합물:



상기 식에서,

A'는 하기 일반 화학식(Aa)를 갖고:



여기서, X는 S, O 또는 NR^5 를 의미하며,

Y는 하나의 결합이거나 NR^5 , CR^7R^8 , O, SO, SO_2 또는 S를 의미하며,

R^5 는 서로 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴을 의미하며;

R^7 , R^8 은 서로 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴을 의미하며;

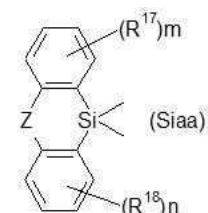


는 각각 서로 독립적으로 5개 내지 6개의 환 원소를 갖는 축합환을 의미하며, 상기 축합환은 기존 이중 결합 이외에 하나 또는 다수의 이중 결합을 가질 수 있으며, 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, $\text{SiR}^2\text{R}^3\text{R}^4$ 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며, 여기서 5개 또는 6개의 환 원자를 갖는 축합환은 또한 5개 또는 6개의 환 원자를 갖는 하나 또는 다수의 추가 축합환과 융합될 수 있으며;

R^2 , R^3 , R^4 는 서로 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴을 의미하며, 여기서 잔기들 R^2 , R^3 및 R^4 또는 R^2 , R^3 및 R^4 중 두 개의 잔기는 또한 공동으로 2개 내지 6개의 환으로 이루어진 축합환계를 형성할 수 있으며, 상기 환들은 각각 포화되거나 단일 또는 다중 불포화되며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며;



는 하기 화학식(Siaa)를 가지며:



여기서, Z는 하나의 결합이거나 NR^{14} , $CR^{15}R^{16}$, O, SO, SO_2 , Si 또는 S를 의미하며;

R^{14} 는 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴을 의미하며;

R^{15} , R^{16} 은 서로 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴을 의미하며;

R^{17} , R^{18} 은 서로 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들을 의미하거나, 또는 두 개의 인접한 잔기들 R^{17} 및/또는 두 개의 인접한 잔기들 R^{18} 은 그것들과 결합된 두 개의 개별 탄소 원자와 함께 각각 서로 독립적으로 5개 또는 6개의 환 원자를 갖는 환형 잔기를 형성하며, 상기 환형 잔기는 한 개, 두 개 또는 세 개의 이중 결합을 가질 수 있고 N, O, SO, SO_2 또는 S으로부터 선택된 한 개 또는 두 개의 헤테로원자 함유 기를 가질 수 있으며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴로부터 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며;

n, m은 서로 독립적으로 0, 1, 2, 3 또는 4를 의미하며;

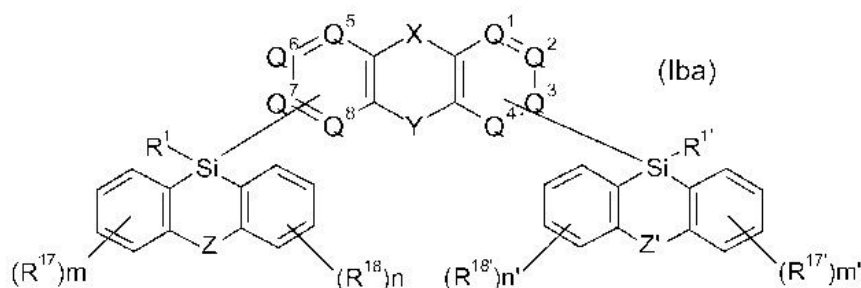
R^1 , $R^{1'}$ 는 서로 독립적으로

- 3개 이상의 축합환으로 형성된 축합환계를 의미하며, 상기 축합환은 서로 독립적으로 4개 내지 10개의 환 원소를 가지며 포화되거나 단일 불포화 또는 다중 불포화되며 치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, $SiR^2R^3R^4$ 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며, 상기 축합환계는 상기 축합환계 자체 내에서 또는 하나 이상의 치환기 내에서 하나 이상의 헤테로원자를 갖고,

- 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴을 의미하고, 상기 기들은 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있는 것인 화합물.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 화합물은 하기 화학식 (Iba)를 갖는 화합물로서,



여기서

X는 S, O 또는 NR^5 를 의미하며;

Y는 하나의 결합 또는 NR^5 , CR^7R^8 , O, SO, SO_2 또는 S를 의미하며;

R^7 , R^8 은 서로 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴을 의미하며;

Q^1 내지 Q^8 은 서로 독립적으로 CR^9 를 의미하며, 여기서 기들 Q^1 , Q^2 , Q^3 또는 Q^4 중 하나 그리고 기들 Q^5 , Q^6 , Q^7 또는 Q^8 중 하나의 각각은 C를 의미하고, 각 Si 함유 환의 Si 원자와 결합하며;

R^5 은 아릴 또는 알킬을 의미하며;

R^9 는 수소, 알킬, 헤테로아릴, 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기, 또는 $SiR^2R^3R^4$ 를 의미하며;

R^2 , R^3 , R^4 는 서로 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴을 의미하며, 상기 잔기들 R^2 , R^3 및 R^4 또는 상기 잔기들 R^2 , R^3 및 R^4 중 두 개의 잔기가 공동으로 2개 내지 6개의 환으로 이루어진 축합 환계를 형성할 수 있으며, 상기 환들은 각각 포화되거나 단일 또는 다중 불포화되며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며;

Z는 하나의 결합을 의미하며;

Z'는 하나의 결합이거나, NR^{14} , $CR^{15}R^{16}$, O, SO, SO_2 , Si 또는 S를 의미하며;

R^{14} 는 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴을 의미하며;

R^{15} , R^{16} 은 서로 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴을 의미하며;

R^{17} , R^{18} , $R^{17'}$, $R^{18'}$ 은 알킬, 헤테로아릴 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들을 의미하거나, 두 개의 인접한 잔기들 R^{17} 및/또는 두 개의 인접한 잔기들 R^{18} 및/또는 두 개의 인접한 잔기들 $R^{17'}$ 및/또는 두 개의 인접한 잔기들 $R^{18'}$ 은 그것들과 결합된 두 개의 개별 탄소 원자와 함께 각각 서로 독립적으로 5개 또는 6개의 환 원자를 갖는 환형 잔기를 형성하며, 상기 환형 잔기는 한 개, 두 개 또는 세 개의 이중 결합을 가질 수 있고 N, O, SO, SO_2 또는 S로부터 선택된 한 개 또는 두 개의 헤테로원자 함유 기를 가질 수 있고 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며;

n, m, n', m'은 서로 독립적으로 0, 1 또는 2를 의미하며;

R^1 , $R^{1'}$ 은 서로 독립적으로 알킬, 아릴 또는 헤테로아릴을 의미하며;

Y 및 Z'은 동시에 하나의 결합이 아닌 것인 화합물.

청구항 3

제2항에 있어서,

X는 S, O 또는 NR^5 를 의미하며;

Y는 NR^5 , CR^7R^8 , O 또는 S를 의미하며;

Q^1 내지 Q^8 은 서로 독립적으로 CR^9 를 의미하며, 여기서 기들 Q^1 , Q^2 , Q^3 또는 Q^4 중 하나 그리고 기들 Q^5 , Q^6 , Q^7 또는 Q^8 중 하나의 각각은 C를 의미하고, 각 Si 함유 환의 Si 원자와 결합하며;

R^9 는 수소를 의미하며;

R^7 , R^8 은 수소를 의미하며;

Z는 하나의 결합을 의미하며;

Z'는 하나의 결합을 의미하며;

R^5 은 아릴 또는 알킬을 의미하며;

n, m, n', m'은 0을 의미하며;

R^1 , $R^{1'}$ 은 서로 독립적으로 알킬 또는 아릴을 의미하는 것인 화합물.

청구항 4

제2항 또는 제3항에 있어서, Y는 NR^5 를 의미하는 것인 화합물.

청구항 5

제2항에 있어서, R^9 는 수소, 알킬, 헤테로아릴을 의미하는 것인 화합물.

청구항 6

제2항에 있어서, R^9 는 수소를 의미하는 것인 화합물.

청구항 7

제2항에 있어서,

Y는 하나의 결합을 의미하며;

Z'는 NR^{14} , $\text{CR}^{15}\text{R}^{16}$, O, SO, SO_2 , Si 또는 S를 의미하는 것인 화합물.

청구항 8

제2항에 있어서,

Z'는 하나의 결합을 의미하며;

Y는 NR^5 , CR^7R^8 , O, SO, SO_2 또는 S를 의미하는 것인 화합물.

청구항 9

제2항에 있어서,

Z'는 NR^{14} 를 의미하며;

R^{14} 는 알킬 또는 아릴을 의미하는 것인 화합물.

청구항 10

제9항에 있어서, R^{14} 는 페닐을 의미하는 것인 화합물.

청구항 11

제2항에 있어서,

X는 S, O 또는 NR^5 를 의미하며;

Y는 하나의 결합을 의미하며;

R^5 는 아릴 또는 알킬을 의미하며;

Q^1 내지 Q^8 은 서로 독립적으로 CR^9 를 의미하며, 여기서 기들 Q^1 , Q^2 , Q^3 또는 Q^4 중 하나 그리고 기들 Q^5 , Q^6 , Q^7 또는 Q^8 중 하나의 각각은 C를 의미하고, 각 Si 함유 환의 Si 원자와 결합하며;

R^9 는 수소를 의미하며;

Z는 하나의 결합을 의미하며;

Z'는 $\text{CR}^{15}\text{R}^{16}$ 을 의미하며;

R^1 , $R^{1'}$ 는 알킬 또는 아릴을 의미하며;

R^{15} , R^{16} 은 수소를 의미하며;

n , m , n' , m' 는 0을 의미하는 것인 화합물.

청구항 12

제1항에 따른 화학식 (Ib)의 화합물 또는 제2항에 따른 화학식 (Iba)의 화합물을 포함하는 유기전자소자.

청구항 13

제12항에 있어서, 화학식(Ib) 또는 화학식 (Iba)의 화합물이 매트릭스 물질, 정공 차단 물질, 여기자 차단 물질, 또는 정공 및 여기자 차단 물질로 사용되는 것을 특징으로 하는 유기전자소자.

청구항 14

제12항에 있어서, 유기 전자 소자는 유기발광다이오드인 것을 특징으로 하는 유기전자소자.

청구항 15

하나 이상의 이미터 물질 및 하나 이상의 제1항에 따른 화학식 (Ib)의 화합물 또는 제2항에 따른 화학식 (Iba)의 화합물을 포함하는 발광층.

청구항 16

제14항에 따른 하나 이상의 유기발광다이오드를 포함하면서, 고정식 영상표시장치와 이동식 영상표시장치로 이루어진 군으로부터 선택되는 장치.

청구항 17

삭제

청구항 18

삭제

청구항 19

삭제

청구항 20

삭제

발명의 설명

기술 분야

[0001]

본 발명은 유기전자소자에서 바람직하게는 매트릭스 물질 및/또는 정공차단물질/여기자 차단 물질로서 축합환계로 치환된 실롤의 용도, 애노드(An), 캐소드(Ka) 및 상기 애노드(An)와 상기 캐소드(Ka) 사이에 배치된 발광층(E) 그리고 경우에 따라서 추가 층으로서 하나 이상의 정공/여기자 차단층을 포함하면서 이 때 상기 발광층 및/또는 - 해당하는 경우 - 하나 이상의 상기 정공/여기자 차단층에 제공되는 화학식(I)의 하나 이상의 실롤 화합물을 함유하는 유기발광다이오드, 하나 이상의 본 발명에 따른 유기발광다이오드를 포함하면서 고정식 영상표시장치, 이동식 영상표시장치 및 조명장치로 이루어진 군으로부터 선택되는 장치 그리고 축합환계로 치환된 특정한 실롤에 관한 것이다.

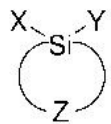
배경 기술

[0002]

유기전자공학은 고분자나 소형 유기 화합물들을 갖는 전자회로를 사용하는 전자공학의 한 분야이다. 유기발광다이오드(OLED)에서 고분자나 소형 유기 화합물의 사용, 유기 태양 전지(유기 태양광발전)에서의 응용, 그리고 예

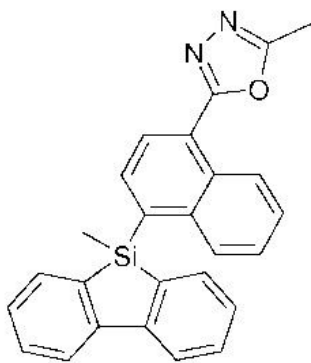
컨대 유기 FET 및 유기 TFT를 포함하는 유기 트랜지스터와 같은 스위칭 소자에서의 응용이 유기전자공학의 응용 영역에 속한다.

- [0003] 신규하고 적합한 유기 물질을 사용함으로써 디스플레이, 센서, 트랜지스터, 데이터 메모리 또는 태양광발전전지와 같은 유기전자공학에 기반을 둔 다양한 신규 소자들이 제공될 수 있다. 이를 통해, 얇고 가벼우면서 플렉서블하고 낮은 비용으로 제조가능한 새로운 응용물의 개발이 가능하다.
- [0004] 본 출원에 따른 한 바람직한 응용 영역은 유기발광다이오드 내에 소형 유기 화합물들을 사용하는 것이다.
- [0005] 유기발광다이오드(OLED)에서 전류에 의해 여기될 때 광을 방출하는 물질들의 특성이 활용된다. OLED는 특히 평면 스크린 제조를 위한 브라운관 및 액정 디스플레이의 대안으로서 중요하다. 매우 콤팩트한 구조 및 고유의 낮은 전력 소모 때문에 OLEDs를 포함하는 장치들은, 특히, 예컨대 휴대전화와 노트북 등과 같은 이동성 장치 및 조명장치에 적합하다.
- [0006] OLEDs 기본 작동 원리 및 OLEDs의 적합한 구조들(층들)이 WO 2005/113704 및 상기 특허의 인용 문헌에 언급되어 있다.
- [0007] 발광 물질들(이미터)로서 형광물질(형광 이미터) 이외에 인광 물질들(인광 이미터)이 사용될 수 있다. 인광 이미터는 통상적으로 단일항 방출(singlet emission)을 갖는 형광 이미터와 달리 삼중항 방출(triplet emission)을 갖는 금속유기착체(metallorganic complex)이다(M.A. Baldo et al., Appl. Phys. Lett. 1999, 75, 4-6). 양자역학적 근거로 볼 때 인광 이미터를 사용할 경우에는 4배에 달하는 양자-, 에너지- 및 전력 효율이 달성된다.
- [0008] 긴 유효수명, 높은 효율, 온도 부하에 대한 높은 안정성 그리고 낮은 역치 전압 및 구동 전압을 가지며, 특히 전자기 스펙트럼의 청색 영역에서 빛을 방출하는 유기발광다이오드에 대한 관심이 높다.
- [0009] 앞서 언급한 특성들을 실무에서 실시하기 위해서는 적합한 이미터 물질들을 제공해야 할 뿐만 아니라 OLED의 다른 성분들(보상 물질들)이 적합한 장치 조성물 내에서 서로 정합되어야 한다. 이러한 장치 조성물은 예컨대 고유의 발광체를 분산된 형태로 제공하는 특정한 매트릭스 물질들을 포함할 수 있다. 또한 이러한 조성물은 차단 물질들을 포함할 수 있으며, 이때 정공 차단체, 여기자 차단체 및/또는 전자 차단체가 상기 장치 조성물 내에 존재할 수 있다. 이와 더불어 또는 이에 대한 대안으로서 상기 장치 조성물은 정공 주입 물질들 및/또는 전자 주입 물질들 및/또는 예컨대 정공 전도 물질 및/또는 전자 전도 물질과 같은 전하 수송 물질들을 포함할 수 있다. 이때 고유의 발광체와 결합하여 사용되는 상기 물질들의 선택은 특히 OLEDs의 효율 및 수명에 큰 영향을 미친다.
- [0010] OLEDs의 다양한 층들 내에 사용되고 유기전자공학의 다른 응용물에 사용되는 수많은 다양한 물질들이 종래기술에서 제안되었다.
- [0011] JP 2001-172285 A에는 전자 수송 물질로서 실롤이 사용되는 유기발광다이오드가 공지되어 있다. 이 실롤은 아래의 일반 화학식



[0012]

[0013] 을 가지며, 여기서 특히 Si 및 Z로 형성된 환(ring)이 아래의 화학식

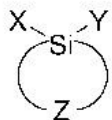


[0014]

[0015] 을 갖는 실물이 공지되어 있다.

[0016] 정공 차단 물질 또는 매트릭스 물질로서 실물이 사용되는 경우는 JP 2001-172285 A에 언급되어 있지 않다.

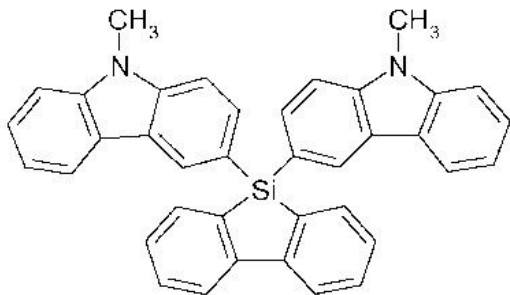
[0017] JP 2001-172284에는 유기발광다이오드의 정공 수송 화합물로서 실물이 사용되는 경우가 공지되어 있다. 이 실물들은 아래의 일반 화학식



[0018]

[0019] 을 갖는다.

[0020] 특히 JP 2001-172284 A에는 아래의 구조



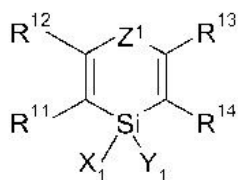
[0021]

[0022] 를 갖는 실물이 공지되어 있다.

[0023] JP 2001-172284에 언급된, 정공 차단 물질 또는 매트릭스 물질로서의 실물이 사용되는 경우는 JP 2001-172284 A에 공지되어 있지 않다. JP 2001-172284 A에 기술된 예들에 따르면 이 실물은 통상적으로 OLEDs의 정공 수송 물질로서 사용되는 TPD 및 PVK의 대용물로서 사용된다.

[0024] X.Zhan et al., J. Am. Chem. Soc. 2005, 127, 9021-9029에는 1,1-디아틸-2,3,4,5-테트라페닐실롤의 전자 구조의 실험적이고 이론적인 특성들이 공지되어 있다. X.Zhan et al.에 따르면 이 화합물들은 유기전자공학에 사용되는 전자 수송 물질들을 나타낸다. X.Zhan et al.에 공지된 실물이 정공 차단 물질 또는 매트릭스 물질로서 적합한가에 대하여는 언급되어 있지 않다.

[0025] JP 2003-243178 A에는 우수한 발광성 및 긴 발광수명을 가지며 발광층 또는 전자 수송층의 매트릭스로서 아래의 일반 화학식



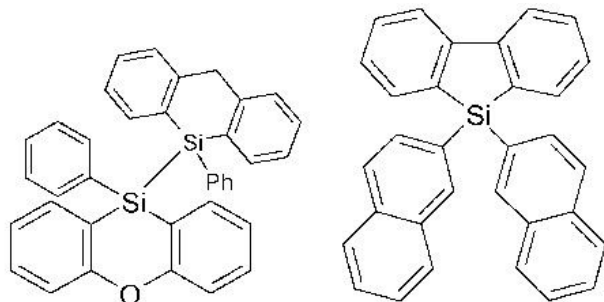
[0026]

[0027]

[0028]

의 실물을 갖는 유기발광다이오드가 공지되어 있다.

바람직한 실물은 예컨대 아래의 일반 화학식



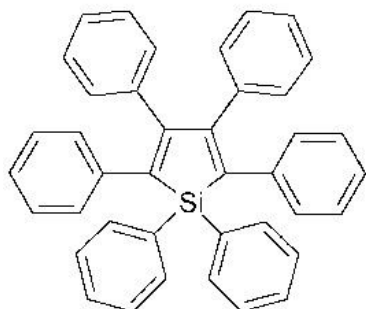
[0029]

[0030]

[0031]

을 갖는다.

JP 2003-243178 A의 예들에 따르면 아래의 화학식



[0032]

[0033]

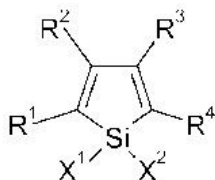
의 실물이 사용된다.

[0034]

JP 2003-243178 A에 따라 매트릭스 물질로 공지되어 있는 수많은 상이한 실물들 중에서, Si에서 O, S, N 및 P에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 축합 3환구조로 치환된 실물은 공지되어 있지 않다.

[0035]

EP 1 740 019 A1은 매트릭스로서 하나 이상의 실리카시클로펜다디엔 유도체를 그리고 도핑 재료로서 하나 이상의 아민을 갖는 발광층을 포함하는 유기발광다이오드에 관한 것이다. 실리카시클로펜다디엔 유도체는 아래의 화학식



[0036]

[0037]

을 갖는다.

[0038]

특히 X^1 및 X^2 는 3개 내지 50개의 탄소 원자를 갖는 이종환(heteroring)일 수 있으나, EP 1 740 019 A1에는 X^1 및/또는 X^2 에 대해 3개의 축합환을 갖는 이종환은 언급되지 않는다. EP 1 740 019 A1에 기술된 모든 화합물 관련 예에서 X^1 및 X^2 는 페닐 또는 알킬, 특히 메틸을 의미한다.

[0039] EP 0 754 691 A2 및/또는 EP 1 143 538 A1에는 실라시클로펜타디엔 유도체 및 유기발광다이오드에서의 그 용도가 공지되어 있다. EP 0 754 691 A2에 따른 실라시클로펜타디엔 유도체는 아래의 일반 화학식



[0040] 을 갖는다.
[0041]

[0042] X 및 Y는 특히 이종고리일 수 있으며, 여기서 축합 3환식(tricyclic) 이종고리는 언급되지 않는다.

[0043] EP 0 754 691 A2에 기술된 예들에서 실질적으로 3,4-디페닐실라시클로펜타디엔 또는 9,9'-실라스피로비플루오렌이 사용된다. EP 0 754 691 A2에 따르면 앞서 언급한 실라시클로펜타디엔은 발광층의 전자 수송층 또는 정공 차단층 내에 사용될 수 있다.

[0044] 따라서 종래기술로부터 실물 화합물이 유기발광다이오드의 다양한 층들에서 사용될 수 있음을 알 수 있다. 이때 OLEDs의 다양한 층들에서 실물 화합물들이 사용되는 경우가 언급된다.

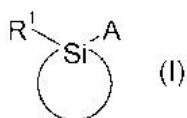
발명의 내용

해결하려는 과제

[0045] 진술한 종래기술과 관련하여 본 발명의 목적은 OLEDs 및 유기전자소자에서 사용되기에 적합한 추가의 물질들을 제공하는 것이다. 특히 OLEDs에서 사용되는 정공 차단 물질 및 매트릭스 물질들을 제공하는 것이다. 이 물질들은 특히 하나 이상의 인광 이미터, 특히 하나 이상의 녹색 또는 청색 이미터를 포함하는 OLEDs에 적합하다. 따라서 특히 높은 삼중항 에너지를 갖는 OLEDs를 위한 매트릭스 물질 및/또는 정공 차단 물질을 제공할 것이다. 또한 이 물질들은 높은 효율, 우수한 작업 유효수명 그리고 온도 부하에 대한 높은 안정성 및 OLEDs의 낮은 역치 전압 및 구동 전압을 보장하는 OLDEs를 제공하기 위해 적합할 것이다.

과제의 해결 수단

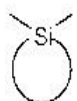
[0046] 상기 목적은 아래의 일반 화학식(I)



[0047] 의 화합물의 용도에 의해 달성되며, 여기서
[0048]

[0049] A는 3개 이상, 바람직하게는 3개 또는 4개, 특히 바람직하게는 3개의 축합환으로 형성된 축합환계를 의미하며, 상기 축합환은 서로 독립적으로 4개 내지 10개, 바람직하게는 5개 내지 7개, 특히 바람직하게는 5개 또는 6개의 환 원소를 가지며 포화되거나 단일 불포화 또는 다중 불포화되며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, $\text{Si}^2\text{R}^3\text{R}^4$ 그리고 공여체 또는 수용체 효과를 갖는 기들, 바람직하게는 알킬, 헤테로아릴, $\text{Si}^2\text{R}^3\text{R}^4$ 그리고 알콕시, 아미노, 할로젠 또는 유사할로젠과 같은 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며, 여기서

[0050] 상기 축합환계는 상기 축합환계 자체 내에서 또는 바람직하게는 상기 축합환계 자체 내의 하나 이상의 치환기 내에서 바람직하게는 O, S, N 및 P, 특히 바람직하게는 O, S 및 N, 매우 바람직하게는 S 및 O으로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 가지며;



[0051] 은 4개 내지 10개, 바람직하게는 5개 내지 7개, 특히 바람직하게는 5개 또는 6개, 매우 바람직하게는

5개의 환 원소를 갖는 Si 함유 환을 의미하며, 상기 환은 포화되거나 단일 불포화 또는 다중 불포화될 수 있으며 Si 원자 이외에 바람직하게는 O, S 및 N, 특히 바람직하게는 O 및 N으로부터 선택된 하나 또는 다수의 추가 헤테로원자를 가질 수 있으며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 치환기로 치환될 수 있으며, 상기 Si 함유 환은 또한 두 개 이상, 바람직하게는 두 개 또는 세 개, 특히 바람직하게는 세 개의 환으로 형성된 축합환계의 일부일 수 있으며, 상기 추가 환은 축합환계 내에서 서로 독립적으로 포화되거나 단일 불포화 또는 다중 불포화되며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 치환기로 치환될 수 있으며 바람직하게는 O, S 및 N, 특히 바람직하게는 S 및 N으로부터 선택된 하나 또는 다수의 헤테로원자를 가질 수 있으며;

[0052] R^1 은 A, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 특히 바람직하게는 메틸, 페닐, 나프틸, 인데닐, 벤조푸릴, 벤조티에닐, 벤조피롤릴, 디벤조푸릴, 디벤조티에닐, 카바졸일, 아자카바졸일, 페난스플리닐 또는 플루오레닐, 매우 바람직하게는 메틸, 페닐, 디벤조푸릴, 디벤조티에닐, 카바졸일 또는 아자카바졸일을 의미하며;

[0053] R^2 , R^3 , R^4 는 서로 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴을 의미하며, 상기 잔기들 R^2 , R^3 및 R^4 또는 상기 잔기들 R^2 , R^3 및 R^4 중 두 개의 잔기가 공동으로 2개 내지 6개의 환, 바람직하게는 2개 내지 3개의 환으로 이루어진 축합환계를 형성할 수 있으며, 상기 환들은 각각 포화되거나 단일 또는 다중 불포화되며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있는데, 이때

[0054] 상기 화학식(I)의 화합물이 바람직하게는 예컨대 유기 FET 및 유기 TFT를 포함하는 유기 트랜지스터와 같은 스위칭 소자, 유기 광전지 및 유기발광다이오드로부터 선택된 유기전자소자에서 사용되며 유기발광다이오드에서 바람직하게 매트릭스 물질 및/또는 정공/여기자 차단 물질로서 사용된다.

[0055] 여기서 축합환계를 갖는 실물이 세 개 이상의 축합환으로 형성되고, 상기 축합환계가 O, S, N, SO, SO₂ 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자 함유 기를 갖도록 제공된 화학식(I)의 화합물은 전하 캐리어의 전도성이 요구되는 분야에 사용되기에 아주 적합하며, 특히 예컨대 유기 FET 및 유기 TFT를 포함하는 유기 트랜지스터와 같은 스위칭 소자, 유기 광전지 및 유기발광다이오드(OLED)로부터 선택된 유기전자소자에 사용되기에 적합하다는 사실이 발견되었으며, 이때 화학식(I)의 화합물은 OLEDs 내에서 특히 인광 이미터와 함께 매트릭스 물질 및/또는 정공 및/또는 여기자 차단 물질로서 사용되기에 특히 적합하다. 화학식(I)의 화합물을 사용하면 높은 효율과 긴 수명을 갖는 유기발광다이오드(OLEDs)가 달성된다. 화학식(I)의 화합물이 OLEDs 내에서 매트릭스 물질 및/또는 정공 및/또는 여기자 차단 물질로서 아주 적합하다는 사실이 특히 JP 2001-172284 A와 크게 관련되는데, 상기 문헌에 화학식(I)의 화합물과 밀접하게 관련된 실물 유도체가 정공 수송 물질로서 사용되는 경우가 공지되어 있다.

[0056] 앞서 언급한 유기전자소자에서 사용되며 축합환계로 치환된 본 발명에 따른 화학식(I)의 실물은 유기전자소자, 특히 OLEDs 내에서 매트릭스 물질 및/또는 정공/여기자 차단 물질로서 사용되기에 매우 적합하다는 것을 특징으로 한다. 특히 본 발명에 따라 사용된 화학식(I)의 실물 화합물은 박막층에서 높은 비정질성(amorphization)을 지니며 사용하기가 용이하다. 따라서 유기전자소자, 특히 OLEDs의 최적의 성능이 달성된다. 본 발명에 따라 제공된 화학식(I)의 실물 화합물은 특히 높은 효율과 긴 수명을 갖는 OLEDs의 제공을 위해 적합하다. 또한 본 발명에 따라 사용된 화학식(I)의 실물 화합물은 바람직하게는 전자 여기된 삼중항 상태(T_1)와 기저 상태(S_0) 간의 큰 에너지 편차를 가지며, 이로써 상기 실물 화합물은 예컨대 녹색 이미터 및 청색 이미터를 위한 매트릭스 또는 정공/여기자 차단 물질로서 사용되도록 고려된다. 또한 화학식(I)의 실물 화합물은 스위칭 소자와 유기 광전지로부터 선택된 유기전자소자에서 전도체/보상물질로서 사용될 수도 있다.

[0057] 본 출원의 의미에서 비치환되거나 치환된 아릴 잔기 또는 아릴기, 비치환되거나 치환된 헤테로아릴 잔기 또는 헤테로아릴기, 비치환되거나 치환된 알킬 잔기 또는 알킬기, 비치환되거나 치환된 시클로알킬 잔기 또는 시클로알킬기, 비치환되거나 치환된 헤테로시클로알킬 잔기 또는 헤테로시클로알킬기, 비치환되거나 치환된 알케닐 잔기 또는 알케닐기, 비치환되거나 치환된 알킬닐 잔기 또는 알킬닐기, 비치환되거나 치환된 아르알킬 잔기 또는 아르알킬기 그리고 공여체 및/또는 수용체 작용을 갖는 기들의 의미는 하기와 같다:

[0058] 아릴 잔기(또는 아릴기)란 6개 내지 30개, 바람직하게는 6개 내지 18개의 탄소 원자로 이루어진 군본 구조를 갖

는 잔기를 의미하며, 상기 잔기는 하나의 방향족 환 또는 다수의 축합 방향족 환으로 형성된다. 적합한 기본 구조는 예컨대 페닐, 나프틸, 안트라세닐 또는 페난스레닐, 인데닐 또는 플루오레닐이다. 이러한 기본 구조는 비치환될 수 있거나(즉 치환이능한 모든 탄소 원자들이 수소 원자를 가짐) 기본 구조의 하나의, 다수의 또는 모든 치환이능한 위치에서 치환될 수 있다. 적합한 치환기는 예컨대 듀테륨, 알콕시 잔기, 아릴옥시 잔기, 알킬아미노기, 아릴아미노기, 카바졸일기, 실릴기, $\text{SiR}^2\text{R}^3\text{R}^4$ - 적합한 실릴기 $\text{SiR}^2\text{R}^3\text{R}^4$ 은 아래에서 언급됨 -, 알킬 잔기, 바람직하게는 1개 내지 8개의 탄소 원자를 갖는 알킬 잔기, 특히 바람직하게는 메틸, 에틸 또는 i-프로필, 아릴 잔기, 바람직하게는 C_6 -아릴 잔기 - 치환되거나 비치환될 수 있음 -, 헤테로아릴 잔기, 바람직하게는 하나 이상의 질소 원자를 포함하는 헤테로아릴 잔기, 특히 바람직하게는 피리딜 잔기 및 카바졸일 잔기, 알케닐 잔기, 바람직하게는 이중 결합을 갖는 알케닐 잔기, 특히 바람직하게는 이중 결합 및 1개 내지 8개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 잔기, 알키닐 잔기, 바람직하게는 삼중 결합을 갖는 알키닐 잔기, 특히 바람직하게는 삼중 결합 및 1개 내지 8개의 탄소 원자를 갖는 알키닐 잔기 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기이다. 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 적합한 기는 아래에 언급된다. 매우 바람직하게는 치환된 아릴 잔기가 메틸, 에틸, 이소프로필, 알콕시, 헤테로아릴, 할로젠, 유사할로젠 및 아미노, 바람직하게는 아릴아미노로 이루어진 군으로부터 선택된 치환기를 갖는다. 바람직하게는 아릴 잔기 또는 아릴기는 C_6 - C_{18} -아릴 잔기, 특히 바람직하게는 C_6 -아릴 잔기이며, 상기 아릴 잔기는 경우에 따라 전술한 치환기들 중 적어도 하나 또는 다수의 치환기로 치환된다. 특히 바람직하게는 C_6 - C_{18} -아릴 잔기, 바람직하게는 C_6 -아릴 잔기는 전술한 치환기들 중 하나도 갖지 않거나 한 개, 두 개, 세 개 또는 네 개의 치환기를 가지며, 매우 바람직하게는 하나도 갖지 않거나 한 개 또는 두 개의 치환기를 갖는다.

[0059] 헤테로아릴 잔기 또는 헤테로아릴기는 아릴 잔기의 기본 구조에서 하나 이상의 탄소 원자가 헤테로원자에 의해 대체되고 헤테로아릴 잔기의 기본 구조가 바람직하게는 5개 내지 18개의 환 원자를 가짐으로써 전술한 아릴 잔기와 구별된다. 바람직한 헤테로원자는 N, O 및 S이다. 특히 바람직하게 적합한 헤테로아릴 잔기는 질소를 함유하는 헤테로아릴 잔기이다. 매우 바람직하게는 기본 구조의 한 개 또는 두 개의 탄소 원자가 헤테로원자, 바람직하게는 질소에 의해 대체된다. 특히 바람직하게 기본 구조는 피리딘, 피리미딘 및 피롤, 푸란, 피라졸, 이미다졸, 티오펜, 옥사졸, 티아졸, 트리아졸과 같은 5-원 헤테로방향족과 같은 시스템으로부터 선택된다. 또한 헤테로아릴 잔기는 예컨대 벤조푸릴-, 벤조티에닐-, 벤조피롤릴-, 디벤조푸릴-, 디벤조티에닐-, 페난스롤리닐-, 카바졸일 잔기 또는 아자카바졸일 잔기와 같은 축합환계를 가리킨다. 이러한 기본 구조는 기본 구조의 하나의, 다수의 또는 모든 치환이능한 위치에서 치환될 수 있다. 적합한 치환기는 아릴기에 관련하여 전술된 내용과 동일하다.

[0060] 알킬 잔기 또는 알킬기는 1개 내지 20개, 바람직하게는 1개 내지 10개, 특히 바람직하게는 1개 내지 8개, 매우 바람직하게는 1개 내지 4개의 탄소 원자를 갖는 잔기를 의미한다. 이러한 알킬 잔기는 분지형(branched) 또는 비분지형(unbranched)일 수 있고 경우에 따라서는 하나 또는 다수의 헤테로원자, 바람직하게는 Si, N, O 또는 S, 특히 바람직하게는 N, O 또는 S로 나누어질 수 있다. 또한 이러한 알킬 잔기는 알킬기에 관련하여 전술한 치환기들 중 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있다. 또한 알킬 잔기는 하나 또는 다수의 (헤테로-)아릴기를 가질 수 있다. 따라서 본 출원의 의미에서 예컨대 벤질 잔기는 치환된 알킬 잔기를 의미한다. 이때 전술한 모든 (헤테로-)아릴기들이 적합하다. 특히 바람직하게 알킬 잔기는 메틸, 에틸, 이소 프로필, n-프로필, n-부틸, 이소 부틸 및 t-부틸, 매우 바람직하게는 메틸 및 에틸로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0061] 시클로알킬 잔기 또는 시클로알킬기는 3개 내지 20개, 바람직하게는 3개 내지 10개, 매우 바람직하게는 3개 내지 8개의 탄소 원자를 갖는 잔기를 의미한다. 이러한 기본 구조는 비치환될 수 있거나(즉 치환이능한 모든 탄소 원자들이 수소 원자를 가짐) 기본 구조의 하나의, 다수의 또는 모든 치환이능한 위치에서 치환될 수 있다. 적합한 치환기는 아릴 잔기와 관련하여 전술한 기들이다. 또한 시클로알킬 잔기는 하나 또는 다수의 (헤테로-)아릴기를 가질 수 있다. 적합한 시클로알킬 잔기에 대한 예는 시클로프로필, 시클로펜틸 및 시클로헥실이다.

[0062] 헤테로시클로알킬 잔기 또는 헤테로시클로알킬기는 시클로알킬 잔기의 기본 구조에서 하나 이상의 탄소 원자가 헤테로원자로 대체됨으로써 전술한 시클로알킬 잔기와 구별되는 잔기를 의미한다. 바람직한 헤테로원자는 N, O 및 S이다. 매우 바람직하게는 시클로알킬 잔기의 기본 구조의 한 개 또는 두 개의 탄소 원자가 헤테로원자로 대체된다. 적합한 헤테로시클로알킬 잔기에 대한 예는 피롤리딘, 피페리딘, 피페라진, 테트라히드로푸란, 디옥산으로부터 유도된 잔기이다.

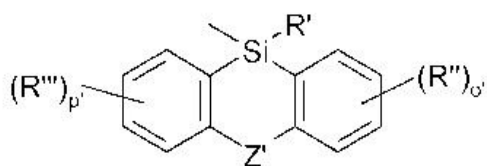
[0063] 알케닐 잔기 또는 알케닐기는 두 개 이상의 탄소 원자를 갖는 전술한 알킬 잔기에 상응하는 잔기를 의미하며, 이때 알킬 잔기의 하나 이상의 C-C 단일결합이 C-C 이중결합으로 대체된다는 차이가 있다. 바람직하게는 알케닐

잔기는 한 개 또는 두 개의 이중결합을 갖는다.

[0064] $\text{SiR}^2\text{R}^3\text{R}^4$ 는 실릴 잔기를 의미하며, 여기서

[0065] R^2 , R^3 및 R^4 는 서로 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴을 의미하며, 여기서 잔기들 R^2 , R^3 및 R^4 또는 잔기들 R^2 , R^3 및 R^4 중 두 개의 잔기는 또한 공동으로 2개 내지 6개, 바람직하게는 2개 내지 3개의 환으로 이루어진 축합환계를 형성할 수 있으며, 상기 환은 각각 포화되거나 단일 또는 다중 불포화되며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며; 바람직하게는 - 축합환계가 존재할 경우에 - 세 개의 잔기들 R^2 , R^3 및 R^4 중 두 개의 잔기는 축합환계를 형성하며, 그 중 나머지 세 번째 잔기는 전술한 의미들 중 하나의 의미를 갖는다.

[0066] 특히 바람직한 잔기 $\text{SiR}^2\text{R}^3\text{R}^4$ 는 아래의 화학식



[0067]

[0068] 을 가지며, 여기서

[0069] R' 은 서로 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 바람직하게는 알킬 또는 아릴을 의미하며;

[0070] R'' , R''' 은 서로 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기, 바람직하게는 알킬, 헤테로아릴 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기를 의미하며;

[0071] Z' 는 하나의 결합이거나 NR'''' , CR''''_2 , O, SO, SO_2 , Si 또는 S, 바람직하게는 하나의 결합을 의미하며;

[0072] R'''' 은 서로 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 알킬 또는 아릴을 의미하며;

[0073] R''''' 은 서로 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 알킬 또는 아릴을 의미하며;

[0074] o, p는 서로 독립적으로 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 특히 바람직하게는 0을 의미한다. .

[0075] 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기 또는 치환기는 본 출원의 의미에서 아래의 기들을 의미할 수 있다:

[0076] 공여체 작용을 갖는 기는 +I 및/또는 +M 효과를 갖는 기를 의미하며, 수용체 작용을 갖는 기는 -I 및/또는 -M 효과를 갖는 기를 의미한다. 바람직하게 적합한 기들은 $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ -알콕시, $\text{C}_6\text{-C}_{30}$ -아릴콕시, $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ -알킬티오, $\text{C}_6\text{-C}_{30}$ -아릴티오, $\text{SiR}^{20}\text{R}^{21}\text{R}^{22}$, 할로젠 잔기, 할로젠화된 $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ -알킬 잔기, 카보닐($-\text{CO}(\text{R}^{20})$), 카보닐티오($-\text{C}=\text{O}(\text{SR}^{20})$), 카보닐콕시($-\text{C}=\text{O}(\text{OR}^{20})$), 옥시카보닐($-\text{OC}=\text{O}(\text{R}^{20})$), 티오키카보닐($-\text{SC}=\text{O}(\text{R}^{20})$), 아미노($-\text{NR}^{20}\text{R}^{21}$), 유사할로젠 잔기, 아미도($-\text{C}=\text{O}(\text{NR}^{20})$), $-\text{NR}^{20}\text{C}=\text{O}(\text{R}^{21})$, 포스포네이트($-\text{P}(\text{O})(\text{OR}^{20})_2$), 포스페이트($-\text{OP}(\text{O})(\text{OR}^{20})_2$), 포스핀($-\text{PR}^{20}\text{R}^{21}$), 포스핀옥사이드($-\text{P}(\text{O})\text{R}^{20}_2$), 셀레이트($-\text{OS}(\text{O})_2\text{OR}^{20}$), 설포사이드($-\text{S}(\text{O})\text{R}^{20}$), 설포네이트($-\text{S}(\text{O})_2\text{OR}^{20}$), 설포닐($-\text{S}(\text{O})_2\text{R}^{20}$), 설포아미드($-\text{S}(\text{O})_2\text{NR}^{20}\text{R}^{21}$), NO_2 , 붕산에스테르($-\text{OB}(\text{OR}^{20})_2$), 이미노($-\text{C}=\text{NR}^{20}\text{R}^{21}$), 보레인 잔기, 스타난 잔기, 하이드라진 잔기, 하이드라존 잔기, 옥심 잔기, 니트로소기, 디아조기, 비닐기, 설폭시민, 알렌, 저메인(germane), 보록사임(boroxime) 및 보라진으로부터 선택된다.

[0077] 전술한 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기의 잔기들 R^{20} , R^{21} 및 R^{22} 은 서로 독립적으로

[0078] 치환되거나 비치환된 $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ -알킬 또는 치환되거나 비치환된 $\text{C}_6\text{-C}_{30}$ -아릴을 의미하며, 여기서 적합하고 바람직한

알킬 잔기 및 아릴 잔기는 앞서 언급되었다. 특히 바람직하게는 잔기들 R^{20} , R^{21} 및 R^{22} 는 C_1 - C_6 -알킬, 예컨대 메틸, 에틸 또는 *i*-프로필 또는 페닐을 의미한다. 한 바람직한 실시예에서 $-SiR^{20}R^{21}R^{22}$ 의 경우에 $-R^{20}$, R^{21} 및 R^{22} 는 바람직하게 서로 독립적으로 치환되거나 비치환된 C_1 - C_{20} -알킬 또는 치환되거나 비치환된 아릴, 바람직하게는 페닐을 의미한다.

[0079] 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 바람직한 치환기는

[0080] C_1 - 내지 C_{20} -알콕시, 바람직하게는 C_1 - C_6 -알콕시, 특히 바람직하게는 에톡시 또는 메톡시; C_6 - C_{30} -아릴콕시, 바람직하게는 C_6 - C_{10} -아릴콕시, 특히 바람직하게는 페닐콕시; $SiR^{20}R^{21}R^{22}$ 으로 이루어진 군으로부터 선택되며, 여기서 R^{20} , R^{21} 및 R^{22} 는 바람직하게는 서로 독립적으로 치환되거나 비치환된 알킬 또는 치환되거나 비치환된 아릴, 바람직하게는 페닐을 의미하며; 특히 바람직하게는 잔기들 R^{20} , R^{21} 또는 R^{22} 중 하나 이상의 잔기가 치환되거나 비치환된 페닐을 의미하며, 매우 바람직하게는 잔기들 R^{20} , R^{21} 및 R^{22} 중 하나 이상의 잔기가 치환된 페닐을 의미하며, 여기서 적합한 치환기가 앞서 언급한 바와 같이 할로젠 잔기, 바람직하게는 F, Cl, 특히 바람직하게는 F, 할로젠화된 C_1 - C_{20} -알킬 잔기, 바람직하게는 할로젠화된 C_1 - C_6 -알킬 잔기, 매우 바람직하게는 플루오르화된 C_1 - C_6 -알킬 잔기, 예컨대 CF_3 , CH_2F , CHF_2 또는 C_2F_5 ; 아미노, 바람직하게는 디메틸아미노, 디에틸아미노 또는 디아릴아미노, 특히 바람직하게는 디아릴아미노; 유사할로젠 잔기, 바람직하게는 CN, $-C(O)OC_1-C_4$ -알킬, 바람직하게는 $-C(O)OMe$, $P(O)R_2$, 바람직하게는 $P(O)Ph_2$ 이다.

[0081] 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 매우 바람직한 치환기는 메톡시, 페닐콕시, 할로젠화된 C_1 - C_4 -알킬, 바람직하게는 CF_3 , CH_2F , CHF_2 , C_2F_5 , 할로젠, 바람직하게는 F, CN, $SiR^{20}R^{21}R^{22}$ (여기서 적합한 잔기들 R^{20} , R^{21} 및 R^{22} 은 앞서 언급되었음), 디아릴아미노($NR^{20}R^{21}$, 여기서 R^{20} , R^{21} 은 각각 C_6 - C_{30} -아릴을 의미함), $-C(O)OC_1-C_4$ -알킬, 바람직하게는 $-C(O)OMe$, $P(O)Ph_2$ 으로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0082] 할로젠기는 바람직하게 F, Cl 및 Br, 특히 바람직하게는 F 및 Cl, 매우 바람직하게는 F를 가리킨다.

[0083] 유사할로젠기는 바람직하게 CN, SCN 및 OCN, 특히 바람직하게는 CN을 가리킨다.

[0084] 앞서 언급한 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들은 본 출원에서 언급된 잔기들과 치환기들 중에서 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들의 목록에 제시되지 않은 잔기들과 치환기들도 공여체 또는 수용체 작용을 가질 수 있다는 사실을 고려한 것이다.

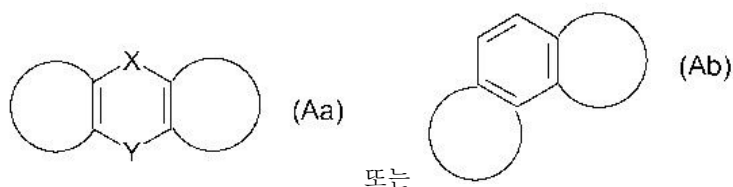
[0085] 아릴 잔기 또는 아릴기, 헤테로아릴 잔기 또는 헤테로아릴기, 알킬 잔기 또는 알킬기, 시클로알킬 잔기 또는 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬 잔기 또는 헤테로시클로알킬기, 알케닐 잔기 또는 알케닐기 그리고 공여체 및/또는 수용체 작용을 갖는 기들은 - 위에 언급된 바와 같이 - 치환되거나 비치환될 수 있다. 본 출원의 의미에서 비치환된 기는 치환이능한 원자가 수소 원자를 갖는 기를 가리킨다. 본 출원의 의미에서 치환된 기는 하나 또는 다수의 치환이능한 원자(들)가 하나 이상의 위치에서 수소 원자 대신에 하나의 치환기를 갖는 기를 가리킨다. 적합한 치환기는 아릴 잔기 또는 아릴기와 관련하여 앞서 언급한 치환기가다.

[0086] 본 출원에 따른 화합물 내에서 동일한 부호를 갖는 잔기들이 여러 번 나오면, 이 잔기들은 각각 서로 독립적으로 앞서 언급한 의미들을 가질 수 있다.

[0087] 일반 화학식(I)의 실물 화합물의 기 A는 3개 이상, 바람직하게는 3개 또는 4개, 특히 바람직하게는 3개의 축합환들로 형성된 축합환계이며, 상기 축합환들은 서로 독립적으로 4개 내지 10개, 바람직하게는 5개 내지 7개, 특히 바람직하게는 5개 또는 6개의 환 원소들을 가지며 포화되거나 단일 또는 다중 불포화되며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, $SiR^2R^3R^4$ 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들, 바람직하게는 알킬, 헤테로아릴, 할로젠, 유사할로젠, 알콕시, 아미노 및 $SiR^2R^3R^4$ 로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며, 여기서 상기 축합환계는 축합환계 자체 내에서 또는 바람직하게는 축합환계 자체 내 하나 이상의 치환기 내에서 하나 이상의 헤테로원자 함유 기, 바람직하게는 O, S, N, P, SO, SO₂ 및 Si, 특히 바람직하게는 O, S 및 N, 매우 바람직하게는 O 및 S로부터 선택된 기를 갖는다.

[0088] 바람직하게는 축합환계가 서로 독립적으로 5개 또는 6개의 환 원소를 갖는 3개의 축합환으로 형성되며, 세 개의 축합환 중 하나 이상의 축합환이 적어도 이중 불포화되며, 상기 축합환계는 S, O, N, SO, SO₂ 및 P, 바람직하게는 S, O 및 N, 특히 바람직하게는 S 및 O로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자 함유 기를 갖는다. 축합환계는 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, SiR²R³R⁴ 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기, 바람직하게는 알킬, 헤테로아릴, 할로젠, 유사할로젠, 알콕시, 아미노 및 SiR²R³R⁴로부터 선택된 앞서 언급한 치환기들을 가질 수 있다.

[0089] 특히 바람직하게는 축합환계(A)은 아래의 화학식(Aa)



[0090]

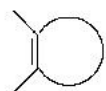
[0091] 를 가지며, 여기서

[0092] X는 S, O, NR⁵, SO, SO₂ 또는 PR⁶, 바람직하게는 S, O 또는 NR⁵, 특히 바람직하게는 S 또는 O를 의미하며;

[0093] Y는 하나의 결합이거나 NR⁵, CR⁷R⁸, O, SO, SO₂ 또는 S, 바람직하게는 NR⁵, S 또는 하나의 결합, 특히 바람직하게는 하나의 결합을 의미하며;

[0094] R⁵, R⁶은 서로 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 아릴 또는 알킬, 특히 바람직하게는 페닐을 의미하며;

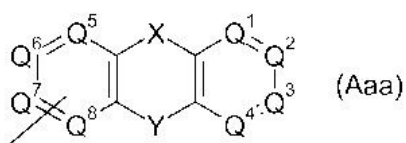
[0095] R⁷, R⁸은 서로 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 아릴 또는 알킬을 의미하며; 그리고



[0096] 는 각각 서로 독립적으로 5개 내지 6개의 환 원소를 갖는 축합환을 의미하며, 상기 축합환은 앞서 언급한 이중 결합 이외에 하나 또는 다수의 이중 결합을 가질 수 있으며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, SiR²R³R⁴ 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들, 바람직하게는 알킬, 헤테로아릴, 할로젠, 유사할로젠, 알콕시, 아미노 및 SiR²R³R⁴로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기, 바람직하게는 한 개 또는 두 개의 치환기로 치환될 수 있으며, 여기서 5개 또는 6개의 환 원자를 갖는 축합환은 또한 5개 또는 6개의 환 원자를 갖는 하나 또는 다수의 추가 축합환과 융합될 수 있으며;

[0097] R², R³, R⁴는 서로 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴을 의미하며, 여기서 잔기들 R², R³ 및 R⁴ 또는 잔기들 R², R³ 및 R⁴ 중 두 개의 잔기는 또한 공동으로 2개 내지 6개, 바람직하게는 2개 내지 3개의 환으로 이루어진 축합환계를 형성할 수 있으며, 상기 환들은 각각 포화되거나 단일 또는 다중 불포화되며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있다.

[0098] 매우 바람직하게는 화학식(I)의 기 A는 아래의 화학식(Aaa)



[0099]

[0100] 을 가지며, 여기서

[0101] X는 S, O, NR^5 , SO, SO_2 또는 PR^6 , 바람직하게는 S, O 또는 NR^5 , 특히 바람직하게는 S 또는 O를 의미하며;

[0102] Y는 하나의 결합이거나 NR^5 , CR^7R^8 , O, SO, SO_2 또는 S, 바람직하게는 하나의 결합이거나 NR^5 , 특히 바람직하게는 하나의 결합을 의미하며;

[0103] Q^1 내지 Q^8 은 서로 독립적으로 CR^9 , N, 바람직하게는 서로 독립적으로 CR^9 을 의미하며, 여기서 기들 $\text{Q}^1, \text{Q}^2, \text{Q}^3$,

$\text{Q}^4, \text{Q}^5, \text{Q}^6, \text{Q}^7$ 또는 Q^8 중 하나의 기에 의해 기 의 Si 원자에 대한 결합이 이루어지고 기들 $\text{Q}^1, \text{Q}^2, \text{Q}^3$, $\text{Q}^4, \text{Q}^5, \text{Q}^6, \text{Q}^7$ 또는 Q^8 은 C를 의미하며;

[0104] R^5, R^6 은 서로 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 아릴 또는 알킬, 특히 바람직하게는 페닐을 의미하며;

[0105] R^7, R^8 은 서로 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 아릴 또는 알킬을 의미하며;

[0106] R^9 는 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, $\text{SiR}^2\text{R}^3\text{R}^4$, 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기, 바람직하게는 수소, 알킬, 헤테로아릴, 할로젠, 유사할로젠, 알콕시, 아미노 또는 $\text{SiR}^2\text{R}^3\text{R}^4$ 를 의미하며;

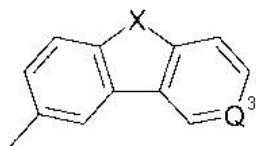
[0107] $\text{R}^2, \text{R}^3, \text{R}^4$ 는 서로 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴을 의미하며, 여기서 잔기들 R^2, R^3 및 R^4 또는 잔기들 R^2, R^3 및 R^4 중 두 개의 잔기는 또한 공동으로 2개 내지 6개, 바람직하게는 2 내지 3개의 환으로 이루어진 축합환계를 형성할 수 있으며, 상기 환들은 각각 포화되거나 단일 또는 다중 불포화되며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있다.

[0108] 한 바람직한 실시예에서 화학식(Aaa)의 기에서 R^9 는 기들 $\text{Q}^1, \text{Q}^2, \text{Q}^4, \text{Q}^5, \text{Q}^6$ 및 Q^8 에서는 수소를 의미하며 기 Q^3

에서는 수소 또는 $\text{SiR}^2\text{R}^3\text{R}^4$ 를 의미하며 Q^7 에서는 C를 의미하고 기 의 Si 원자와 결합한다.

[0109] 기들 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, $\text{SiR}^2\text{R}^3\text{R}^4$ 및 바람직한 실시예에서 화학식(Aa) 및 (Aaa)의 기들에 존재하는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들에 대한 바람직한 실시예들은 앞서 언급되었다.

[0110] 매우 바람직하게는 화학식(Aaa)의 기들은 아래의 의미들:

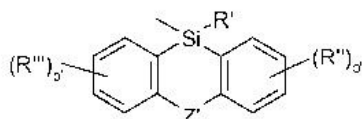


[0111] 을 가지며, 여기서

[0112]

[0113] X는 O, S 또는 NR^5 , 바람직하게는 O 또는 S를 의미하며;

[0114] R^5 는 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 페닐을 의미하며;



[0115] Q^3 은 C-H 또는 을 의미하며;

- [0116] 여기서
- [0117] R'은 서로 독립적으로 알킬 또는 아릴을 의미하며;
- [0118] R'', R'''은 서로 독립적으로 알킬 또는 헤테로아릴 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기를 의미하며;
- [0119] Z'는 하나의 결합이거나 NR''''', CR''''',₂, O, Si 또는 S, 바람직하게는 하나의 결합을 의미하며;
- [0120] R''''는 서로 독립적으로 알킬 또는 아릴을 의미하며,
- [0121] R'''''는 서로 독립적으로 수소, 알킬 또는 아릴을 의미하며;
- [0122] o', p'는 서로 독립적으로 0, 1 또는 2, 바람직하게는 0을 의미한다.
- [0123] 아래의 기



- [0124] 은 화학식(I)의 실물 화합물에서 4개 내지 10개, 바람직하게는 5개 내지 7개, 특히 바람직하게는 5개 또는 6개, 매우 바람직하게는 5개의 환 원소를 갖는 Si 함유 환을 가지며, 여기서 상기 환은 포화되거나 단일 또는 다중 불포화될 수 있고 Si 원자 이외에 바람직하게는 O, S 및 N, 특히 바람직하게는 O 및 N으로부터 선택된 하나 또는 다수의 추가 헤테로원자를 가질 수 있으며, 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며, 여기서 Si 함유 환은 또한 2개 이상, 바람직하게는 2개 또는 3개, 특히 바람직하게는 3개의 환으로 형성된 축합환의 일부일 수 있으며, 상기 추가 환 - Si 함유 환 이외에-가 축합환계 내에서 서로 독립적으로 포화되거나 단일 또는 다중 불포화되며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며 바람직하게는 O, S 및 N, 특히 바람직하게는 S 및 N으로부터 선택된 하나 또는 다수의 헤테로원자를 가질 수 있다.

- [0125] 한 바람직한 실시예에서 아래의 기



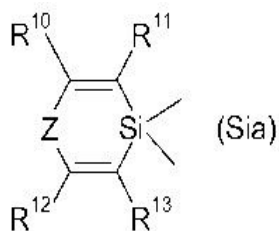
- [0126]
- [0127] 은 일반 화학식(I)에서 5개 또는 6개의 환 원소를 갖는 Si 함유 환을 의미하며, 여기서 상기 환은 적어도 이중 불포화되고 Si 원자 이외에 어떠한 것도 갖지 않거나 S, O, SO, SO₂ 및 N, 바람직하게는 O 및 N으로부터 선택된 추가의 헤테로원자 함유 기를 가지며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며, 여기서 Si 함유 환은 또한 2개 또는 3개, 바람직하게는 3개의 환으로 형성된 축합환계의 일부일 수 있으며, 상기 추가의 환 - Si 함유 환 이외에-가 축합환계 내에서 서로 독립적으로 포화되거나 단일 또는 다중 불포화되며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며 O, S, SO, SO₂ 및 N, 특히 바람직하게는 S 및 N으로부터 선택된 하나 또는 다수의 헤테로원자를 가질 수 있다.

- [0128] 특히 바람직하게는 화학식(I)의 아래의 기



- [0129]

[0130] 은 아래의 화학식(Sia)



[0131]

[0132] 을 가지며, 여기서

[0133] Z는 하나의 결합이거나 NR^{14} , $CR^{15}R^{16}$, O, SO, SO₂, Si 또는 S, 바람직하게는 하나의 결합을 의미하며,

[0134] R^{10} 내지 R^{13} 은 서로 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들을 의미하거나, R^{10} 및 R^{11} 및/또는 R^{12} 및 R^{13} 및/또는 R^{10} 및 R^{12} 는 그것들과 결합된 화학식(Sia)의 Si 함유 환의 두 개의 개별 탄소 원자와 함께 각각 서로 독립적으로 5개 또는 6개의 환 원자를 갖는 환형 잔기를 형성하며, 상기 환형 잔기는 한 개, 두 개 또는 세 개의 이중 결합을 가질 수 있고 N, SO, SO₂ 또는 S, 바람직하게는 N으로부터 선택된 한 개 또는 두 개의 헤테로원자를 가질 수 있고 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며, 여기서 5개 또는 6개의 환 원자를 갖는 환형 잔기는 또한 5개 또는 6개의 환 원자를 갖는 하나 또는 다수의 추가 환형 잔기와 융합될 수 있으며;

[0135] R^{14} 는 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 아릴 또는 알킬, 특히 바람직하게는 페닐을 의미하며; 및

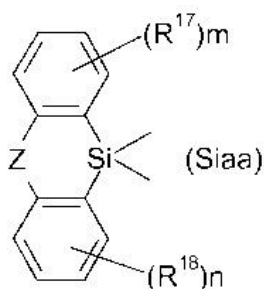
[0136] R^{15} , R^{16} 은 서로 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 페닐 또는 알킬을 의미한다.

[0137] 특히 바람직하게는 화학식(I)의 아래의 기



[0138]

[0139] 은 아래의 화학식(Siaa)



[0140]

[0141] 을 가지며, 여기서

[0142] Z는 하나의 결합이거나 NR^{14} , $CR^{15}R^{16}$, O, SO, SO₂, Si 또는 S, 바람직하게는 하나의 결합을 의미하며;

[0143] R^{14} 는 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 아릴 또는 알킬, 특히 바람직하게는 페닐을 의미하며; 및

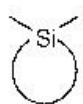
[0144] R^{15} , R^{16} 은 서로 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 아릴 또는 알킬을 의미하며;

[0145] R^{17} , R^{18} 은 서로 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들, 바람직하게는 알킬, 헤테로아릴 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들을 의미하거나, 두 개의 인접한 잔기들 R^{17} 및/또는 두 개의 인접한 잔기들 R^{18} 은 그것들과 결합된 두 개의 개별 탄소 원자와 함께 각각 서로 독립적으로 5개 또는 6개의 환 원자를 갖는 환형 잔기를 형성하며, 상기 환형 잔기는 한 개, 두 개 또는 세 개의 이중 결합을 가질 수 있고 N, O, SO, SO₂ 또는 S, 바람직하게는 N으로부터 선택된 한 개 또는 두 개의 헤테로원자 함유 기를 가질 수 있고 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며;

[0146] n, m은 서로 독립적으로 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 특히 바람직하게는 0 또는 1, 매우 바람직하게는 0을 의미한다.

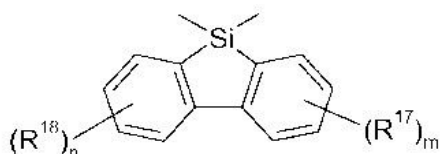
[0147] 앞서 언급한 기들, 즉 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들은 화학식(Sia) 및 (Siaa)에서 앞서 언급한 의미들을 갖는다.

[0148] 화학식(I)의 특히 바람직한 기



[0149]

[0150] 은 아래의 화학식



[0151] 을 가지며,

[0152] 여기서

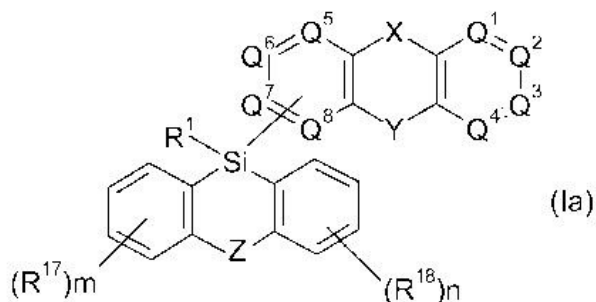
[0153] R^{17} , R^{18} 은 서로 독립적으로 알킬 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들을 의미하며,

[0154] n, m은 서로 독립적으로 0 또는 1, 바람직하게는 0을 의미한다.

[0155] 화학식(I)의 R^1 은 A, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 특히 바람직하게는 알킬, 페닐, 나프틸, 인데닐, 벤조푸릴, 벤조티에닐, 벤조피롤릴, 디벤조푸릴, 디벤조티에닐, 카바졸일, 아자카바졸일, 페난스플리닐 또는 플루오레닐, 매우 바람직하게는 메틸, 페닐, 디벤조푸릴, 디벤조티에닐, 카바졸일 또는 아자카바졸일을 의미한다. 앞서 언급한 기들은 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴로 이루어진 군 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들로부터 선택된 치환기로 치환될 수 있다.

[0156] 앞서 언급한 잔기들 및 기들, 즉 A, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 할로겐 및 유사할로겐과 관련된 바람직한 실시예들은 앞서 언급되었다.

[0157] 따라서 한 바람직한 실시예에서 본 발명은 아래의 화학식(Ia)



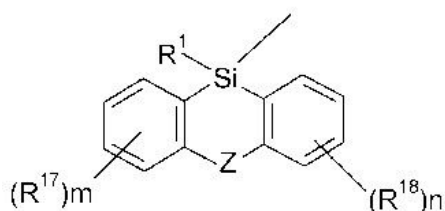
[0158]

[0159] 의 적용과 관련되며, 여기서

[0160] X는 S, O, NR⁵, SO, SO₂ 또는 PR⁶, 바람직하게는 S, O 또는 NR⁵, 특히 바람직하게는 S 또는 O를 의미하며;

[0161] Y는 하나의 결합, NR⁵, CR⁷R⁸, O, SO, SO₂ 또는 S, 바람직하게는 하나의 결합 또는 NR⁵, 특히 바람직하게는 하나의 결합을 의미하며;

[0162] Q¹ 내지 Q⁸은 서로 독립적으로 CR⁹ 또는 N, 바람직하게는 서로 독립적으로 CR⁹을 의미하며, 여기서 기들 Q¹ 내지 Q⁸ 중 하나에 의해 아래의 기



[0163]

[0164] 의 Si 원자와의 결합이 이루어지며, 상기 기는 C를 의미하며;

[0165] R⁵, R⁶은 서로 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 아릴 또는 알킬, 특히 바람직하게는 페닐을 의미하며;

[0166] R⁷, R⁸은 서로 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 알킬 또는 아릴을 의미하며;

[0167] R⁹는 서로 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, SiR²R³R⁴ 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기, 바람직하게는 수소, 알킬, 헤테로아릴, 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기 또는 SiR²R³R⁴을 의미하며;

[0168] R², R³, R⁴는 서로 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴을 의미하며, 여기서 잔기들 R², R³ 및 R⁴ 또는 잔기들 R², R³ 및 R⁴ 중 두 개의 잔기는 또한 2개 내지 6개, 바람직하게는 2개 내지 3개의 환으로 이루어진 축합환계를 공동으로 형성할 수 있으며, 상기 환들은 각각 포화되거나 단일 또는 다중 불포화되며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며;

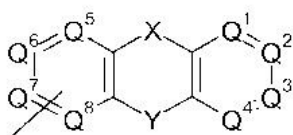
[0169] Z는 하나의 결합이거나 NR¹⁴, CR¹⁵R¹⁶, O, SO, SO₂, Si 또는 S, 바람직하게는 하나의 결합을 의미하며;

[0170] R¹⁴는 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 알킬 또는 아릴, 특히 바람직하게는 페닐을 의미하며;

[0171] R^{15} , R^{16} 은 서로 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 특히 바람직하게는 알킬 또는 아릴을 의미하며;

[0172] R^{17} , R^{18} 은 서로 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기, 바람직하게는 알킬, 헤테로아릴 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기를 의미하거나, 두 개의 인접한 잔기들 R^{17} 및/또는 두 개의 인접한 잔기들 R^{18} 은 각각 그것들과 결합된 두 개의 개별 탄소 원자와 함께 각각 서로 독립적으로 5개 또는 6개의 환 원자를 갖는 환형 잔기를 형성하며, 상기 환형 잔기는 한 개, 두 개 또는 세 개의 이중 결합을 가질 수 있고 N, O, SO, SO₂ 또는 S, 바람직하게는 N으로부터 선택된 한 개 또는 두 개의 헤테로원자 함유 기를 가질 수 있고 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며;

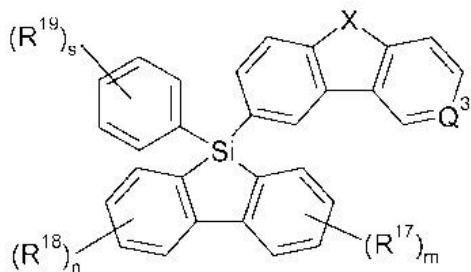
[0173] n, m은 서로 독립적으로 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 특히 바람직하게는 0 또는 1, 매우 바람직하게는 0을 의미하며;



[0174] R^1 은 , 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 특히 바람직하게는 알킬, 페닐, 나프틸, 인데닐, 벤조푸릴, 벤조티에닐, 벤조피롤릴, 디벤조푸릴, 디벤조티에닐, 카바졸일, 아자카바졸일, 페난스톨리닐 또는 플루오레닐, 매우 바람직하게는 메틸, 페닐 또는 디벤조푸릴, 디벤조티에닐, 카바졸일 또는 아자카바졸일을 의미한다.

[0175] 화학식(Ia)에 언급된 잔기들 및 기들의 바람직한 실시예들은 이에 상응하는 잔기들 및 기들과 관련하여 앞서 언급한 실시예들이다.

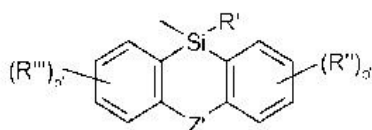
[0176] 화학식(I)의 매우 바람직한 화합물들은 아래의 화학식



[0177] 을 가지며, 여기서

[0178] X는 0, S, SO, SO₂ 또는 NR⁵, 바람직하게는 0 또는 S를 의미하며;

[0179] R⁵는 아릴 또는 알킬, 바람직하게는 페닐을 의미하며;



[0181] Q³은 C-H 또는 을 의미하며,

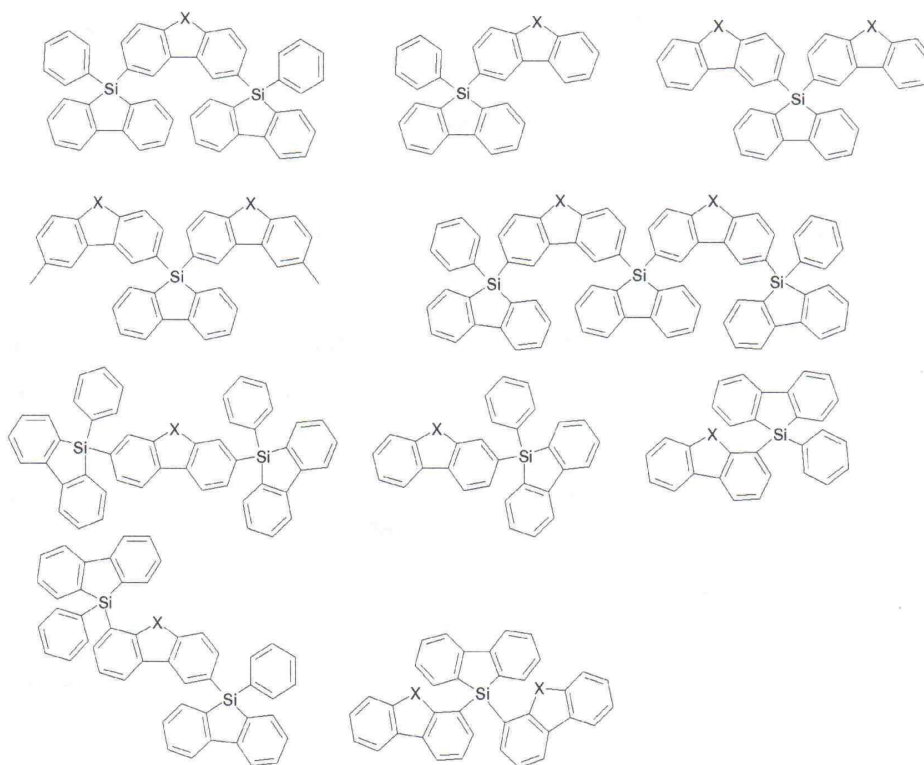
[0182] 여기서

[0183] R'은 알킬 또는 아릴을 의미하며;

[0184] R'', R'''은 서로 독립적으로 알킬, 헤테로아릴 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기를 의미하며;

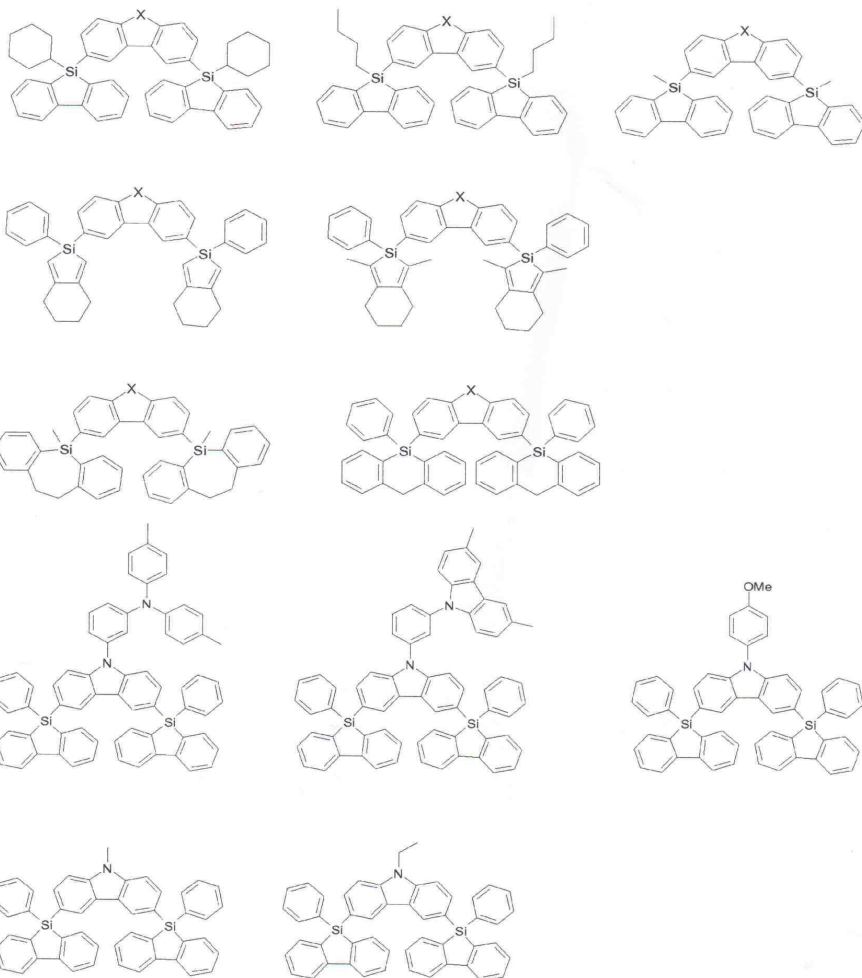
- [0185] Z'는 하나의 결합이거나 NR''', CR''', O, SO, SO₂, Si 또는 S, 바람직하게는 하나의 결합을 의미하며;
- [0186] R'''는 서로 독립적으로 알킬 또는 아릴을 의미하며;
- [0187] R''''는 서로 독립적으로 수소, 알킬 또는 아릴을 의미하며;
- [0188] o', p'는 서로 독립적으로 0, 1 또는 2, 바람직하게는 0을 의미하며,
- [0189] R¹⁷, R¹⁸은 서로 독립적으로 알킬 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기를 의미하며,
- [0190] R¹⁹는 서로 독립적으로 알킬 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기를 의미하거나, 두 개의 인접한 기들 R¹⁹은 공동으로 바람직하게는 5개 또는 6개, 특히 바람직하게는 5개의 환 원소를 갖는 하나의 환을 형성하며, 여기서 모든 환 원소들이 탄소 원자일 수 있거나 한 개 또는 두 개, 바람직하게는 한 개의 환 원소가 O, S 또는 N으로부터 선택된 헤테로원자이고 나머지 환 원소는 탄소 원자이며, 여기서 상기 환은 비치환되거나 아릴 잔기와 관련되어 앞서 언급한 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며 및/또는 하나 또는 다수의, 바람직하게는 하나의 추가 환과 융합될 수 있으며, 여기서 상기 환은 바람직하게 벤젠 융합되며(benzene-fused); 특히 바람직하게는 상기 환은 5원 환에서 O, S 및 N으로부터 선택된 헤테로원자를 갖는 벤젠 융합된 5원 환을 나타내며;
- [0191] n, m은 서로 독립적으로 0, 1 또는 2, 바람직하게는 0 또는 1, 특히 바람직하게는 0을 의미하며;
- [0192] s는 0, 1 또는 2, 바람직하게는 0 또는 두 개의 인접한 기들 R¹⁹이 하나의 환을 형성할 경우에는 2를 의미한다.
- [0193] 화학식(I)의 적합한 화합물에 대한 예는 다음과 같다:

X= O, S, NPh, PPh

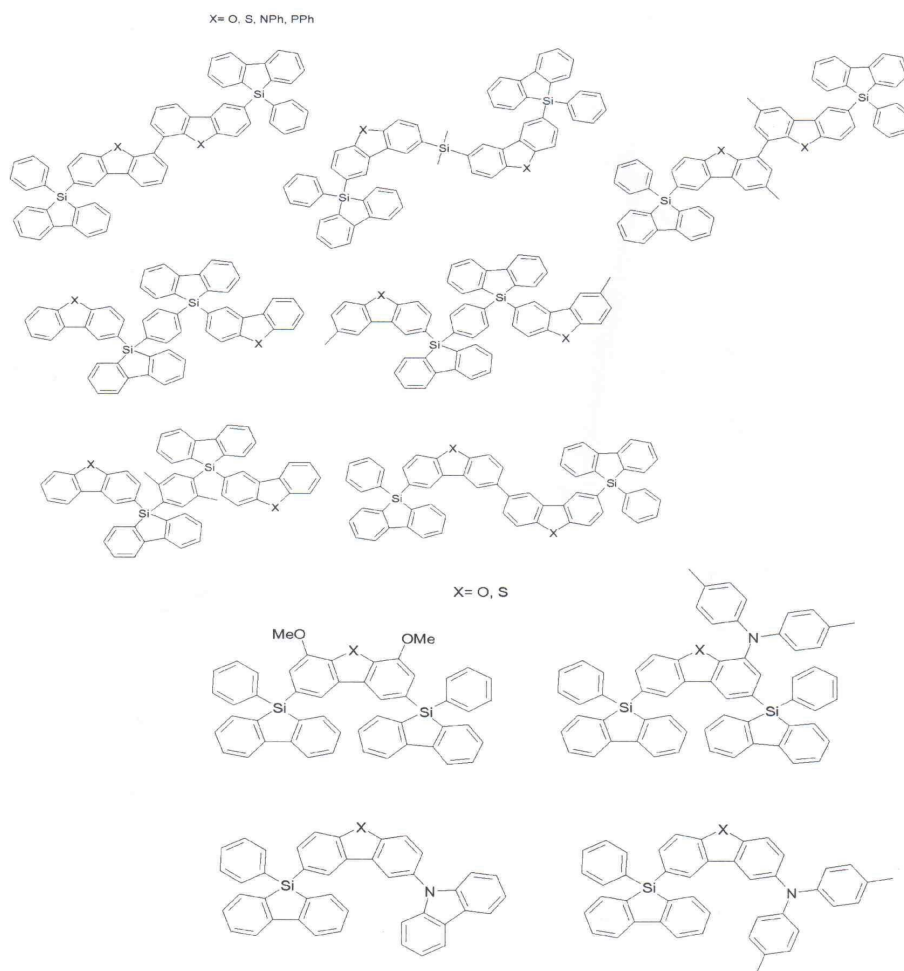


[0194]

X= O, S, NPh, PPh

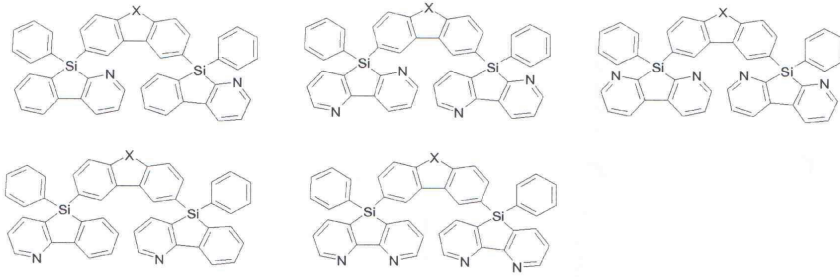


[0195]

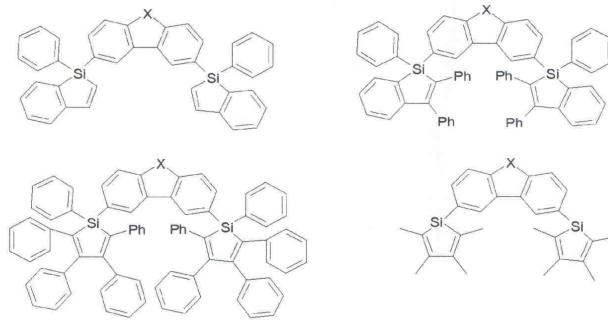


[0196]

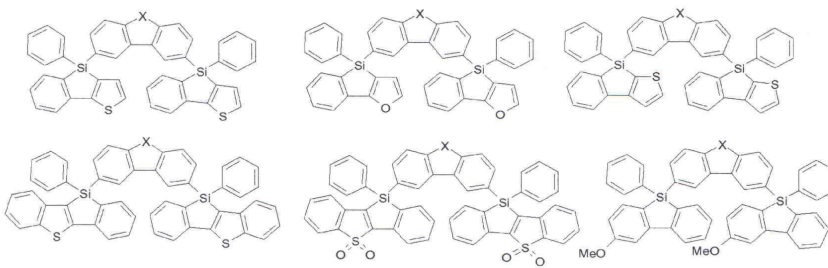
X= O, S, NPh, PPh



X= O, S, NPh, PPh

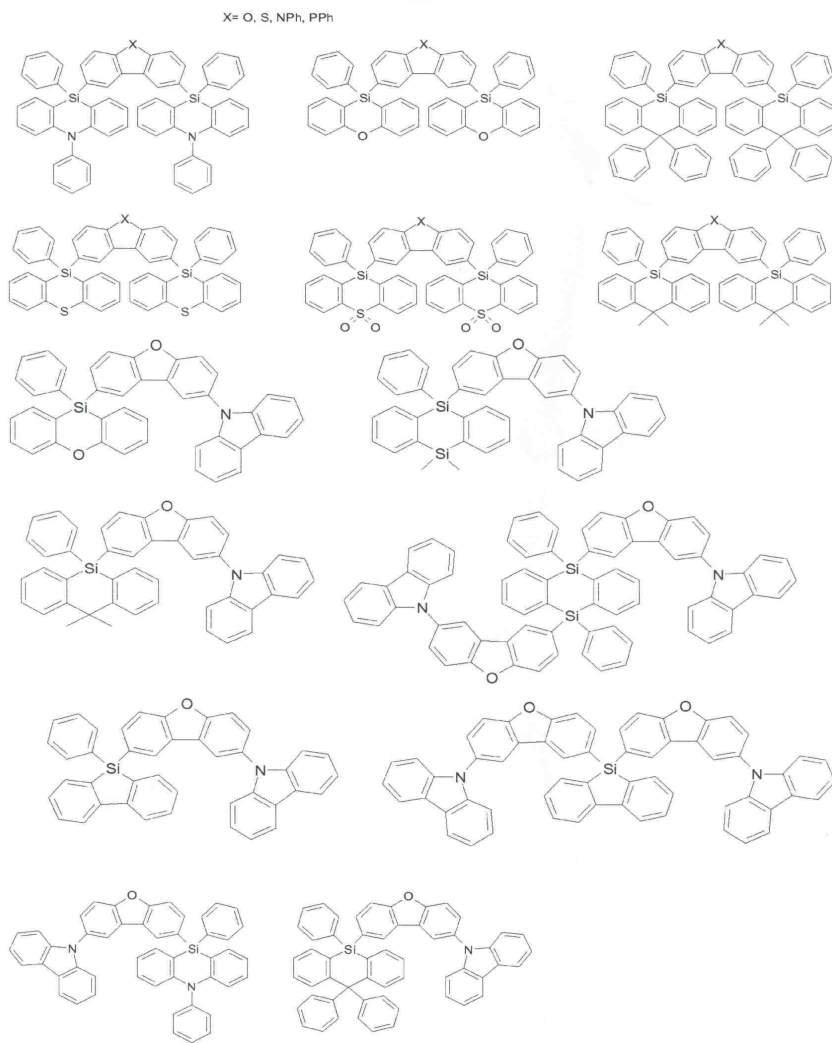


X= O, S, NPh, PPh



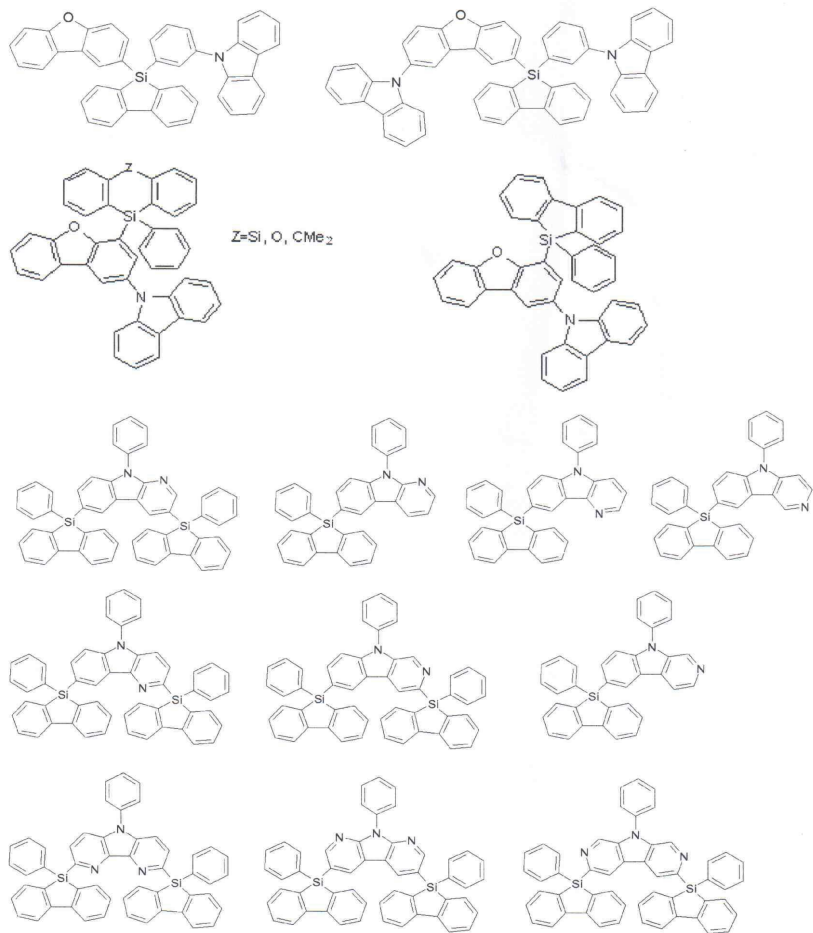
5

[0197]



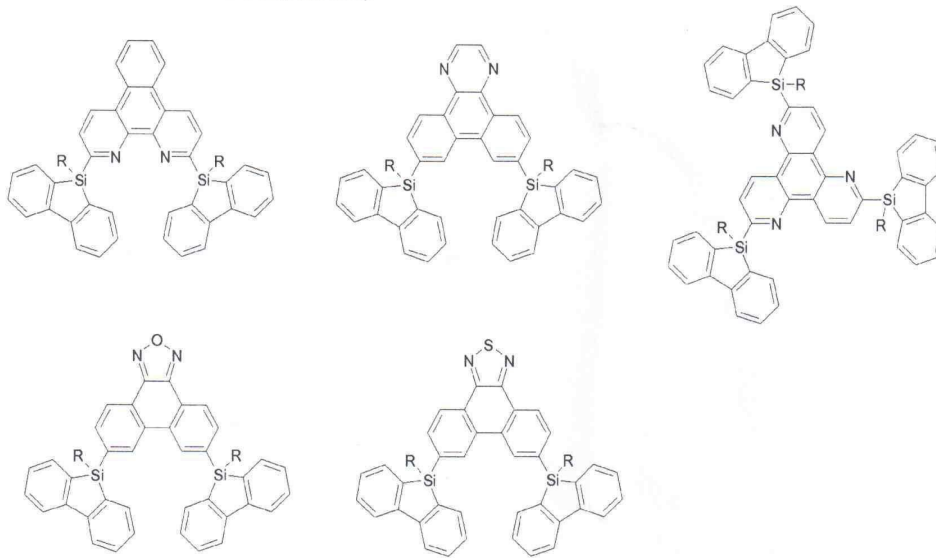
5

[0198]



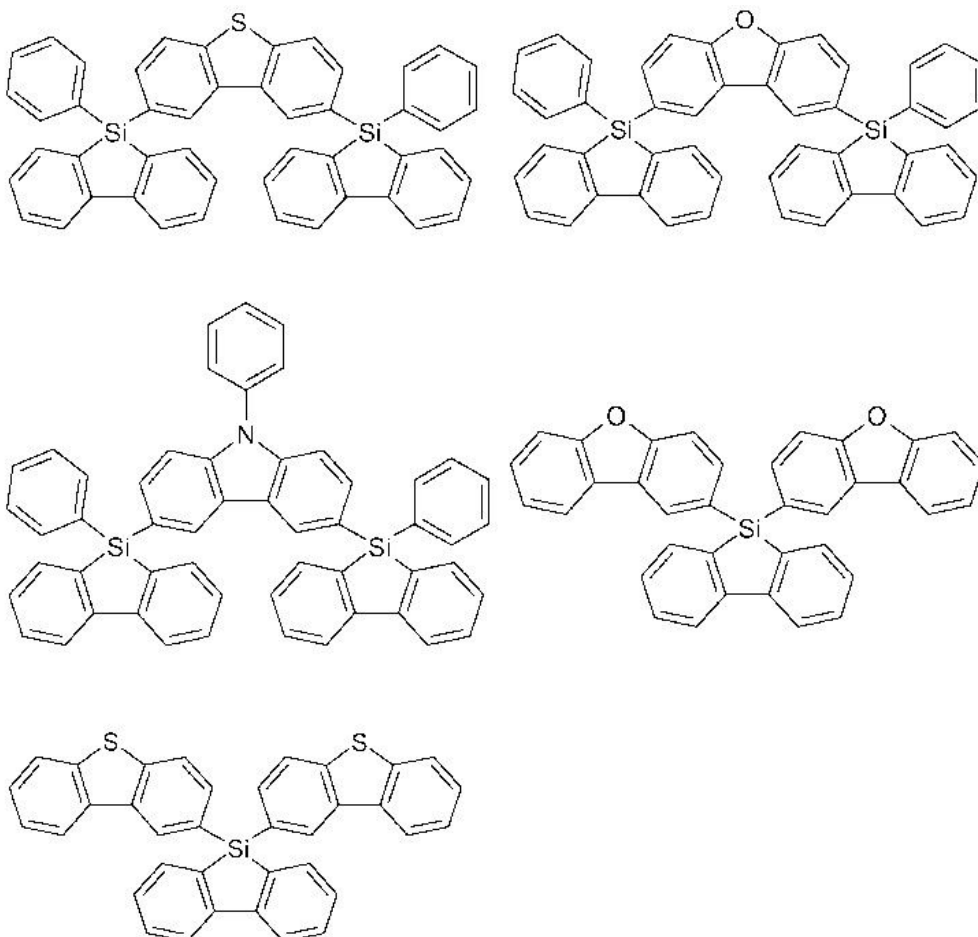
[0199]

R=Phenyl oder Methyl



[0201]

[0202] 화학식(I)의 매우 바람직한 화합물에 대한 예는 다음과 같다:



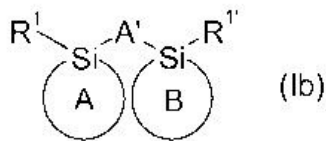
[0203]

[0204]

[0205] 여기서 위에 언급된 화학식(I)의 실물 화합물은 유기전자소자에서 사용되는 매트릭스 물질 및/또는 정공/여기자 차단 물질로서 특히 적합하다는 사실이 발견되었다. 특히 화학식(I)의 실물 화합물들은 OLEDs에서 사용되기에 적합하며, 특히 청색 또는 녹색 발광 OLEDs가 제공되어야 할 경우에 매트릭스 물질 및/또는 여기자 차단 물질로서 사용될 수 있다.

[0206] 화학식(Ib)을 갖는 화학식(I)의 실물 화합물들의 기는 종래기술에 공지되어 있지 않다.

[0207] 따라서 본 발명의 또 다른 대상은 아래의 일반 화학식(Ib)

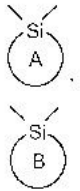


[0208]

[0209] 의 실물 화합물에 관련되며, 여기서

[0210] A'는 3개 이상, 바람직하게는 3개 또는 4개, 특히 바람직하게는 3개의 축합환으로 형성된 축합환계를 의미하며, 상기 축합환은 서로 독립적으로 4개 내지 10개, 바람직하게는 5개 내지 7개, 특히 바람직하게는 5개 또는 6개의 환 원소를 가지며 포화되거나 단일 또는 다중 불포화되며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들, 바람직하게는 알킬, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며, 여기서

[0211] 축합환계는 축합환계 자체 내에서 또는 바람직하게는 축합환계 자체 내 하나 이상의 치환기 내에서 바람직하게는 O, S, N, P, SO, SO₂ 및 Si, 특히 바람직하게는 O, S 및 N, 매우 바람직하게는 O 및 S로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자 함유 기를 가지며;



[0212] 는 서로 독립적으로 4개 내지 10개, 바람직하게는 5개 내지 7개, 특히 바람직하게는 5개 또는 6개, 매우 바람직하게는 5개의 환 원소를 갖는 각각의 Si 함유 환을 의미하며, 여기서 상기 환은 포화되거나 단일 또는 다중 불포화될 수 있으며 Si 원자 이외에 바람직하게는 O, S, SO, SO₂ 및 N, 특히 바람직하게는 O 및 N으로부터 선택된 하나 또는 다수의 추가 헤테로원자 함유 기를 가질 수 있으며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며, 여기서 Si 함유 환은 또한 2개 이상, 바람직하게는 2개 또는 3개, 특히 바람직하게는 3개의 축합환으로 형성된 축합환계의 일부일 수 있으며, 상기 추가 환은 - Si 함유 환 이외에 - 축합환계 내에서 서로 독립적으로 포화되거나 단일 또는 다중 불포화되며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며 바람직하게는 O, S, SO, SO₂ 및 N, 특히 바람직하게는 S 및 N으로부터 선택된 하나 또는 다수의 헤테로원자 함유 기를 가질 수 있으며;

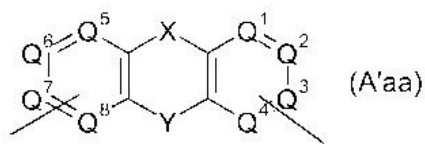
[0213] R¹, R^{1'}는 서로 독립적으로 A, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 특히 바람직하게는 알킬, 페닐, 나프틸, 인데닐, 벤조푸릴, 벤조티에닐, 벤조피롤릴, 디벤조푸릴, 디벤조티에닐, 카바졸일, 아자카바졸일, 페난스롤리닐 또는 플루오레닐, 매우 바람직하게는 메틸, 페닐 또는 디벤조푸릴, 디벤조티에닐, 카바졸일 또는 아자카바졸일을 의미하며, 여기서 앞서 언급한 기들은 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며;

[0214] A는 3개 이상의 축합환으로 형성된 축합환계를 의미하며, 상기 축합환은 서로 독립적으로 4개 내지 10개의 환 원소를 가지며 포화되거나 단일 또는 다중 불포화되며 치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, SiR²R³R⁴ 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며, 여기서 축합환계는 축합환계 자체 내에서 또는 하나 이상의 치환기 내에서 하나 이상의 헤테로원자를 갖는다.

[0215] 바람직한 기들, 즉 A, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용

을 갖는 기들은 앞서 언급되었다.

[0216] 바람직한 기들 A'는 앞서 언급한 기들 A에 상응하며, 여기서 기 A'는 기 A와 달리 각각의 Si 함유 환에 대한 두 개의 결합 지점을 갖는다. 따라서 A'는 특히 바람직하게



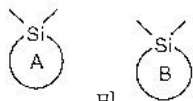
[0217] 을 의미하며,

[0218] 여기서

[0219] X는 S, O, NR^5 , SO, SO_2 또는 PR^6 , 바람직하게는 S, O 또는 NR^5 , 특히 바람직하게는 S 또는 O를 의미하며;

[0220] Y는 하나의 결합 또는 NR^5 , CR^7R^8 , O, SO, SO_2 또는 S, 바람직하게는 하나의 결합 또는 NR^5 , 특히 바람직하게는 하나의 결합을 의미하며;

[0221] Q^1 내지 Q^8 은 서로 독립적으로 CR^9 또는 N, 바람직하게는 서로 독립적으로 CR^9 를 의미하며, 여기서 기들 Q^1 , Q^2 , Q^3 또는 Q^4 중 하나 그리고 기들 Q^5 , Q^6 , Q^7 또는 Q^8 중 하나에 의해 아래의 기들



[0222] 및 의 개별 Si 원자에 대한 결합이 이루어지며, 이 기들 Q^1 , Q^2 , Q^3 또는 Q^4 및 Q^5 , Q^6 , Q^7 또는 Q^8 이 C를 의미하며;

[0223] R^5 , R^6 은 서로 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 아릴 또는 알킬, 특히 바람직하게는 페닐을 의미하며;

[0224] R^7 , R^8 은 서로 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴, 바람직하게는 알킬 또는 아릴을 의미하며;

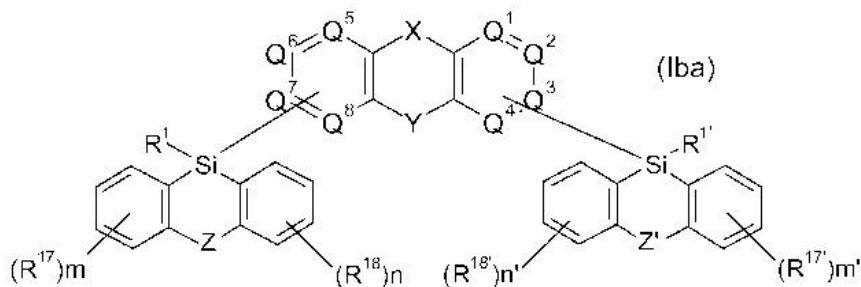
[0225] R^9 는 서로 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기, 바람직하게는 수소, 알킬, 헤테로아릴 또는 공여체 수용체 작용을 갖는 기를 의미한다.

[0226] 특히 바람직하게는 기  의 Si 원자에 대한 결합은 C를 의미하는 기 Q^7 에 의해 이루어지며, 기  의 Si 원자에 대한 결합은 C를 의미하는 기 Q^3 에 의해 이루어진다. 나머지 기들 Q^1 , Q^2 , Q^4 , Q^5 , Q^6 및 Q^8 은 매우 바람직한 실시예에서 수소를 의미한다.

[0227] 화학식(Ib)의 기들  및  의 바람직한 실시예는 기  의 바람직한 실시예에 상응한다.

[0228] 화학식(Ib)의 잔기들 R^1 및 $\text{R}^{1'}$ 의 바람직한 실시예는 화학식(I)의 잔기 R^1 에 상응한다.

[0229] 화학식(Ib)의 매우 바람직한 화합물들은 아래의 화학식(Iba)

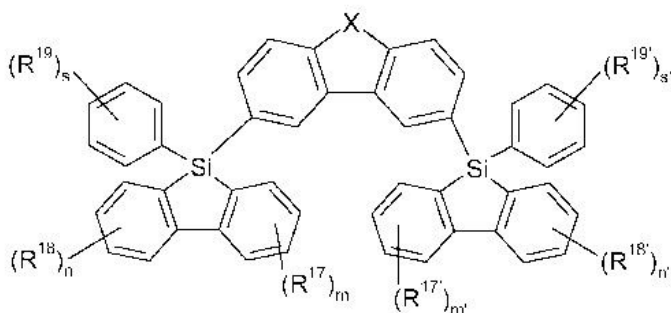


[0230]

[0231] 을 갖는다.

[0232] 화학식(Iba)에 언급된 기들은 화학식(I)의 화합물에 관련하여 언급된 잔기 및 기들 X, Y, Q¹ 내지 Q⁸, Z, R¹, R^{1'}, R¹⁷, R¹⁸, n 및 m에 대한 바람직한 의미들을 가지며, 여기서 - 앞서 언급한 바와 같이 - 기들 Q¹, Q², Q³ 또는 Q⁴ 및 Q⁵, Q⁶, Q⁷ 또는 Q⁸의 각각은 C를 의미하며 개별 Si 함유 환의 Si 원자에 대한 결합을 갖는다. 화학식(Iba)에 언급된 잔기들 및 기들 Z', R^{17'}, R^{18'}, m', n'는 서로 독립적으로 기들 Z, R¹⁷, R¹⁸, m 및 n에 대해 언급된 의미들을 갖는다.

[0233] 화학식(Ibaa)의 매우 바람직한 화합물들은 아래와 같으며;



[0234]

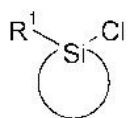
[0235] 여기서 기들 X, R¹⁷, R¹⁸, R^{17'}, R^{18'}, n, m, n' 및 m'는 앞서 언급한 의미들을 갖는다.

[0236] 화학식(I)의 화합물의 제조는 종래에 공지된 방법에 따라 예컨대

[0237] (i) 화합물 A-Hal의 금속교환반응(transmetalation);

[0238] - 여기서 A는 앞서 언급한 의미들을 가지며 Hal은 할로젠, 바람직하게는 종래에 공지된 방법에 따라 예컨대 Mg, n-BuLi, sec. BuLi 또는 tert.-BuLi를 갖는 Br 또는 I을 의미함 -

[0239] (ii) 아래의 화학식



[0240]

[0241] 의 클로르실릴 화합물을 갖는 금속교환반응한 화합물의 연속 반응



[0242] - 여기서 R¹ 및 는 앞서 언급한 의미들을 가짐 -

[0243] 에 의해 이루어진다.

[0244] 금속교환반응 및 추가 변환에 적합한 조건들은 종래에 공지되어 있으며 예컨대 실릴 제조와 관련하여 J. Am.

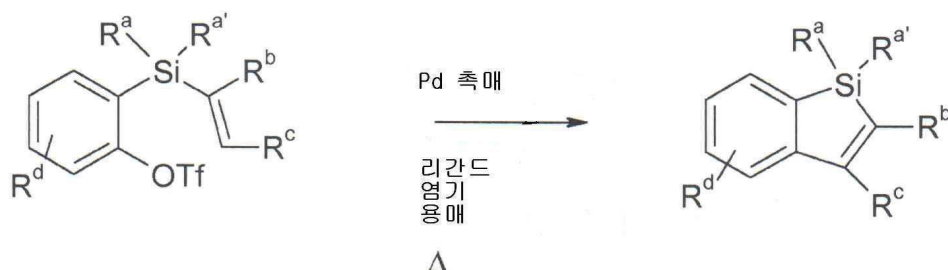
Chem. Soc. **2005**, 127, 9021-9029, 9023 페이지 및 Chem. Lett. **2007**, 36, 1138 페이지에 언급되어 있다.

[0245] 적합한 할로겐화된 화합물 A-Hal은 종래에 공지된 방법에 따라 제조될 수 있다. 적합한 방법들은 예컨대 M.Park, J.R.Buck, C.J.Rizzo, *Tetrahedron*, **1998**, 54, 12707-12714에서 N-페닐카바졸에 대해 그리고 W.Yang et al., J.Mater. Chem. **2003**, 13, 1351 및 Meille et al., *J.Catal.* **1997**, 170, 29에서 디벤조티오펜에 대해 기술되어 있다. 4-브롬디벤조푸란의 합성은 D.J.Cram et al, *J.Am. Chem. Soc.*, **1984**, 106, 3286에 기술되어 있다. 3-브롬디벤조푸란의 합성은 Cullinane, Padfield, *J. Chem. Soc.* **1935**, 1131에 기술되어 있다. 2-브롬디벤조푸란의 합성은 *J. Org. Chem.* **1997**, 62, 1348에 기술되어 있다. 또한 몇몇 브롬화된 화합물 A-Hal은 상용화된 화합물이며, 여기서 X(기 A)=NH(CAS 6825-20-3), NPh(CAS 57103-20-5) 및 S(CAS 31574-87-5)를 의미한다.

[0246] 적합한 클로르실롤 화합물의 합성 또한 종래에 공지된 방법에 따라 또는 종래에 공지된 방법과 유사하게 이루어진다. 예컨대 5-클로르-5-페닐디벤조실롤 및 5,5-디클로르디벤조실롤의 합성은 J. Am. Chem. Soc., 1958, 80, 1883에 기술되어 있고 5,5-디클로르디벤조실롤의 합성은 또한 Chem. Lett., 2007, 36, 1138 및 J. Am. Chem. Soc. 2002, 124, 49에 기술되어 있다.

[0247] 치환된 실롤의 합성은 특히 Murakami in Org. Lett. 2007, 9, 133 및 Org. Lett. 2007, 9, 93에 기술되어 있으며, 여기서 적합한 초기 단계의 합성은 종래에 공지되어 있다.

[0248] 또한 적합하게 치환된 실롤은 예컨대 아래의 방법



[0249]

[0250] 에 따라 제조될 수 있으며,

[0251] 여기서

[0252] R^a, R^{a'}는 서로 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 바람직하게는 알킬 또는 아릴을 의미하며;

[0253] R^b, R^c는 서로 독립적으로 수소, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기를 의미하거나, R^a 및 R^{a'}는 그것들과 결합된 Si 함유 환의 두 개의 개별 탄소 원자와 함께 5개 또는 6개의 환 원자를 갖는 환형 잔기를 형성하며, 상기 환형 잔기는 한 개, 두 개 또는 세 개의 이중 결합을 가질 수 있고 N, SO, SO₂ 또는 S, 바람직하게는 N으로부터 선택된 한 개 또는 두 개의 헤테로원자를 가질 수 있으며 비치환되거나 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 그리고 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들로부터 선택된 하나 또는 다수의 치환기로 치환될 수 있으며, 여기서 5개 또는 6개의 환 원자를 갖는 환형 잔기는 또한 5개 또는 6개의 환 원자를 갖는 하나 또는 다수의 추가 환형 잔기와 융합될 수 있으며;

[0254] R^d는 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기, 바람직하게는 알킬, 헤테로아릴 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기를 의미한다.

[0255] 적합한 Pd 촉매, 염기, 용매 및 리간드, 예컨대 포스판 리간드 및 적합한 반응 조건들이 종래에 공지되어 있다.

[0256] 본 발명에 따라 사용된 화학식(I)의 실롤 화합물 및/또는 본 발명에 따라 사용된 화학식(Ib)의 실롤 화합물은 본 발명에 따라 예컨대 유기 FET 및 유기 TFT를 포함하는 유기 트랜지스터와 같은 스위칭 소자, 유기 광전지 및 유기발광다이오드(OLED)로부터 선택된 유기전자소자에서 사용되며, 여기서 OLEDs 내 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 화합물들은 매트릭스 물질 및/또는 정공/여기자 차단 물질로서 사용된다. 한 바람직한 실시예에서 본 출원은 화학식 (I) 및/또는 (Ib)의 화합물들이 OLEDs의 매트릭스 물질 및/또는 정공/여기자 차단 물질로서 사용되는 것에

관한 것이다. 유기전자소자에서의 용도에 관한 적합한 구조는 종래에 공지되어 있다.

- [0257] 유기 트랜지스터는 일반적으로 정공 수송 능력 및/또는 전자 수송 능력을 갖는 유기층으로 형성된 반도체층; 전도가능한 층으로 형성된 게이트 전극; 및 상기 반도체층과 상기 전도가능한 층 사이에 제공된 절연층을 포함한다. 이와 같이 트랜지스터 소자를 제조하기 위해 소스 전극 및 드레인 전극이 제공된다. 또한 유기 트랜지스터 내에 전문가에게 공지된 추가의 층이 제공될 수 있다. 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 실물 화합물은 유기 트랜지스터의 각각의 임의의 층 내에 제공될 수 있다.
- [0258] 유기 광전지(광전 변환 소자)는 일반적으로 두 개의 평행하게 제공된 판형 전극 사이에 제공된 유기층을 포함한다. 상기 유기층은 빗살 모양의 전극 위에 형성될 수 있다. 여기서 유기층의 위치와 전극 재료에 관한 어떠한 특별한 제한도 없다. 그러나 평행하게 제공된 판형 전극이 사용될 경우에는 하나 이상의 전극이 예컨대 ITO 전극 또는 불소 도핑된(fluorinated) 주석 산화물 전극과 같은 투명 전극으로 형성된다. 유기층은 두 개의 하부 층들, 즉 p-타입 반도체 특성 또는 정공 수송 능력을 갖는 층 및 n-타입 반도체 특성 또는 전자 수송 능력을 갖는 층으로 형성된다. 또한 유기 광전지 내에 종래에 공지된 추가의 층이 제공될 수 있다. 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 실물 화합물은 유기 광전지의 각각의 임의의 층 내에 제공될 수 있다.
- [0259] 바람직하게 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 실물 화합물은 유기발광다이오드(OLEDs)의 매트릭스 물질 및/또는 정공/여기자 차단 물질로서 사용된다. OLEDs의 적합한 층 배열은 종래에 공지되어 있고 아래에 언급된다.
- [0260] 한 추가 실시예에서 본 발명은 유기발광다이오드에 관한 것이며, 여기서 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 실물 화합물은 바람직하게 OLED의 발광층의 매트릭스 물질로서 사용된다.
- [0261] 한 추가 실시예에서 본 발명은 유기발광다이오드에 관한 것이며, 여기서 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 실물 화합물은 바람직하게 정공 차단층에서 정공/여기자 차단 물질로서 사용된다.
- [0262] 또한 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 화합물이 발광층(매트릭스로서) 및 정공 차단층 내에 제공될 수 있다.
- [0263] 또한 OLED의 추가 층(발광층 및/또는 정공 차단층 이외에)이 화학식(I) 또는 (Ib)의 하나 또는 다수의 화합물을 포함할 수 있다.
- [0264] 따라서 본 발명의 또 다른 대상은 화학식(I)의 실물 화합물 및/또는 화학식(Ib)의 실물 화합물이 유기발광다이오드의 매트릭스 물질 및/또는 정공/여기자 차단 물질로서 사용되는 것이다. 바람직하게는 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 실물 화합물이 유기발광다이오드에서 발광층 및/또는 정공/여기자 차단층에서 사용된다.
- [0265] 본 발명의 또 다른 대상은 애노드(An) 및 캐소드(Ka) 그리고 애노드(An)와 캐소드(Ka) 사이에 배치된 발광층(E) 및 경우에 따라서는 하나 이상의 정공/여기자 차단층을 포함하는 유기발광다이오드이며, 여기서 유기발광다이오드는 화학식(I) 및/또는 화학식(Ib)의 하나 이상의 화합물을 포함하며, 상기 화합물은 발광층 및/또는 하나 이상의 정공/여기자 차단층 - 존재하는 한 - 내에 제공된다.
- [0266] 본 발명에 따른 OLED의 구조
- [0267] 따라서 본 발명에 따른 유기발광다이오드(OLED)는 아래의 구조:
- [0268] 애노드(An) 및 캐소드(Ka) 그리고 애노드(An)와 캐소드(Ka) 사이에 배치된 발광층(E) 및 경우에 따라서는 하나 이상의 정공/여기자 차단층을 갖는다.
- [0269] 본 발명에 따른 OLED는 예컨대 - 한 바람직한 실시예에서 - 아래의 층들:
- [0270] 1. 애노드
- [0271] 2. 정공 전도층
- [0272] 3. 발광층
- [0273] 4. 정공/여기자 차단층
- [0274] 5. 전자 전도층
- [0275] 6. 캐소드
- [0276] 로 구성될 수 있다.
- [0277] 여기서 앞서 언급한 구조와는 구별되는 종래에 공지된 층 배열이 가능하다. 예컨대 OLED는 앞서 언급한 층들 모

두를 갖지 않을 수 있으며, 예컨대 (1)(애노드), (3)(발광층) 및 (6)(캐소드)를 갖는 OLED도 마찬가지로 적합하며, 여기서 (2)(정공 전도층) 및 (4)(정공/여기자 차단층) 및 (5)(전자 전도층)의 기능은 인접한 층들에 의해 실행된다. 층들 (1), (2), (3) 및 (6) 및/또는 (1), (3), (4), (5) 및 (6)을 갖는 OLEDs 또한 적합하다. 또한 OLEDs가 애노드(1)와 정공 전도층(2) 사이에 전자/여기자 차단층을 가질 수도 있다.

[0278] 또한 전자/여기자 차단, 정공/여기자 차단, 정공 주입, 정공 전도, 전자 주입, 전자 전도와 같이 앞서 다수의 기능들이 하나의 층 내에 통합되어, 예컨대 그 층 내에 제공되는 하나의 물질에 의해 실행될 수도 있다. 예컨대 정공 전도층 내에 사용된 물질은 한 실시예에서 동시에 여기자 및/또는 전자를 차단할 수 있다.

[0279] 또한 앞서 언급한 OLED의 개별 층들은 2개 또는 다수의 층으로 형성될 수도 있다. 예컨대 정공 전도층은 전극으로부터 정공들이 주입될 수 있는 층 및 정공을 주입하는 층 밖으로 정공들을 발광층 안으로 수송하는 층으로 형성될 수 있다. 전자 전도층은 마찬가지로 다수의 층들, 예컨대 전자가 전극을 통해 주입되는 층 및 전자 주입층으로부터 전자를 받아서 발광층 안으로 수송하는 층으로 이루어질 수 있다. 이와 같은 층들은 유기층 또는 금속 전극을 갖는 층들의 각각 에너지 레벨, 온도 저항성 및 전하 캐리어 이동성 및 에너지 편차와 같은 인자에 따라 선택된다. 전문가들은 본 발명에 따라 이미터 물질로서 사용된 유기 화합물에 최적으로 매칭된 OLEDs의 구조를 선택할 수 있다.

[0280] 특히 효율적인 OLEDs를 획득하기 위해서는 앞서 언급한 층들이 본 발명에 따른 OLEDs 내에 제공될 경우에, 예컨대 정공 전도층의 HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital, 최고 점유 분자궤도)가 애노드의 일함수(work function)와 매칭되고 전자 전도층의 LUMO(Lowest Unoccupied Molecular Orbital, 최저 비점유 분자궤도)가 캐소드의 일함수와 매칭되어야 한다.

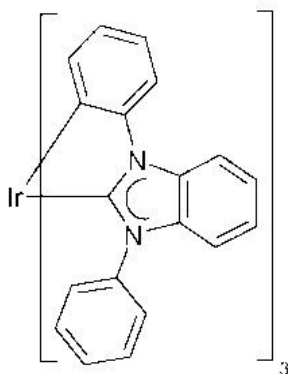
[0281] 애노드(1)는 양극(positive) 전하 캐리어를 제공하는 전극이다. 상기 애노드는 예컨대 금속, 상이한 금속 혼합물, 합금, 금속 산화물 또는 상이한 금속 산화물의 혼합물을 포함하는 재료로 형성될 수 있다. 이에 대한 대안으로서 애노드가 전도성 고분자일 수 있다. 적합한 금속들은 원소 주기율표의 Ib, IVa, Va 및 VIa족 금속들 및 VIIa족의 전이 금속들을 포함한다. 애노드가 광투과성을 지녀야 할 경우에는 일반적으로 원소 주기율표(기존의 IUPAC 버전)의 IIb, IIIb 및 IVb족의 혼합된 금속 산화물, 예컨대 인듐 주석 산화물(ITO)이 사용된다. 또한 예컨대 Nature, Vol. 357, 447-479 페이지(1992. 6. 11)에 기술된 바와 같이 애노드(1)가 유기 물질, 예컨대 폴리아닐린을 포함할 수도 있다. 형성된 빛을 분리(decoupling)하기 위해서는 애노드 또는 캐소드 중 적어도 하나가 적어도 부분적으로 투과성을 지닐 수 있다. 바람직하게는 애노드(1)를 위한 물질로서 ITO가 사용된다.

[0282] 본 발명에 따른 OLEDs의 층(2)에 적합한 정공 전도 물질은 예컨대 Kirk-Othmer의 Encyclopedia of Chemical Technologie, 4. Auflage, Vol. 18, 837 내지 860 페이지, 1996에 공지되어 있다. 정공 수송 분자들 및 고분자들이 정공 수송 물질로서 사용될 수 있다. 통상적으로 사용된 정공 수송 분자들은 트리스-[N-(1-나프틸)-N-(페닐아미노)]트리페닐아민(1-나프DATA), 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐-아미노]비페닐(α -NPD), N,N'-디페닐-N,N'-비스(3-메틸페닐)-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), 1,1-비스[(디-4-톨리아미노)페닐]-시클로hexan(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), α -페닐-4-N,N-디페닐아미노스티롤(TPS), p-(디에틸아미노)-벤즈알데히드디페닐히드라존(DEH), 트리페닐아민(TPA), 비스[4-(N,N-디에틸아미노)-2-메틸페닐](4-메틸-페닐)메탄(MPMP), 1-페닐-3-[p-(디에틸아미노)스티릴]-5-[p-(디에틸아미노)페닐]피라졸린(PPR 또는 DEASP), 1,2-트랜스-비스(9H-카바졸-9-일)시클로부탄(DCZB), N,N,N',N'-테트라키스(4-메틸페닐)-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민(TTB), 4,4',4''-트리스(N,N-디페닐아미노)트리페닐아민(TDTA), 4,4',4''-트리(N-카바졸일)트리페닐아민(TCTA), N,N'-비스(나프탈렌-2-일)-N,N'-비스(페닐)-벤지딘(β -NPB), N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)-9,9-스피로비플루오렌(스피로-TPD), N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)-9,9-스피로비플루오렌(스피로-NPB), N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)-9,9-디메틸플루오렌(DMFL-TPD), N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)-9,9-디페닐플루오렌(DPFL-TPD), N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)-9,9-디페닐플루오렌(DPFL-NPB), 2,2',7,7'-테트라키스(N,N-디페닐아미노)-9,9-스피로비플루오렌(스피로-TAD), 9,9-비스[4-(N,N-비스-비페닐-4-일-아미노)페닐]-9H-플루오렌(BPAPF), 9,9-비스[4-(N,N-비스-나프탈렌-2-일-아미노)페닐]-9H-플루오렌(NPAPF), 9,9-비스[4-(N,N-비스-나프탈렌-2-일-N,N'-비스-페닐-아미노)페닐]-9H-플루오렌(NPBAPF), 2,2',7,7'-테트라키스[N-나프탈렌일(페닐)-아미노]-9,9-스피로비플루오렌(스피로-2NPB), N,N'-비스(페난트렌-9-일)-N,N'-비스(페닐)-벤지딘(PAPB), 2,7-비스[N,N-비스(9,9-스피로-비플루오렌-2-일)-아미노]-9,9-스피로비플루오렌(스피로-5), 2,2'-비스[N,N-비스(비페닐-4-일)아미노]-9,9-스피로비플루오렌(2,2'-스피로-DBP), 2,2'-비스(N,N-디-페닐-아미노)-9,9-스피로비플루오렌(스피로-BPA), 2,2',7,7'-테트라(N,N-디-톨릴)아미노-스피로-비

플루오렌(스피로-TTB), N,N,N',N'-테트라-나프탈렌-2-일-벤지딘(TNB), 포르피린 화합물 및 구리 프탈로시아닌과 같은 프탈로시아닌으로 이루어진 군으로부터 선택된다. 통상적으로 사용된 정공 수송 고분자는 폴리비닐카바졸렌(페닐메틸)폴리실란 및 폴리아닐린으로 이루어진 군으로부터 선택된다. 또한 정공 수송 고분자는 고분자 내 정공 수송 분자들, 예컨대 폴리스티롤 및 폴리카보네이트의 도핑에 의해 획득될 수 있다. 이에 대한 예는 폴리스티롤셀로네이트에 의해 도핑된 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)(PEDOT:PSS)이다. 적합한 정공 수송 분자들은 앞서 언급되었다.

[0283]

또한 - 한 실시예에서 - 카르벤 착체(carbene complex)가 정공 전도 물질로서 사용될 수 있으며, 여기서 하나 이상의 정공 전도 물질의 밴드갭(band gap)은 일반적으로 사용된 이미터 물질의 밴드갭 보다 크다. 여기서 본 출원의 의미에서 밴드갭이란 삼중항 에너지(triplet energy)로 이해될 수 있다. 적합한 카르벤 착체는 예컨대 WO 2005/019373 A2, WO 2006/056418 A2, WO 2005/113704, WO 2007/115970, WO 2007/115981 및 WO 2008/000727 에 기술된 바와 같은 카르벤 착체이다. 적합한 카르벤 착체에 대한 예는 화학식:



[0284]

[0285]

을 갖는 $\text{Ir}(\text{dpbic})_3$ 이며, 이는 예컨대 WO 2005/019373에 공지되어 있다.

[0286]

발광층(3)은 하나 이상의 이미터 물질을 포함한다. 이는 원칙적으로 형광 이미터 또는 인광 이미터를 가리키며, 적합한 이미터 물질은 종래에 공지되어 있다. 바람직하게 하나 이상의 이미터 물질이란 인광 이미터를 가리킨다. 바람직하게 사용된 인광 이미터 화합물은 금속 착체를 기반으로 하며, 여기서 특히 금속 Ru, Rh, Ir, Pd 및 Pt의 착체, 특히 Ir의 착체가 중요하다. 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 화합물은 - 정공/여기자 차단층에서 사용되는 경우 이외에 - 발광층의 매트릭스로서 사용될 수 있다.

[0287]

본 발명에 따른 OLEDs의 사용을 위한 적합한 금속 착체는 예컨대 WO 02/60910 A1, US 2001/0015432 A1, US 2001/0019782 A1, US 2002/0055014 A1, US 2002/0024293 A1, US 2002/004869 A1, EP 1 191 612 A2, EP 1 191 613 A2, EP 1 211 257 A2, US 2002/0094453 A1, WO 02/02714 A2, WO 00/70655 A2, WO 01/41512 A1, WO 02/15645 A1, WO 2005/019373 A2, WO 2005/113704 A2, WO 2006/115301 A1, WO 2006/067074 A1, WO 2006/056418, WO 2006121811 A1, WO 2007095118 A2, WO 2007/115970, WO 2007/115981 및 WO 2008/000727에 기술되어 있다.

[0288]

또 다른 적합한 금속 착체는 상용화된 금속 착체, 즉 트리스(2-페닐피리딘)이리듐(III), 이리듐(III)트리스(2-(4-톨릴)피리디나토-N,C2'), 이리듐(III)트리스(1-페닐이소키놀린), 이리듐(III)비스(2-2'-벤조-티에닐)피리디나토-N,C3')(아세틸아세토네이트), 이리듐(III)비스(2-(4,6-디플루오로페닐)피리디나토-N,C2')피콜리네이트, 이리듐(III)비스(1-페닐이소키놀린)(아세틸아세토네이트), 이리듐(III)비스(디-벤조[f,h]키녹살린)(아세틸아세토네이트), 이리듐(III)비스(2-메틸디-벤조[f,h]키녹살린)(아세틸아세토네이트) 및 트리스(3-메틸-1-페닐-4-트리메틸-아세틸-5-피라졸린)테르븀(III)이다.

[0289]

또한 하기의 상용화된 금속들: 트리스(디벤조일아세토나토)-모노(페난스롤린)-유로퓸(III), 트리스(디벤조일메탄)-모노(페난스롤린)-유로퓸(III), 트리스(디벤조일메탄)-모토(5-아미노페난스롤린)-유로퓸(III), 트리스(디-2-나프토일메탄)-모노(페난스롤린)-유로퓸(III), 트리스(4-브로모벤조일메탄)-모노(페난스롤린)-유로퓸(III), 트리스(디-비페닐-메탄)-모노(페난스롤린)-유로퓸(III), 트리스(디벤조일메탄)-모노(4,7-디페닐-페난스롤린)-유로퓸(III), 트리스(디벤조일메탄)-모노(4,7-디메틸-페난스롤린)-디술포산(disulfonic acid)-유로퓸(III)-이나트륨염(disodium salt), 트리스[디(4-(2-(2-에톡시-에톡시)에톡시)벤조일메탄)]-모노(페난스롤린)-유로퓸(III) 및 트리스[디(4-(2-(2-에톡시-에톡시)에톡

시)벤조일-메탄)]모노-(5-아미노페난스롤린)-유로퓸(III)도 적합하다.

- [0290] 적합한 삼중항 이미터는 예컨대 카르벤 착체이다. 본 발명의 한 실시예에서 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 화합물들은 발광층 내에서 삼중항 이미터로서의 카르벤 착체와 함께 매트릭스 물질로서 사용된다. 적합한 카르벤 착체는 종래에 공지되어 있고 예컨대 WO 2005/019373 A2, WO 2006/056418 A2, WO 2005/113704, WO 2007/115970, WO 2007/115981 및 WO 2008/000727에 기술되어 있다.
- [0291] 발광층은 이미터 물질 이외에 추가의 소자들을 가질 수 있다. 예컨대 이미터 물질의 방출 색을 바꾸기 위해 발광층 내에 인광 안료가 제공될 수 있다. 또한 - 한 바람직한 실시예에서 - 매트릭스 물질이 사용될 수 있다. 상기 매트릭스 물질은 고분자, 예컨대 폴리(N-비닐카바졸) 또는 폴리실란일 수 있다. 그러나 상기 매트릭스 물질은 또한 하나의 소분자, 예컨대 4,4'-N,N'-디카바졸비페닐(CDP=CBP) 또는 예컨대 TCTA와 같은 3차(tertiary)방향족 아민일 수도 있다. 본 발명의 한 바람직한 실시예에서 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 하나 이상의 화합물이 매트릭스 물질로서 사용된다.
- [0292] 한 바람직한 실시예에서 발광층은 앞서 언급한 하나 이상의 이미터 물질의 2 내지 20 중량%, 바람직하게는 5 내지 17 중량% 그리고 앞서 언급한 하나 이상의 매트릭스 물질 - 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 하나 이상의 화합물의 실시예에서 - 의 80 내지 98 중량%, 바람직하게는 83 내지 95 중량%로 형성되며, 여기서 상기 이미터 물질과 매트릭스 물질의 총합은 100 중량%이다.
- [0293] 또 다른 한 실시예에서 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 화합물들은 삼중항 이미터로서의 카르벤 착체와 함께 정공/여기자 차단 물질로서 사용된다. 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 화합물은 또한 - 앞서 언급한 바와 같이 - 삼중항 이미터로서의 카르벤 착체와 함께 매트릭스 물질 및 정공/여기자 차단 물질로서 사용될 수 있다.
- [0294] 따라서 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 화합물과 함께 OLEDs에서 매트릭스 물질 및/또는 정공/여기자 차단 물질로서 사용되기에 적합한 금속 착체는 또한 WO 2005/019373 A2, WO 2006/056418 A2, WO 2005/113704, WO 2007/115970, WO 2007/115981 및 WO 2008/000727에 기술되어 있는 금속 착체이다. 본 출원에서 진술한 국제 출원들이 명백하게 관련되며 본 출원의 내용에 포함되는 것으로 간주된다. 정공/여기자 차단층(4)이 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 실물 화합물을 갖지 않을 경우에는 OLED가 - 정공 차단층이 존재할 경우에 - 통상적으로 OLEDs에서 사용된 정공 차단 물질, 예컨대 2,6-비스(N-카바졸일)피리딘(mCPy), 2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난스롤린(바소큐프로인(Bathocuproine), (BCP)), 비스-(2-메틸-8-퀴놀리나토)-4-페닐-페닐라토)-알루미늄(III)(BAIq), 페노티아진-S,S-디옥사이드 유도체 및 1,3,5-트리스(N-페닐-2-벤질이미다졸)-벤젠(TPBI)와 같은 정공 차단 물질을 가지며, 상기 TPBI는 또한 전자 전도 물질로서도 적합하다. 또 다른 한 실시예에서는 WO 2006/100298에 공지된 바와 같이 카보닐기를 포함하는 기들에 의해 결합하는 방향족 또는 헤테로 방향족 환을 포함하는 화합물들, 즉 디실릴카바졸, 디실릴벤조푸란, 디실릴벤조티오펜, 디실릴벤조포스폴, 디실릴벤조티오펜-S-산화물 및 예컨대 미리 공개되지 않은 PCT/EP2008/058207 및 PCT/EP2008/058106에 언급된 디실릴벤조티오펜-S,S-디옥사이드 그리고 WO 2008/034758에 공지된 디실릴 화합물들이 정공/여기자 차단층(4) 및 발광층(3)의 매트릭스 물질로서 사용된다.
- [0295] 한 바람직한 실시예에서 본 발명은 (1) 애노드, (2) 정공 전도층, (3) 발광층, (4) 정공/여기자 차단층, (5) 전자 전도층 및 (6) 캐소드 그리고 경우에 따라서는 추가 층을 포함하는 본 발명에 따른 OLED에 관한 것으로, 정공/여기자 차단층 또는 발광층은 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 하나 이상의 화합물을 포함한다.
- [0296] 또 다른 한 바람직한 실시예에서 본 발명은 (1) 애노드, (2) 정공 전도층, (3) 발광층, (4) 정공/여기자 차단층, (5) 전자 전도층 및 (6) 캐소드 그리고 경우에 따라서는 추가 층을 포함하는 본 발명에 따른 OLED에 관한 것으로, 발광층(3)은 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 하나 이상의 화합물을 포함하며 정공/여기자 차단층은 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 하나 이상의 화합물을 포함한다.
- [0297] 본 발명에 따른 OLEDs의 층(5)을 위해 적합한 전자 전도 물질은 예컨대 2,2',2''-(1,3,5-페닐렌)트리스-[1-페닐-1H-벤지미다졸](TPBI), 트리스(8-퀴놀리놀라토)알루미늄(Alq₃)과 같은 옥시노이드 화합물(oxinoid compound)로 킬레이트화된(chelated) 금속들, 2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난스롤린(DDPA=BCP) 또는 4,7-디페닐-1,10-페난스롤린(DPA)과 같은 페난스롤린 기반 화합물 그리고 2-(4-비페닐릴)-5(4-t-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸(PBD) 및 3-(4-비페닐릴)-4-페닐-5-(4-t-부틸페닐)-1,2,4-트리아졸(TAZ), 8-히드록시퀴놀리놀라토-리튬(Liq), 4,7-디페닐-1,10-페난스롤린(BPhen), 비스-(2-메틸-8-퀴놀리노레이트)-4-(페닐페놀라토)알루미늄(BAIq), 1,3-비스[2-(2,2'-비페리딘-6-일)-1,3,4-옥사디아조-5-일]벤젠(Bpy-OXD), 6,6'-비스[5-(비페닐-4-일)-1,3,4-옥사디아조-2-일]-2,2'-비페리딘(BP-OXD-Bpy), 4-(나프탈렌-1-일)-3,5-디페닐-4H-1,2,4-트리아졸(NTAZ), 2,9-비스(나프탈렌-

2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난스롤린(NBphen), 2,7-비스[2-(2,2'-비피리딘-6-일)-1,3,4-옥사디아조-5-일]-9,9-디메틸플루오렌(Bby-FOX), 1,3-비스[2-(4-테르트-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아조-5-일]벤젠(OXD-7), 트리스(2,4,6-트리메틸-3-(피리딘-3-일)페닐)보란(3TPYMB), 1-메틸-2-(4-(나프탈렌-2-일)페닐)-1H-이미다조[4,5-f][1, 10]페난스롤린(2-NPIP), 2-페닐-9,10-디(나프탈렌-2-일)-안트라센(PADN), 2-(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난스롤린(HNBphen)과 같은 아졸 화합물들을 포함한다. 여기서 층(5)은 전자 수송을 용이하게 하기 위해 그리고 OLED 층들의 경계면에서 여기자의 켄칭(quenching)을 막기 위해 버퍼층 또는 차단층으로 사용된다. 바람직하게는 층(5)은 전자의 이동성을 개선시키고 여기자의 켄칭을 감소시킨다. 한 바람직한 실시예에서 TPBI는 전자 전도 물질로서 사용된다.

[0298] 정공 전도 물질 및 전자 전도 물질로서 앞서 언급된 물질에 의해 다수의 기능들이 충족될 수 있다. 예컨대 몇몇 전자 전도 물질들은 저 준위의 HOMO를 가질 경우에는 동시에 정공 차단 물질로 작용한다. 이러한 전자 전도 물질들은 예컨대 정공/여기자 차단층(4)에서 사용될 수 있다. 그러나 또한 정공/여기자 차단층으로서의 기능이 층(5)에 의해 실행될 수 있으므로, 층(4)이 생략될 수 있다.

[0299] 전하 수송 층들은 또한 한편으로는 층 두께를 크게 형성하고(핀 홀(pin hole)/단락 방지) 다른 한편으로는 장치의 동작전압을 최소화하기 위해 사용된 물질들의 수송 특성을 개선하기 위해 전자 도핑될 수 있다. 예컨대 정공 전도 물질들이 전자 수용체에 의해 도핑될 수 있는데, 예컨대 TPD 또는 TDTA와 같은 프탈로시아닌 및/또는 아릴아민이 테트라플루오르-테트라시아노퀴노디메탄(F4-TCNQ) 또는 MoO₃ 또는 WO₃에 의해 도핑될 수 있다. 전자 전도 물질들은 예컨대 리튬을 갖는 Alq₃과 같은 알칼리 금속에 의해 도핑될 수 있다. 또한 전자 전도체가 Cs₂CO₃와 같은 염에 의해 도핑될 수도 있다. 전자 도핑은 종래에 공지되어 있으며 예컨대 W.Gao, A.Kahn, J.Appl. Phys., Vol. 94, No. 1(2003.7.1.) (p 도핑된 유기층); A.G. Werner, F. Li, K. Harada, M.Pfeiffer, T.Fritz, K.Leo. Appl. Phys. Lett., Vol. 82, No. 25(2003.6.23.) 및 Pfeffer et al., Organic Electronics 2003, 4, 89-103에 공지되어 있다. 예컨대 정공 전도층은 카르벤 착체, 예컨대 Ir(dpbic)₃ 이외에 MoO₃ 또는 WO₃에 의해 도핑될 수 있다.

[0300] 캐소드(6)는 전자 또는 음극 전하 캐리어를 주입하기 위해 사용되는 전극이다. 캐소드를 위해 적합한 재료들은 원소 주기율표(기존의 IUPAC 버전)의 1a족의 알칼리 금속들, 예컨대 Li, Cs, IIa족의 알칼리토류 금속들, 예컨대 칼슘, 바륨 또는 마그네슘, IIb족의 금속들, 예컨대 란타나이드(Lanthanide) 및 사마륨(Samarium)과 같은 악티나이드(Actinide)로 이루어진 군들에서 선택된다. 또한 알루미늄 또는 인듐과 같은 금속들 그리고 앞서 언급한 모든 금속들의 결합이 사용될 수도 있다. 또한 동작전압(Operating Voltage)을 감소시키기 위해 리튬을 포함하는 유기금속 화합물 또는 LiF가 유기층과 캐소드 사이에 제공될 수 있다.

[0301] 본 발명에 따른 OLED는 또한 종래에 공지된 추가 층을 포함할 수도 있다. 예컨대 층(2)과 발광층(3) 사이에 양극 전하 수송을 용이하게 하고 및/또는 층의 밴드갭을 서로 매칭시키는 층이 제공될 수 있다. 이에 대한 대안으로서 상기 추가 층이 보호층으로 사용될 수 있다. 이와 유사한 방식으로 추가 층들이 발광층(3)과 층(4) 사이에 제공될 수 있어서, 음극 전하 수송을 용이하게 하고 및/또는 층들 간의 밴드 갭을 서로 매칭시킬 수 있다. 이에 대한 대안으로서 상기 층이 보호층으로서 사용될 수 있다.

[0302] 바람직한 한 실시예에서 본 발명에 따른 OLED는 층들 (1) 내지 (6)에 대해 추가로 아래의 추가 층들:

[0303] - 애노드(1)와 정공 수송층(2) 사이의 정공 주입층;

[0304] - 정공 수송층(2)과 발광층(3) 사이의 전자 차단층;

[0305] - 전극 수송층(5)과 캐소드(6) 사이의 전자 주입층

[0306] 중 하나 이상을 포함한다.

[0307] 정공 주입층을 위한 재료들은 구리 프탈로시아닌, 4,4',4''-트리스(N-3-메틸페닐-N-페닐-아미노)트리페닐아민(m-MTDATA), 4,4',4''-트리스(N-(2-나프틸)-N-페닐-아미노)트리페닐아민(2T-NATA), 4,4',4''-트리스(N-(1나프틸)-N-페닐-아미노)트리페닐아민(1T-NATA), 4,4',4''-트리스(N,N-디페닐-아미노)트리페닐아민(NATA), 티탄옥사이드프탈로시아닌, 2,3,5,6-테트라플루오로-7,7,8,8-테트라시아노-퀴노디메탄(F4-TCNQ), 피라지노[2,3-f][1,10]페난스롤린-2,3-디카보니트릴(PPDN), N,N,N',N'-테트라키스(4-메톡시페닐)벤지딘(MeO-TPD), 2,7-비스[N,N-비스(4-메톡시-페닐)아미노]-9,9-스피로비플루오렌(MeO-스피로-TPD), 2,2'-비스[N,N-비스(4-메톡시-페닐)아미노]-9,9-스피로비플루오렌(2,2'-MeO-스피로-TPD), N,N'-디-페닐-N,N'-디-[4-N,N-디-톨리-아미노]페닐]벤지딘(NTNPB), N,N'-디-페닐-N,N'-디-[4-(N,N-디-페닐-아미노)페닐]벤지딘(NPNPB), N,N'-디

(나프탈렌-2-일)-N,N'-디페닐벤젠-1,4-디아민(β -NPP)로부터 선택될 수 있다.

[0308] 전자 주입층을 위한 재료로서 예컨대 LiF, Cs₂CO₃ 또는 Li₃PO₄가 선택될 수 있다.

[0309] (예컨대 전기화학적 조사를 기반으로) 어떻게 적합한 물질들을 선택해야 하는가에 대해서는 종래에 공지되어 있다. 개별 층에 대한 적합한 물질들이 종래에 공지되어 있으며 예컨대 WO 00/70655에 공지되어 있다.

[0310] 또한 본 발명에 따른 OLED에 사용된 몇몇 층들은 전하 캐리어 수송 효과를 높이기 위해 표면 처리될 수 있다. 앞서 언급한 개별 층들의 물질에 관한 선택은 높은 효율과 긴 수명을 갖는 OLED를 획득하도록 결정된다.

[0311] 본 발명에 따른 OLED의 제조는 종래에 공지된 방법에 따라 이루어질 수 있다. 일반적으로 본 발명에 따른 OLED는 적합한 기판 위에 개별 층들을 연속해서 기상증착(Vapor deposition)하여 제조된다. 적합한 기판은 예컨대 유리, 무기반도체 또는 고분자 박막이다. 기상증착을 위해 열증착(thermal evaporation), 화학기상증착(Chemical Vapor Deposition, CVD), 물리기상증착(Physical Vapor Deposition, PVD)등과 같은 통상적인 기술들이 사용될 수 있다. 이에 대한 대안으로서 OLED의 유기층들이 적합한 용매에 용해 또는 분산(dispersion)되어 도포될 수 있으며, 여기서 종래에 공지된 코팅 기술이 사용된다.

[0312] 일반적으로 상이한 층들은 아래의 두께를 갖는다: 애노드(1)는 50nm 내지 500nm, 바람직하게는 100nm 내지 200nm; 정공 전도층(2)은 5nm 내지 100nm, 바람직하게는 20nm 내지 80nm, 발광층(3)은 1nm 내지 100nm, 바람직하게는 10nm 내지 80nm, 정공/여기자 차단층(4)은 2nm 내지 100nm, 바람직하게는 5nm 내지 50nm, 전극 전도층(5)은 5nm 내지 100nm, 바람직하게는 20nm 내지 80nm, 캐소드(6)는 20nm 내지 1000nm, 바람직하게는 30nm 내지 500nm의 두께를 갖는다. 캐소드에 관련된, 본 발명에 따른 OLED의 정공 및 전자의 재결합 영역의 상대적 위치 및 OLED의 방출 스펙트럼은 특히 개별 층들의 상대적 두께에 의해 영향을 받을 수 있다. 다시 말해 전자 수송층의 두께는 바람직하게 재결합 영역의 위치가 다이오드의 광공진기(optical resonator) 특성 및 이미터의 방출 파장에 맞춰지도록 선택되어야 한다. OLED의 개별 층들의 두께의 비는 사용된 물질에 따라 좌우된다. 경우에 따라 사용된 추가 층들의 두께는 종래에 공지되어 있다. 여기서 전자 전도층 및/또는 정공 전도층은 전기적으로 도핑될 경우에 주어진 층 두께보다 큰 두께를 가질 수 있다.

[0313] 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 실물 화합물이 발광층 및/또는 정공/여기자 차단층에 사용됨으로써 높은 효율과 긴 수명을 갖는 OLEDs가 획득될 수 있다. OLEDs의 효율은 또한 OLEDs의 다른 층의 최적화에 의해 개선될 수 있다. 예컨대 Ca 또는 Ba와 같은 높은 효율의 캐소드가 경우에 따라서는 LiF로 이루어진 중간층과 결합하여 사용될 수도 있다. 동차전압의 감소 또는 양자효율의 증가를 야기하는 형성된 기판 및 새로운 정공 수송 물질들이 마찬가지로 본 발명에 따른 OLEDs에서 사용될 수 있다. 또한 상이한 층들의 에너지 레벨을 조절하고 전기 루미네선스(electroluminescence)를 용이하게 하기 위해 추가의 층들이 OLEDs에 제공될 수 있다.

[0314] OLEDs는 또한 하나 이상의 제 2 발광층을 포함할 수 있다. 여기서 OLEDs의 총발광(total emission)은 두 개 이상의 발광층의 발광으로 이루어지고 백색광을 포함할 수도 있다.

[0315] 본 발명의 또 다른 대상은 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 하나 이상의 실물 화합물 및 하나 이상의 이미터 물질을 포함하는 발광층이다. 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 바람직한 실물 화합물 및 적합하고 바람직한 이미터 물질들 그리고 이미터 물질들과 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 화합물의 바람직한 양이 앞서 언급되었다.

[0316] 본 발명의 또 다른 대상은 본 발명에 따른 발광층을 포함하는 OLED이다.

[0317] OLEDs는 전기 루미네선스가 필요한 모든 장치 내에 사용될 수 있다. 적합한 장치들은 바람직하게 고정식 영상표시장치 및 이동식 영상표시장치 및 조명장치로부터 선택된다. 고정식 영상표시장치는 예컨대 컴퓨터와 텔레비전의 영상표시장치, 프린터와 주방가전의 영상표시장치, 광고판, 조명, 안내판이다. 이동식 영상표시장치는 예컨대 휴대전화, 노트북, 디지털카메라, 자동차의 영상표시장치 및 버스와 열차의 목적지 표시기이다.

[0318] 또한 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 실물 화합물들은 역구조(inverted structure)를 갖는 OLEDs에 사용될 수 있다. 바람직하게는 본 발명에 따라 사용된 화학식(I) 및/또는 (Ib)의 화합물들이 역구조를 갖는 OLEDs에서 정공/여기자 차단 물질로서 사용된다. 역구조를 갖는 OLEDs의 구조 및 통상적으로 상기 OLEDs에서 사용된 물질들은 종래에 공지되어 있다.

[0319] 또한 본 발명은 컴퓨터와 텔레비전의 영상표시장치, 프린터와 주방가전의 영상표시장치 및 광고판, 조명, 안내판과 같은 고정식 영상표시장치와 휴대전화, 노트북, 디지털카메라, 자동차의 영상표시장치 및 버스와 열차의 목적지 표시기와 같은 이동식 영상표시장치로 이루어진 군으로부터 선택된 장치에 관한 것이다.

도면의 간단한 설명

[0320]

아래의 예들과 그림들은 본 발명을 보충 설명한다.

도 1은 다이오드에 3의 OLED의 a) 전류-전압 곡선 및 b) 전류효율 곡선을 도시한다.

도 2는 다이오드에 4의 OLED의 a) 전류-전압 곡선 및 b) 전류효율 곡선을 도시한다.

도 3은 다이오드에 5의 OLED의 a) 전류-전압 곡선 및 b) 전류효율 곡선을 도시한다.

도 4는 다이오드에 6의 OLED의 a) 전류-전압 곡선 및 b) 전류효율 곡선을 도시한다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0321]

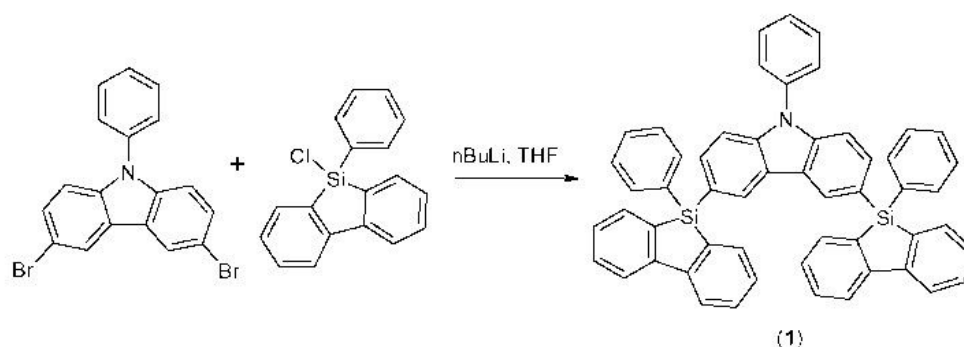
예들

[0322]

A 합성에 관한 예들:

[0323]

예 1: 화학식(1)의 실물의 제조



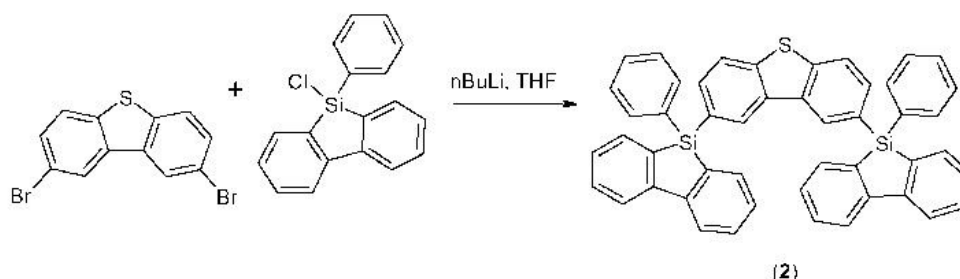
[0324]

[0325]

건조된 THF(100mL)에 용해된 9-페닐-3,6-디브롬-9H-카바졸(*Tetrahedron*, **1998**, 54, 12707-12714)(2.1g, 5.1mmol)의 용액이 아르곤 대기하에서 -78°C 에서 n-부틸리튬(헥산 내 1.6M, 8.0 mL, 12.8mmol)과 천천히 혼합되어, -78°C 에서 1h 동안 교반된다. 이 혼합물은 -78°C 에서 건조된 THF(25mL)에 5-클로르-5-페닐디벤조실롤 용액(*J. Am. Chem. Soc.* 1958, 80, 1883)을 첨가한 후에 하룻밤 동안 교반하에 실온에서 가열된다. 과잉 부틸리튬은 포화된 암모늄클로라이드 용액에 의해 가수분해된다. 분리된 생성물은 필터링되어 CH_2Cl_2 에 의해 완전히 세척된다. 결합된 CH_2Cl_2 여과액은 H_2O 에 의해 세척되어, Na_2SO_4 에 의해 건조되고 압축된다. 침전물은 에탄올에 침지되어, 필터링되고 건조된다. 수득물(1): 60%, $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3, 400\text{MHz})$: $\delta=7.32(\text{m}, 8\text{H})$, $7.42\text{--}7.52(\text{m}, 13\text{H})$, $7.63(\text{d}, 2\text{H})$, $7.68(\text{d}, 4\text{H})$, $7.82(\text{d}, 4\text{H})$, $7.90(\text{d}, 4\text{H})$, $8.38(\text{s}, 2\text{H})$.

[0326]

예 2: 화학식(2)의 실물의 제조



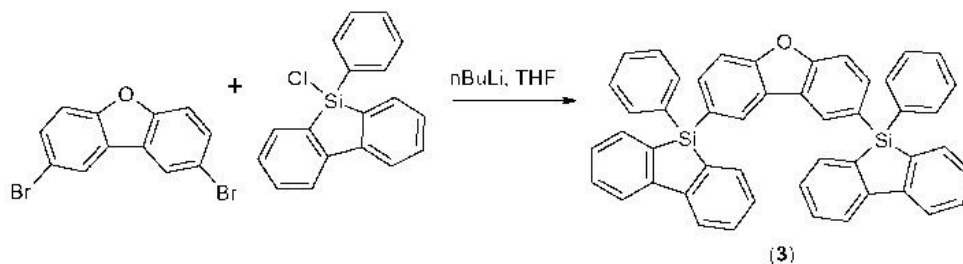
[0327]

[0328]

건조된 THF(25mL)에 용해된 2,8-디브로미디벤조티오펜(*J. Catal.* **1997**, 170, 29)(1.8g, 5.3mmol) 용액이 아르곤 대기하에서 -78°C 에서 n-부틸리튬(헥산 내 1.6M, 8.0 mL, 13.4mmol)과 천천히 혼합되어, -78°C 에서 1h 동안 교반된다. 이 혼합물은 -78°C 에서 건조된 THF(20mL)에 5-클로르-5-페닐디벤조실롤 용액(*J. Am. Chem. Soc.* 1958, 80, 1883)을 첨가한 후에 하룻밤 동안 교반하에 실온에서 가열된다. 이 혼합물은 MeOH 및 H_2O 와 혼합되어 CH_2Cl_2 에 의해 추출된다. 결합된 유기상(organic phase)이 H_2O 에 의해 세척되어, Na_2SO_4 에 의해 건조되고 압축된다. 추

출물은 에탄올에 침지되어, 필터링되고 건조된다. 플래쉬 컬럼 크로마토그래피(Flash-Column chromatography)(SiO₂, 시클로헥산 대 시클로헥산/CH₂Cl₂의 농도 기울기 4:1). 수득율(2): 60%, ¹H-NMR(CDCl₃, 400MHz): δ=7.24(m, 8H), 7.43(t, 2H), 7.51(dd, 4H), 7.67(m, 6H), 7.81(m, 6H), 7.92(d, 4H), 8.31(s, 2H).

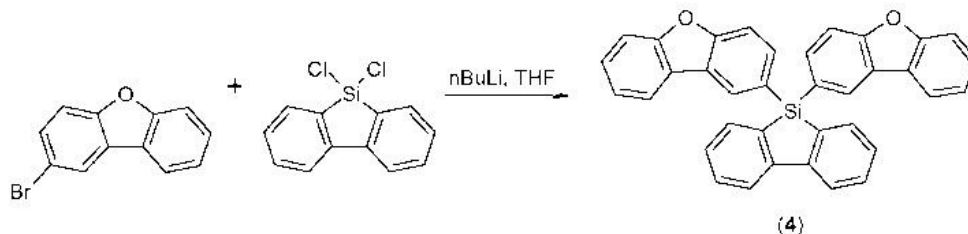
[0329] 예 3: 화학식(3)의 실물의 제조



[0330]

[0331] 건조된 THF(500mL)에 용해된 2,8-디브로미디벤조티오펜(*J. Catal.* **1997**, 170, 29와 유사함)(8.73g, 26.8mmol) 용액이 아르곤 대기하에서 -78℃에서 n-부틸리튬(헥산 내 1.6M, 41.8 mL, 66.9mmol)과 천천히 혼합되어, -78℃에서 1h 동안 교반된다. 이 혼합물은 -78℃에서 건조된 THF(80mL)에 5-클로르-5-페닐디벤조실롤 용액(*J. Am. Chem. Soc.* 1958, 80, 1883)을 첨가한 후에 하룻밤 동안 교반하에 실온에서 가열된다. 이 혼합물은 MeOH 및 H₂O와 혼합되어, CH₂Cl₂에 의해 추출된다. 결합된 유기상은 H₂O에 의해 세척되어, Na₂SO₄에 의해 건조되고 압축된다. 플래쉬 컬럼 크로마토그래피(SiO₂, 시클로헥산 대 시클로헥산/CH₂Cl₂의 농도 기울기 4:1). 수득율(3): 43%, ¹H-NMR(CDCl₃, 400MHz): δ=7.33(m, 8H), 7.42(t, 2H), 7.50(dd, 4H), 7.55(d, 2H), 7.64(d, 2H), 7.72(d, 4H), 7.81(d, 4H), 7.93(d, 4H), 8.22(s, 2H).

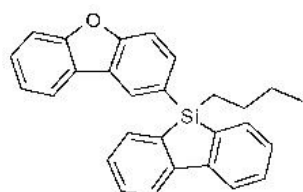
[0332] 예 4: 화학식(4)의 실물의 제조



[0333]

[0334] 건조된 THF(70mL)에 용해된 2-디브로미디벤조푸란(*J. Org. Chem.* **1997**, 62, 1348)(1.97g, 7.96mmol) 용액이 아르곤 대기하에서 -78℃에서 n-부틸리튬(헥산 내 1.6M, 5.7mL, 9.2mmol)과 천천히 혼합되어, -78℃에서 1h 동안 교반된다. 이 혼합물은 -78℃에서 건조된 THF(10mL)에 5,5-디클로르디벤조실롤 용액(*Chem. Lett.* **2007**, 36, 1138)(1.0g, 4.0mmol)을 첨가한 후에 하룻밤 동안 교반하에 실온에서 가열된다. 이 혼합물은 포화된 NH₄Cl 용액과 혼합되어, CH₂Cl₂에 의해 추출된다. 결합된 유기상은 H₂O에 의해 세척되어, Na₂SO₄에 의해 건조되고 압축된다. 플래쉬 컬럼 크로마토그래피(SiO₂, 시클로헥산 대 시클로헥산/CH₂Cl₂의 농도 기울기 4:1). 수득율(4): 48%, ¹H-NMR(CDCl₃, 400MHz): δ=7.32(dd, 2H), 7.38(dd, 2H), 7.44(dd, 2H), 7.54(m, 4H), 7.59(d, 2H), 7.77(d, 2H), 7.91(d, 4H), 7.96(d, 2H), 8.30(s, 2H).

[0335] 부수 성분으로서



[0336]

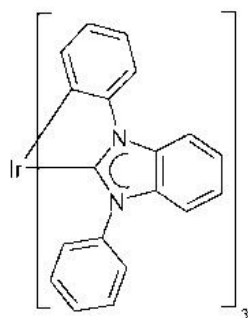
- [0337] 이 분리되며,
- [0338] 수득율: 5.9%
- [0339] $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3, 400\text{MHz})$: $\delta=0.82(\text{t}, 3\text{H}), 1.38(\text{m}, 6\text{H}), 7.32(\text{m}, 3\text{H}), 7.45(\text{m}, 3\text{H}), 7.56(\text{dd}, 2\text{H}), 7.62(\text{d}, 1\text{H}), 7.72(\text{d}, 2\text{H}), 7.88(\text{d}, 2\text{H}), 7.94(\text{d}, 1\text{H}), 8.19(\text{s}, 1\text{H})$.

[0340] **B 다이오드예:**

[0341] 예 1: 매트릭스 물질로서 화합물(1)(합성에 관한 예 1) 및/또는 화합물(2)(합성에 관한 예 2)을 갖는 OLED의 제조

[0342] 애노드로 사용된 ITO-기판은 먼저 LCD 제작용 상용화된 세척제(Deconex[®] 20NS 및 중화제 25ORGAN-ACID[®])에 의해 세척된 다음, 초음파 배스(ultrasonic bath) 내에서 아세톤/이소프로판올 혼합액으로 세척된다. 생성가능한 유기 침전물을 제거하기 위해 상기 기판은 오존 오븐(ozone oven)에서 추가 25분간 연속적인 오존 유동(ozone flux)에 노출된다. 이러한 처리는 또한 ITOs의 정공 주입 특성을 개선시킨다.

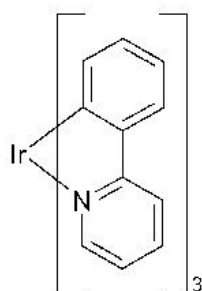
[0343] 그런 다음 아래에 언급되는 유기 물질들이 대략 10^{-8} mbar에서 대략 0.5-5nm/초의 비율로 세척된 기판 위로 증착된다. 정공 전도체로서 50% $\text{Ir}(\text{dpbic})_3$ 및 50% MoO_3 으로 이루어진 혼합물이 35nm의 두께로 기판 위로 제공된다. 그런 다음 20nm 두께의 도핑되지 않은 층 $\text{Ir}(\text{dpbic})_3$



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

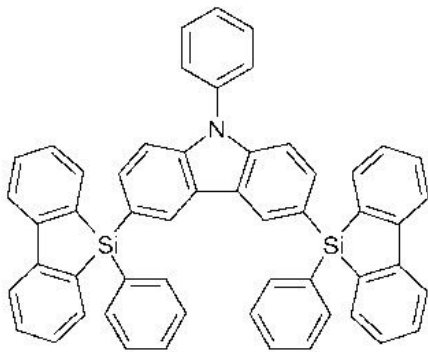
- [0344]
- [0345] 이 제공된다($\text{Ir}(\text{dpbc})_3$ 의 제조에 관해서 WO 2005/019373의 Ir-복합체(7) 참조).

[0346] 그런 다음 15 중량%의 이미터 $\text{Ir}(\text{ppy})_3$

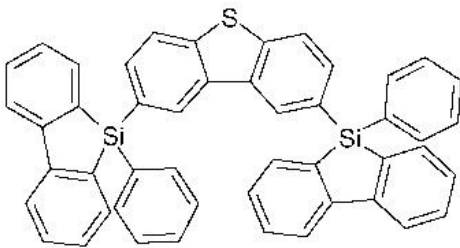


$\text{Ir}(\text{ppy})_3$

- [0347]
- [0348] 및 85 중량%의 화합물(1) 또는 화합물(2)로 이루어진 혼합물이 20nm의 두께로 증착되며, 여기서 첫 번째 혼합물 $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ 은 이미터로서 작용하고 나머지 두 개의 혼합물 중 하나는 각각 매트릭스 물질로서 작용한다:

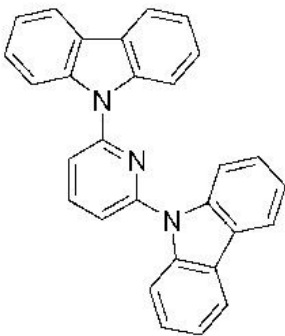


(1)



(2)

그런 다음 물질 mCPy



mCPy

은 10nm의 두께로 여기자 및 정공 차단층으로서 증착된다.

그런 다음 50nm 두께의 전자 수송 물질 Alq₃, 0.75nm 두께의 리튬플루오리드 층 그리고 그 다음에 110nm 두께의 Al 전극이 증착된다.

OLEDs를 특성화하기 위해 전기 루미네스스 스펙트럼이 상이한 전류 및/또는 전압에서 수용된다. 또한 전류 전압 특성곡선은 방출된 광출력(light output)과 결합하여 측정된다. 광출력은 휘도 계측기(luminance meter)에 의한 캘리브레이션(calibration)을 통해 측광(photometric) 수치로 계산될 수 있다.

언급된 OLEDs에 대한 전기광학적 데이터는 다음과 같다:

표 1

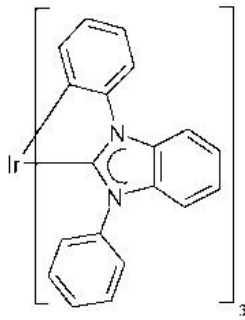
	화합물(1)	화합물(2)
최대 방출	515nm	516nm
CIE(x, y)	X=0.329 Y=0.571	X=0.325 Y=0.572
8V에서의 광도	480 cd/m2	1900 cd/m2

예 2: 차단물질 및/또는 매트릭스 물질로서 화합물(1)(합성에 관한 예 1) 및/또는 화합물(2)(합성에 관한 예 2) 및/또는 화합물(3)(합성에 관한 예 3) 및/또는 화합물(4)(합성에 관한 예 4)을 갖는 OLED의 제조

애노드로 사용된 ITO-기판은 먼저 LCD 제작용 상용화된 세척제(Deconex[®] 20NS 및 중화제 25ORGAN-ACID[®])에 의해 세척된 다음, 초음파 배스 내에서 아세톤/이소프로판올 혼합액으로 세척된다. 생성가능한 유기 침전물을 제거하기 위해 상기 기판은 오존 오븐에서 추가 25분간 연속적인 오존 유동에 노출된다. 이러한 처리는 또한 ITOs의 정공 주입 특성을 개선시킨다.

그런 다음 하기에 언급되는 유기 물질들이 대략 10⁻⁸ mbar에서 대략 0.5-5nm/초의 비율로 세척된 기판 위로 증착

된다. 정공 전도체로서 50% Ir(dpbic)₃ 및 50% MoO₃으로 이루어진 혼합물이 35nm의 두께로 기판 위로 제공된다. 그런 다음 20nm 두께의 도핑되지 않은 층 Ir(dpbic)₃

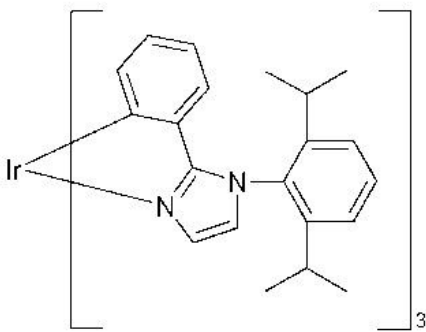


Ir(dpbic)₃

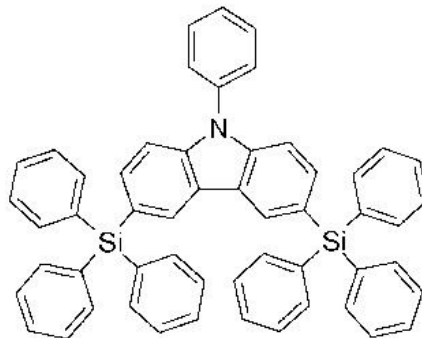
[0360]

[0361] 이 제공된다(Ir(dpbic)₃의 제조에 관해서 WO 2005/019373의 Ir-복합체(7) 참조).

[0362] 그런 다음 10 중량%의 이미터 및 90 중량%의 화합물 SiCz(기준)



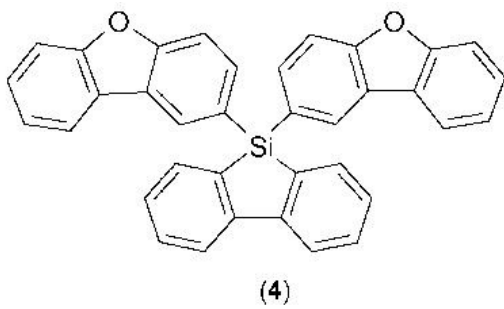
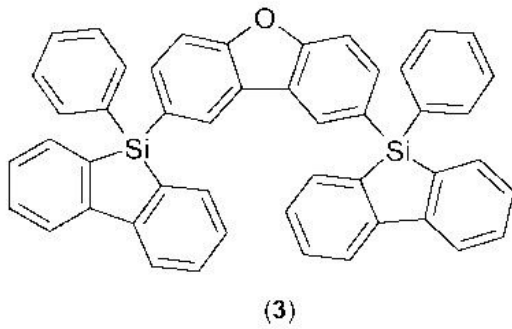
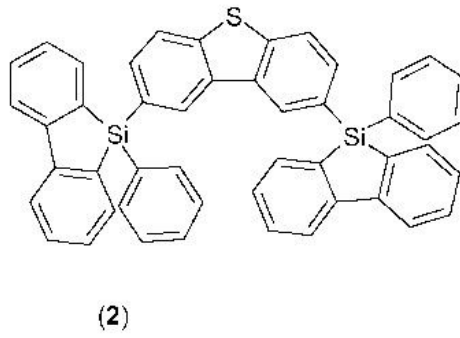
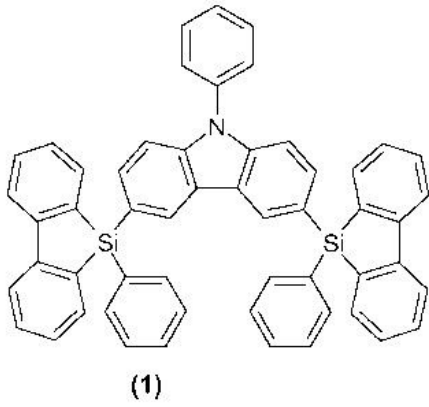
HBE-1



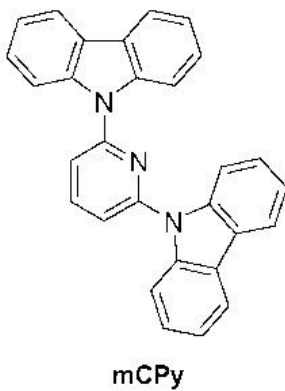
SiCz

[0363]

[0364] 또는 화합물 (1), (2), (3) 또는 (4)의 혼합물이 20nm의 두께로 증착되며, 여기서 첫 번째 화합물 HBE-1은 이미터로서 작용하고 나머지 화합물들 중 하나는 매트릭스 물질로서 작용한다:



그런 다음 물질 mCPy(기준) 또는 화합물 (3) 또는 (4)가 10nm의 두께로 여기자 및 정공 차단물질로서 증착된다:



그런 다음 50nm의 두께의 전자 수송물질 Alq₃, 0.75nm 두께의 리튬플루오리드 층 그리고 그런 다음 110nm 두께의 Al-전극이 증착된다.

OLEDs를 특성화하기 위해 아래의 표 2에 언급된 상이한 전류 및/또는 전압에서 전기 루미네선스 스펙트럼이 수용된다. 표 2에 언급된 본 발명에 따른 다이오드의 데이터는 기준 다이오드(매트릭스: SiCz; 정공 및 여기자 차단층: mCPy)의 데이터와 비교되어 제시된다. 기준 다이오드의 값은 100으로 설정된다.

표 2

[0371]

물질	기능	8V에서의 광도	300nits에서의 전류효율	300nits에서의 전력효율	디바이스 구조(ITO 125+/- 20nm) (전형적인 작업규정과 유사함, mCPy 및/또는 SiCz를 새로운 물질로 교체함)
SiCz(기준)	매트릭스	100	100	100	50%MoO ₃ :Ir(dpbic) ₃ (35nm)//Ir(dpbic) ₃ (20nm)//10% HBE-1:SiCz (20nm)//mCPy(10nm)//Alq ₃ (50nm)//LiF//Alu
1	매트릭스	297	158	180	50%MoO ₃ :Ir(dpbic) ₃ (35nm)//Ir(dpbic) ₃ (20nm)//10% HBE-1:(1) (20nm)//mCPy(10nm)//Alq ₃ (50nm)//LiF//Alu
2	매트릭스	670	161	209	50%MoO ₃ :Ir(dpbic) ₃ (35nm)//Ir(dpbic) ₃ (20nm)//10% HBE-1:(2) (20nm)//mCPy(10nm)//Alq ₃ (50nm)//LiF//Alu
3	매트릭스	185	117	129	50%MoO ₃ :Ir(dpbic) ₃ (35nm)//Ir(dpbic) ₃ (20nm)//10% HBE-1:(3) (20nm)//mCPy(10nm)//Alq ₃ (50nm)//LiF//Alu
	매트릭스+차단 물질	169	123	134	50%MoO ₃ :Ir(dpbic) ₃ (35nm)//Ir(dpbic) ₃ (20nm)//10% HBE-1:(3) (20nm)//(3)(10nm)//Alq ₃ (50nm)//LiF//Alu
4	매트릭스	337	156	185	50%MoO ₃ :Ir(dpbic) ₃ (35nm)//Ir(dpbic) ₃ (20nm)//10% HBE-1:(4) (20nm)//mCPy(10nm)//Alq ₃ (50nm)//LiF//Alu
	매트릭스+차단 물질	325	155	178	50%MoO ₃ :Ir(dpbic) ₃ (35nm)//Ir(dpbic) ₃ (20nm)//10% HBE-1:(4) (20nm)//(4)(10nm)//Alq ₃ (50nm)//LiF//Alu

[0372]

예 3: 녹색 인광 이미터를 위한 매트릭스 물질로서 화합물(2)을 갖는 OLED

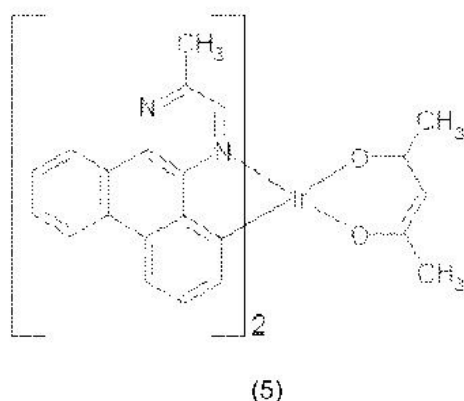
[0373]

여기서 ITO 애노드 상에 20nm 두께의 정공 주입층, 10nm 두께의 정공 전도층, 10nm 두께의 적색 발광층, 5nm 두께의 녹색 발광층, 3nm 두께의 정공 및 여기자 차단층, 30nm 두께의 전자 전도층, 20nm 두께의 전자 주입층 및 200nm 두께의 알루미늄 캐소드를 갖는 OLED가 제공된다.

[0374]

정공 주입층은 예컨대 10 중량% 삼산화몰리브덴 및 90 중량% NPB(N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)-벤지딘))를 갖는다. 이 실시예에서 정공 전도층은 NPB를 갖는다. 적색 발광층은 예컨대 70 중량% NPB, 20 중량% TPBi(2,2',2''-(1,3,5-벤진트릴)-트리스(1-페닐)-1-H-벤지미다졸) 및 10 중량% 이리듐(III)비스(2-메틸디벤조-

[f,h]퀴녹살린)(아세틸아세토네이트)(화합물 5)



[0375]

[0376]

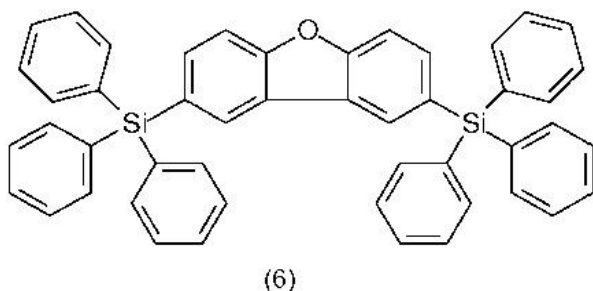
를 갖는다.

[0377]

녹색 발광층은 매트릭스로서 화합물(2)을 가지며 녹색 인광 이미터로서 10 중량% Ir(ppy)₃을 갖는다.

[0378]

차단층은 화합물(6)



[0379]

[0380]

의 물질을 갖는다.

[0381]

전자 전도층은 TPBI를 포함하고 전자 주입층은 50 중량% BCP(2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난스론린) 및 50 중량% 세슘카보네이트를 포함한다.

[0382]

차단층, 정공 전도층을 위한 물질들과 녹색 발광층의 매트릭스 물질의 결합은 녹색 인광 이미터와 함께 높은 양자효율값, 높은 전력효율값, 낮은 전압 및 높은 수명을 달성할 수 있다. 높은 양자효율값 및 높은 전력효율값은 또한 발광층에 인접하게 차단층이 배치됨으로써 달성될 수도 있으며, 상기 차단층은 전하 캐리어, 예컨대 정공이 비발광층 또는 적게 발광하는 층에 계속해서 수송되어, 인접한 층에서 전하 캐리어가 손실되는 것을 막아준다. 또한 녹색 발광층 내 이미터 및 매트릭스를 선택함으로써 예컨대 삼중항 준위(triplet level)와 같은 발광층 내 개별 에너지 레벨의 상태들이 매칭될 수 있다.

[0383]

물질들의 개별 선택에 의해 정공과 전자의 방사 재결합(radiative recombination)이 녹색 발광층 내에서 적어도 부분적으로 나타난다. 다시 말해 녹색 인광 이미터가 매트릭스 내에 잘 삽입되어, 상기 매트릭스와 함께 고용체(solid solution)를 형성할 수 있으며, 상기 고용체에 의해 매트릭스 내에서 이미터 분자의 응집(aggregation) 및 소멸효과(annihilation effect)가 방지되기 때문에 매트릭스 물질로부터 이미터로의 에너지 전달이 잘 이루어진다. 따라서 매트릭스의 삼중항 준위는 이미터 및 장파 발광 이미터를 위해 충분하다.

[0384]

또한 화합물(2) 및 (6)은 HOMO(최고 점유 분자궤도) 및 LUMO(최저 비점유 분자궤도) 간의 밴드갭을 가지며, 여기서 차단층의 화합물(6)은 발광층 내 매트릭스 물질의 화합물(2)보다 낮은 HOMO 값 및 높은 LUMO 값을 갖는다. 상기 두 개의 화합물들은 또한 유사한 구조를 갖기 때문에 화학적으로도 유사하다. 이로 인해 차단층으로부터 녹색 발광층으로의 전자 주입이 잘 이루어지고 녹색 발광층으로부터 나온 정공에 대한 차단 특성이 잘 달성된다. 따라서 화합물(2)은 녹색 이미터를 위한 적합한 매트릭스이며, 또한 바람직하게는 백색 발광 OLEDs의 제조를 위해서도 적합하다.

[0385]

도 1a)는 예 3에 따른 OLED의 전류 전압 곡선을 나타내며, 상기 OLED는 녹색 발광층 내에서 화합물 (2)와

Ir(ppy)₃의 결합을 가지며 차단층 내에서 화합물(6)을 갖는다. mA/cm²의 전류(I)가 V의 전압(U)에 대해 도시된다.

[0386] 도 1b)는 앞서 언급한 OLED의 외부 양자효율 곡선을 나타내며, 상기 OLED는 발광층 내에서 화합물 (2)와 Ir(ppy)₃의 결합을 가지며 차단층 내에서 화합물(6)을 갖는다. cd/m²의 광도(L)에 대한 %의 외부양자효율(EQE)이 도시된다. EQE를 검출하기 위해 OLED에 정해진 전류가 인가되고 스펙트럼이 측정된다. 외부양자효율은 발광층 내에서 주입된 전하 캐리어 당 얼마나 많은 광자(photon)들 - 소자 외부에서 측정됨 - 이 생성되는지를 보여준다. 1000cd/m²의 광도에서 앞서 언급한 OLED에 대해 EQE는 12.5%이다.

[0387] 이에 대한 대안으로서 앞서 언급한 구조의 OLED가 또한 적색 발광층 및 녹색 발광층을 가지며, 여기서 적색 이미터 및 녹색 이미터가 전체적으로 또는 부분적으로 화합물(2)을 포함하는 매트릭스 내에 배치된다.

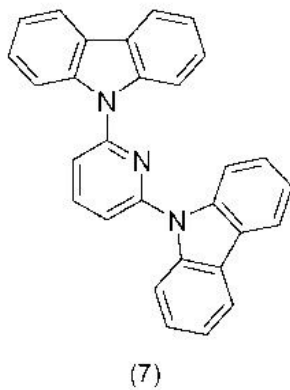
[0388] 예 3의 OLED와 유사하게 또 다른 단색(monochrome) OLEDs가 제조될 수도 있다. 예컨대 발광층 내에 밝은 담청색(light bleu) 인광 이미터를 갖는 담청색 발광 OLED가 제공될 수 있다.

[0389] 예 4: 차단층 내 물질로서 화합물(2)을 갖는 백색 발광 OLED

[0390] 여기서 ITO 애노드 상에 20nm 두께의 정공 주입층, 10nm 두께의 정공 전도층, 10nm 두께의 적색 발광층, 3nm 두께의 녹색 발광층, 10nm 두께의 청색 발광층, 3nm 두께의 정공 및 여기자용 차단층, 10nm 두께의 전자 전도층, 20nm 두께의 전자 주입층 및 200nm 두께의 알루미늄 캐소드를 갖는 백색 발광 OLED가 제조될 수 있다.

[0391] 여기서 정공 주입층, 정공 전도층, 적색 발광층, 전자 전도층 및 전자 주입층이 예 3에 따라 형성된다.

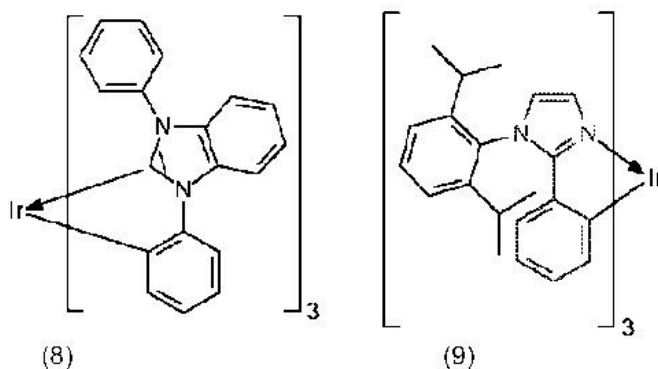
[0392] 녹색 발광층은 10 중량%의 녹색 인광 이미터 Ir(ppy)₃ 및 90 중량%의 화합물(7)



[0393]

[0394] 을 포함한다.

[0395] 청색 발광층은 35:60:5의 비율로 제 1 매트릭스로서의 화합물(8), 제 2 매트릭스로서의 화합물(7) 그리고 청색 인광 이미터로서의 화합물(9)을 갖는다:



[0396]

[0397] 청색 발광층에 인접한 차단층은 화합물(2)의 물질을 포함한다.

- [0398] 도 2a에는 전류 전압 곡선이 도시되고 도 2b에는 OLED를 위한 외부양자효율 곡선이 도시된다. 차단층을 위한 물질로서 화합물(2)을 갖는 백색 발광 OLED는 높은 효율(1000cd/m^2 에서 15.2%의 EQE) 및 낮은 전압을 가지며, 이러한 값은 층 내에 충분한 전자 수송 능력이 제공되는 것을 조건으로 한다. 다시 말해 화합물(2)은 청색 이미터(9)와 함께 청색 발광층 내 매트릭스로서의 화합물 (7) 및 (8)과 함께 차단층을 위한 적합한 물질이다.
- [0399] 예 5: 녹색 인광 이미터 및 청색 인광 이미터를 위한 매트릭스로서 화합물(2)을 갖는 백색 발광 OLED
- [0400] 여기서 ITO 애노드 상에 20nm 두께의 정공 주입층, 10nm 두께의 정공 전도층, 10nm 두께의 적색 발광층, 5nm 두께의 녹색 발광층, 10nm 두께의 청색 발광층, 5nm 두께의 정공 및 여기자 차단층, 30nm 두께의 전자 전도층, 20nm 두께의 전자 주입층 및 200nm 두께의 알루미늄 캐소드를 갖는 백색 발광 OLED가 제조될 수 있다.
- [0401] 여기서 정공 주입층, 정공 전도층, 적색 발광층, 전자 전도층 및 전자 주입층이 예컨대 예 3에 따라 형성된다.
- [0402] 녹색 발광층은 10 중량%의 녹색 인광 이미터 Ir(ppy)_3 및 90 중량%의 매트릭스로서의 화합물(2)을 포함한다.
- [0403] 청색 발광층은 매트릭스로서 화합물(2) 및 층 내에 10 중량%로 제공되는 청색 이미터로서 화합물(9)을 갖는다.
- [0404] 차단층은 화합물(6)의 물질을 갖는다.
- [0405] 이 예에서는 매트릭스 물질로서의 화합물(2)은 상이한 색상의 이미터를 갖는 연속으로 제공되는 두 개의 발광층을 위해 적합하고, 따라서 높은 효율 및 색상(1000cd/m^2 의 CIE 광도에서 CIE가 0.45/0.44임)을 갖는 백색 발광 OLED가 제조될 수 있다.
- [0406] 도 3a 및 도 3b는 이 실시예를 위한 전류효율 곡선 및 외부양자효율 곡선(1000cd/m^2 에서 EQE가 17.8%임)을 도시한다.
- [0407] 이에 대한 대안으로서 앞서 언급한 구조의 OLED는 적색 발광층 및 녹색 발광층을 가지며, 상기 발광층들 내에 적색 이미터 및 녹색 이미터가 한 매트릭스 내에 배치되며, 상기 매트릭스는 완전히 또는 부분적으로 화합물(2)을 포함한다. 또는 OLED가 적색 발광층 및 청색 발광층을 가질 수 있으며, 상기 발광층들 내에 적색 이미터 및 청색 이미터가 한 매트릭스 내에 배치되며, 상기 매트릭스는 완전히 또는 부분적으로 화합물(2)을 포함한다. 또한 매트릭스로서 화합물(2)을 갖는 세 개의 발광층이 모두 하나의 OLED 내에 제공될 수도 있으며, 여기서 화합물(2)은 단독으로 또는 다른 매트릭스 물질들과 결합하여 사용된다.
- [0408] 예 6: 녹색 인광 이미터용 매트릭스 및 청색 인광 이미터용 매트릭스 소자로서 화합물(2)을 갖는 백색 발광 OLED
- [0409] 여기서 ITO 애노드 상에 20nm 두께의 정공 주입층, 10nm 두께의 정공 전도층, 10nm 두께의 적색 발광층, 3nm 두께의 녹색 발광층, 10nm 두께의 청색 발광층, 3nm 두께의 정공 및 여기자 차단층, 30nm 두께의 전자 전도층, 20nm 두께의 전자 주입층 및 200nm 두께의 알루미늄 캐소드를 갖는 백색 발광 OLED가 제조될 수 있다.
- [0410] 여기서 정공 주입층, 정공 전도층, 적색 발광층, 녹색 발광층, 차단층, 전자 전도층 및 전자 주입층은 예컨대 예 5에 따라 형성된다.
- [0411] 청색 발광층은 60 중량%의 제 1 매트릭스로서의 화합물(2), 35 중량%의 제 2 매트릭스로서의 화합물(2) 그리고 층 내에서 5 중량%로 제공되는 청색 인광 이미터로서의 화합물(9)을 포함한다.
- [0412] 이 예에서는 매트릭스 물질로서의 화합물(2)이 연속으로 제공되는 두 개의 발광층을 위해 적합하다. 여기서 화합물(2)은 녹색 발광층 내에서 단독으로 매트릭스 물질로서 제공되고 청색 발광층 내에서 다른 추가 매트릭스 물질들과 혼합되어 제공된다. 이러한 OLED는 전류 밀도 및 광도(100 내지 3000cd/m^2 에서 CIE가 0.44/0.42임)가 바뀔 경우에도 높은 효율 및 높은 색 안전성을 갖는다.
- [0413] 도 4a 및 도 4b는 이 실시예를 위한 전류효율 곡선 및 외부양자효율 곡선(1000cd/m^2 에서 EQE가 18.5%임)을 도시한다.
- [0414] 이에 대한 대안으로서 앞서 언급한 구조의 OLED가 적색 발광층 및 녹색 발광층을 가질 수도 있으며, 상기 발광층들 내에서 적색 이미터 및 녹색 이미터가 한 매트릭스 내에 배치되며, 상기 매트릭스는 완전히 또는 부분적으로 화합물(2)을 포함한다. 이에 대한 대안으로서 상기 OLED가 적색 발광층 및 청색 발광층을 가질 수 있으며, 상기 발광층들 내에서 적색 이미터 및 청색 이미터가 한 매트릭스 내에 배치되며, 상기 매트릭스는 완전히 또는

부분적으로 화합물(2)을 포함한다. 또 다른 한 실시예에서 상기 OLED는 녹색 발광층 및 청색 발광층을 가질 수 있으며, 상기 발광층들 내에서 녹색 이미터 및 청색 이미터가 한 매트릭스 내에 배치되며, 상기 매트릭스는 완전히 또는 부분적으로 화합물(2)을 포함한다. 이 경우에 화합물(2)을 갖는 모든 발광층들이 매트릭스로서 형성될 수도 있으며, 이때 화합물(2)은 단독으로 또는 다른 매트릭스 물질들과 결합하여 제공된다.

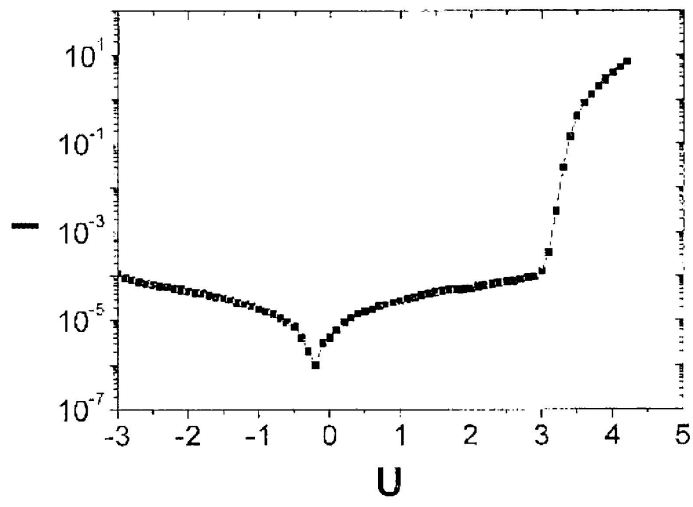
- [0415] 위에 언급된 예 3 내지 6에 대하여 개별 층들에 대한 물질들이 변화될 수 있다.
- [0416] 예컨대 녹색 인광 이미터로서 트리스(2-페닐피리딘)이리듐(III), 트리스(2-(p-톨리)피리딘)이리듐(III),
- [0417] 비스(2-페닐피리딘)(아세틸아세토네이트)이리듐(III)
- [0418] 비스(2-(p-톨리)피리딘)(아세틸아세토네이트)이리듐(III)
- [0419] 비스[2-(2-하이드록시페닐)벤조티아졸라토]아연(II)
- [0420] 비스[1-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)-이조퀴놀린](아세틸아세토네이트)이리듐(III)
- [0421] 비스(2-벤조[b]티오펜-2-일-피리딘)(아세틸아세토네이트)이리듐(III)
- [0422] 트리스(1-페닐이조퀴놀린)이리듐(III)
- [0423] 비스(1-페닐이조퀴놀린)(아세틸아세토네이트)이리듐(III)
- [0424] 트리스(디벤조일메탄)페난스롤린 유로퓸(III)
- [0425] 오스뮴(II)비스(3-(트리플루오로메틸)-5(4-테르트-부틸피리딜)-1,2,4-트리아졸레이트)디페닐메틸포스핀
- [0426] 오스뮴(II)비스(3-(트리플루오로메틸)-5-(2-피리딜)-1,2,4-트리아졸)디메틸페닐포스핀
- [0427] 오스뮴(II)비스(3-(트리플루오로메틸)-5(4-테르트-부틸피리딜)-1,2,4-트리아졸레이트)디메틸페닐포스핀
- [0428] 비스(2-페닐벤조티아졸라토)(아세틸아세토네이트)이리듐(III)
- [0429] 오스뮴(II)비스(3-트리플루오로메틸-5-(2-피리딜)-피라졸레이트)디메틸페닐포스핀
- [0430] 트리스(2-페닐퀴놀린)이리듐(III)
- [0431] 비스(2-페닐퀴놀린)(아세틸아세토네이트)이리듐(III)
- [0432] 비스[3-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)-이조퀴놀린](아세틸아세토네이트)이리듐(III)
- [0433] 트리스[4,4'-디-테르트-부틸-(2,2')-비피리딘]루테튬(III)
- [0434] 이리듐(III)비스(2-(2'-벤조-티에닐)피리디나토N,C3')(아세틸-아세토네이트)
- [0435] 트리스(1-페닐이조퀴놀린)이리듐(III)
- [0436] 비스(1-페닐이조퀴놀린)(아세틸아세토네이트)이리듐(III)
- [0437] 이리듐(III)비스(디벤조[f,h]-퀴녹살린)(아세틸아세토네이트)
- [0438] 비스(2-(9,9-디부틸플루오레닐)-1-이조퀴놀린)(아세틸아세토네이트)
- [0439] 이리듐(III)비스(2-메틸디벤조-[f,h]퀴녹살린)(아세틸아세토네이트)
- [0440] 비스(2-(9,9-디헥실플루오레닐)-1-피리딘)(아세틸아세토네이트)이리듐(III)
- [0441] 트리스(3-메틸-1-페닐-4-트리메틸-아세틸-5-피라졸린)테르븀(III)
- [0442] 이 사용될 수 있다.
- [0443] 또한 차단층 및/또는 정공 전도층을 위한 재료로서 N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)-9,9-디메틸-플루오렌
- [0444] N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)-9,9-디페닐-플루오렌
- [0445] N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)-9,9-디페닐-플루오렌
- [0446] N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)-2,2-디메틸벤지딘

[0447]	N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)-9,9-스피로비플루오렌
[0448]	2,2',7,7'-테트라키스(N,N-디페닐아미노)-9,9'-스피로비플루오렌
[0449]	N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)-벤지딘
[0450]	N,N'-비스(나프탈렌-2-일)-N,N'-비스(페닐)-벤지딘
[0451]	N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)-벤지딘
[0452]	N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)-9,9-디메틸-플루오렌
[0453]	N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)-9,9-스피로비플루오렌
[0454]	디-[4-(N,N-디톨릴-아미노)-페닐]시클로헥산
[0455]	2,2',7,7'-테트라(N,N-디-톨릴)아미노-스피로-비플루오렌
[0456]	9,9-비스[4-(N,N-비스-비페닐-4-일-아미노)페닐]-9H-플루오렌
[0457]	2,2',7,7'-테트라키스[N-나프탈레닐(페닐)-아미노]-9,9-스피로비플루오렌
[0458]	2,7-비스[N,N-비스(9,9-스피로-비플루오렌-2-일)-아미노]-9,9-스피로비플루오렌
[0459]	2,2'-비스[N,N-비스(비페닐-4-일)아미노]-9,9-스피로비플루오렌
[0460]	N,N'-비스(페난스렌-9-일)-N,N'-비스(페닐)-벤지딘
[0461]	N,N,N',N'-테트라-나프탈렌-2-일-벤지딘
[0462]	2,2'-비스(N,N-디-페닐-아미노)-9,9-스피로비플루오렌
[0463]	9,9-비스[4-(N,N-비스-나프탈렌-2-일-아미노)페닐]-9H-플루오렌
[0464]	9,9-비스[4-(N,N'-비스-나프탈렌-2-일-N,N'-비스-페닐-아미노)-페닐]-9H-플루오렌
[0465]	티타늄옥사이드프탈로시아닌
[0466]	구리 프탈로시아닌
[0467]	2,3,5,6-테트라플루오로-7,7,8,8-테트라시아노-퀴노디메탄
[0468]	4,4',4''-트리스(N-3-메틸페닐-N-페닐-아미노)트리페닐아민(정공 전도층의 도펀트로서)
[0469]	4,4',4''-트리스(N-(2-나프틸)-N-페닐-아미노)트리페닐아민
[0470]	4,4',4''-트리스(N-(1-나프틸)-N-페닐-아미노)트리페닐아민
[0471]	4,4',4''-트리스(N,N-디페닐-아미노)트리페닐아민
[0472]	피라지노[2,3-f][1,10]페난스롤린-2,3-디카보니트릴
[0473]	N,N,N',N'-테트라키스(4-메톡시페닐)벤지딘
[0474]	2,7-비스[N,N-비스(4-메톡시-페닐)아미노]-9,9-스피로비플루오렌
[0475]	2,2'-비스[N,N-비스(4-메톡시-페닐)아미노]-9,9-스피로비플루오렌
[0476]	N,N'-디(나프탈렌-2-일)-N,N'-디페닐벤졸-1,4-디아민
[0477]	N,N'-디-페닐-N,N'-디-[4-(N,N-디-톨릴-아미노)페닐]벤지딘
[0478]	N,N'-디-페닐-N,N'-디-[4-(N,N-디-페닐-아미노)페닐]벤지딘
[0480]	또는 차단층 및/또는 전자 전도층으로서
[0481]	2,2',2''-(1,3,5-벤지네트리일)-트리스(1-페닐-1H-벤지미다졸)
[0482]	2-(4-비페닐릴)-5-(4-테르트-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸
[0483]	2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난스롤린

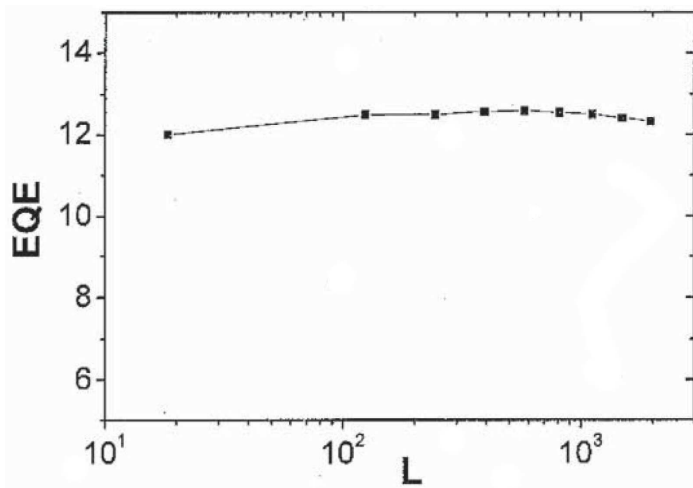
- [0484] 8-하이드록시퀴놀리놀라토-리튬
- [0485] 4-(나프탈렌-1-일)-3,5-디페닐-4H-1,2,4-트리아졸
- [0486] 1,3-비스[2-(2,2'-비피리딘-6-일)-1,3,4-옥사디아조-5-일]벤젠
- [0487] 4,7-디페닐-1,10-페난스롤린
- [0488] 3-(4-비페닐릴)-4-페닐-5-테르트-부틸페닐-1,2,4-트리아졸
- [0489] 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)-4-(페닐페놀라토)알루미늄
- [0490] 6,6'-비스[5-(비페닐-4-일)-1,3,4-옥사디아조-2-일]-2,2'-비피리딜
- [0491] 2-페닐-9,10-디(나프탈렌-2-일)-안트라센
- [0492] 2,7-비스[2-(2,2'-비피리딘-6-일)-1,3,4-옥사디아조-5-일]-9,9-디메틸플루오렌
- [0493] 1,3-비스[2-(4-테르트-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아조-5-일]벤젠
- [0494] 2-(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난스롤린
- [0495] 2,9-비스(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난스롤린
- [0496] 트리스(2,4,6-트리메틸-3-(피리딘-3-일)페닐)보란
- [0497] 1-메틸-2-(4-(나프탈렌-2-일)페닐)-1H-이미다조[4,5-f][1,10]페난스롤린이
- [0498] 사용된다.
- [0499] 또한 예 3의 OLED는 백색을 방출하는 소자를 위해 사용될 수 있으며, 이때 상이한 색의 빛을 방출하는 다수의 단색 OLEDs가 예 3의 OLED와 함께 서로 적층되며 "전하생성층(charge generation layers, CGLs)에 의해 서로 결합한다. 여기서 CGLs는 OLED의 전하 캐리어를 그 위에 또는 그 아래에 배치된 OLED로 수송할 수 있다.
- [0500] 예 3의 OLED는 백색 방출 소자를 구현하기 위해 상이한 색상의 빛을 방출하는 다수의 단색 OLEDs 옆에 배치될 수도 있다.
- [0501] 예 3 내지 6에서 또한 애노드 및/또는 캐소드로서 Cu, Au, Pt, Pd, Ph, Os, Al, Mg, Ca, Ba, Ag, Yb, Fe, Co, Ni, ITO(인듐 주석 산화물), AZO(알루미늄 도핑된 아연 산화물) 및 그 결합으로 이루어진 군으로부터 선택된 물질들이 사용될 수 있다. 또한 주족 금속, 전이 금속, 란타노이드 그리고 주족 금속, 전이 금속 및 란타노이드의 합금이 전극의 재료로서 적합하다.
- [0502] 또한 예 1 내지 6의 OLED는 투명 OLED로 형성될 수 있다. 예 1 내지 6의 OLED는 전면발광(top emitting) 또는 배면발광(bottom emitting) OLED로서 형성될 수도 있다. 전면발광 OLED에서는 기판으로부터 멀리 떨어진 전극이 투명하게 형성되어, 전극을 통한 방출이 이루어진다. 배면발광 OLED에서는 기판 및 기판 위에 배치된 전극이 투명하게 형성되어, 기판을 통한 방출이 이루어진다. 투명 OLED에서는 기판 그리고 상기 기판으로부터 멀리 떨어진 전극 - 둘 다 투명하게 형성됨 - 을 통한 양면발광이 이루어질 수 있다.

도면

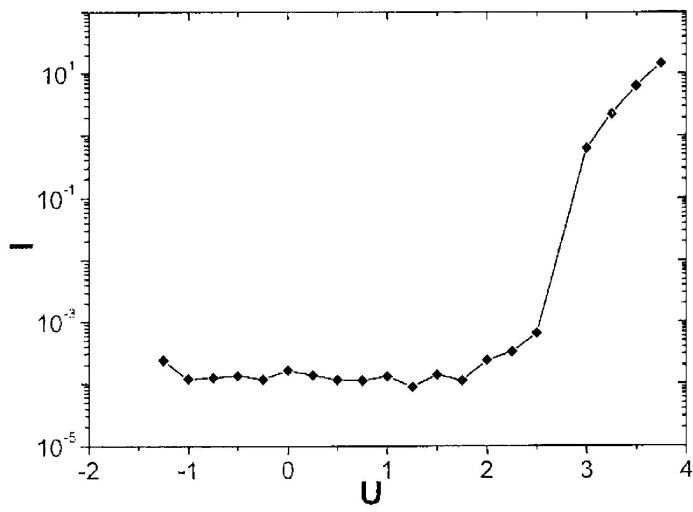
도면1a



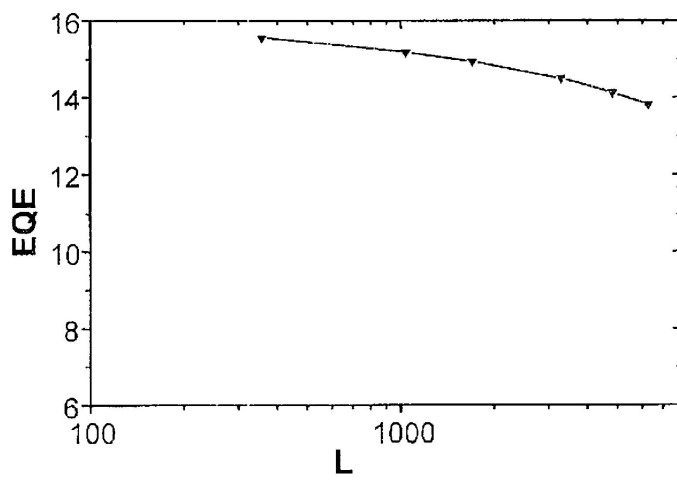
도면1b



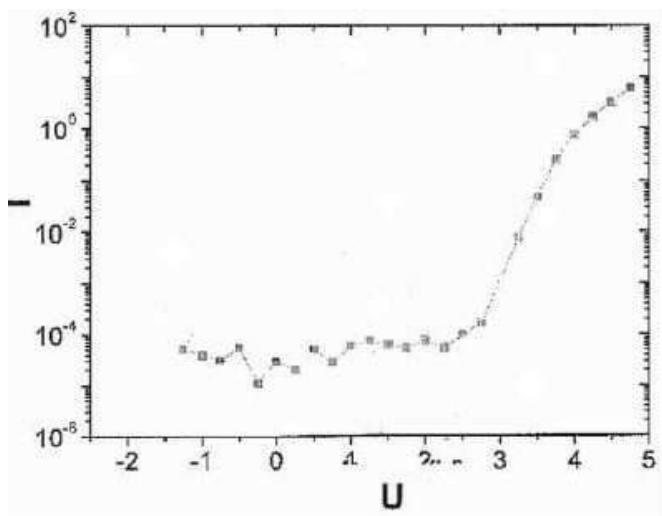
도면2a



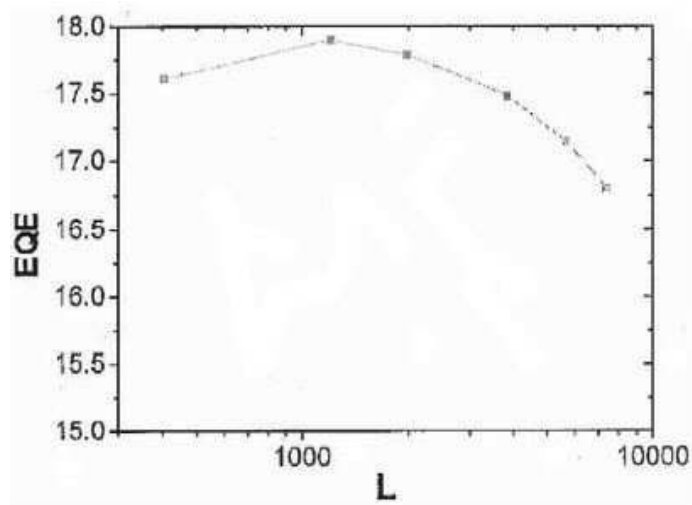
도면2b



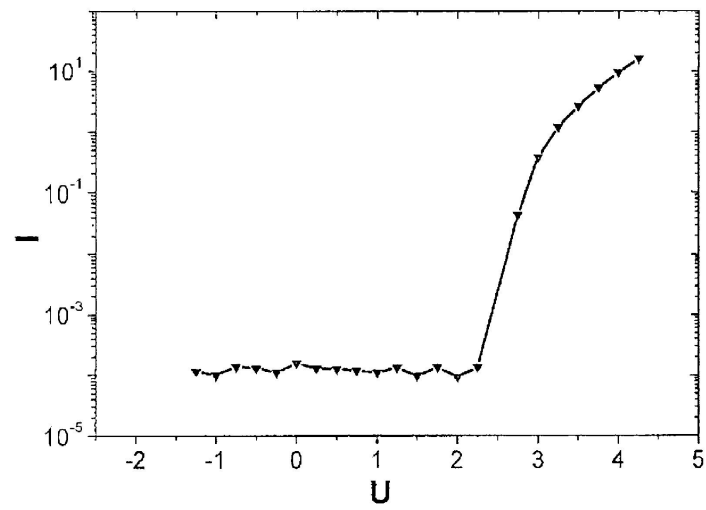
도면3a



도면3b



도면4a



도면4b

