(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2021년02월03일
(11) 등록번호 10-2210980
(24) 등록일자 2021년01월27일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07F 15/00 (2006.01) *C09K 11/06* (2006.01)
H01L 51/00 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
H05B 33/14 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C07F 15/0033 (2013.01)
C09K 11/06 (2021.01)
(21) 출원번호 10-2020-7005950(분할)
(22) 출원일자(국제) 2012년05월25일
심사청구일자 2020년03월27일
(85) 번역문제출일자 2020년02월28일
(65) 공개번호 10-2020-0024957
(43) 공개일자 2020년03월09일
(62) 원출원 특허 10-2019-7033996
원출원일자(국제) 2012년05월25일
심사청구일자 2019년11월18일
(86) 국제출원번호 PCT/US2012/039607
(87) 국제공개번호 WO 2012/166608
국제공개일자 2012년12월06일
(30) 우선권주장
61/572,276 2011년05월27일 미국(US)
(56) 선행기술조사문헌
JP2011089103 A*
KR102086312 B1*
WO2010129323 A1*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
유니버셜 디스플레이 코포레이션
미국, 뉴저지 08618, 유잉, 필립스 불바르 375
(72) 발명자
짜이 쥐-이
미국 08618 뉴저지주 유잉 필립스 블바르 375
시아 추안준
미국 08618 뉴저지주 유잉 필립스 블바르 375
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
김진희, 김태홍

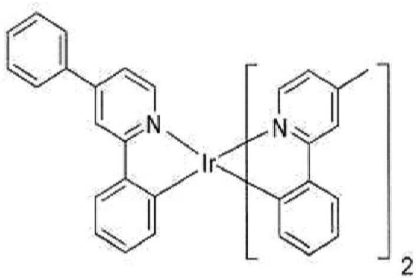
전체 청구항 수 : 총 3 항 심사관 : 김지은

(54) 발명의 명칭 **ＯＬＥＤ 디바이스용 고 효율 황색광 이미터**

(57) 요 약

본 발명은 신규한 헤테로렙틱 이리듐 착물에 관한 것이다. 이러한 이리듐 화합물은 알킬 치환된 페닐피리딘 리간드를 함유하며, 이는 이리듐 착물이 OLED 디바이스에 혼입시 이들 화합물에 이로운 성질을 제공한다.

대 표 도 - 도3



화합물 2
화학식 I

(52) CPC특허분류
H01L 51/0085 (2013.01)
H01L 51/5016 (2013.01)
H05B 33/14 (2013.01)
C09K 2211/185 (2013.01)
(72) 발명자
코타스 그레그
미국 08618 뉴저지주 유잉 필립스 블바르 375
엘세나위 자이나브
미국 08618 뉴저지주 유잉 필립스 블바르 375
안사리 나스린
미국 08618 뉴저지주 유잉 필립스 블바르 375
알레인 버트
미국 08618 뉴저지주 유잉 필립스 블바르 375

명 세 서

청구범위

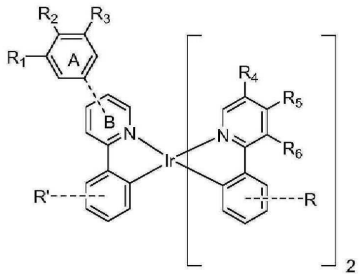
청구항 1

삭제

청구항 2

유기 발광 디바이스의 발광 도펀트로 사용되고, 화학식 I을 갖는 헤테로렙틱 이리듐 화합물을 포함하는 배합물:

<화학식 I>



상기 화학식에서,

R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6은 수소, 중수소, 시클로알킬, 중수소화 시클로알킬, 알킬 및 중수소화 알킬로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되며;

R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6 중 하나 이상은 시클로알킬, 중수소화 시클로알킬, 알킬 또는 중수소화 알킬이며;

임의의 2개의 인접하는 R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6은 임의로 함께 결합되어 고리를 형성하며;

고리 A는 고리 B의 4- 또는 5-위치에 결합되며;

R 및 R'는 일치환, 이치환, 삼치환 또는 사치환을 나타내며, 수소, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 카르복실산, 니트릴, 이소니트릴, 술파닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

청구항 3

애노드;

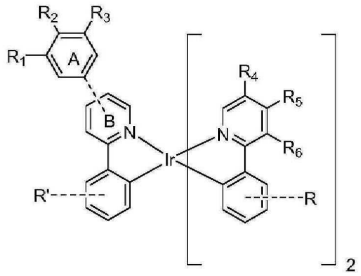
캐소드; 및

상기 애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기층으로서, 발광 도펀트로서 화학식 I을 갖는 헤테로렙틱 이리듐 화합물을 포함하는 유기층

을 포함하는 유기 발광 디바이스를 포함하는 소비재의 제조 방법으로서,

상기 유기층은 열 증발, 잉크-제트, 유기 증기상 증착(OVPD), 유기 증기 제트 프린팅(OVJP)에 의한 증착, 스핀 코팅, 및 기타의 용액계 공정으로부터 선택되는 방법에 의해 증착되는 것인 소비재의 제조 방법:

<화학식 I>



상기 화학식에서,

R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6은 수소, 중수소, 시클로알킬, 중수소화 시클로알킬, 알킬 및 중수소화 알킬로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되며;

R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6 중 하나 이상은 시클로알킬, 중수소화 시클로알킬, 알킬 또는 중수소화 알킬이며;

임의의 2개의 인접하는 R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6은 임의로 함께 결합되어 고리를 형성하며;

고리 A는 고리 B의 4- 또는 5-위치에 결합되며;

R 및 R'는 일치환, 이치환, 삼치환 또는 사치환을 나타내며, 수소, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 카르복실산, 니트릴, 이소니트릴, 술파닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

청구항 4

제3항에 있어서, 마스크를 통한 증착, 냉간 용접, 또는 잉크-제트 또는 OVJD를 사용한 패터닝을 포함하는 패터닝 방법을 더 사용하는 소비재의 제조 방법.

청구항 5

삭제

청구항 6

삭제

청구항 7

삭제

청구항 8

삭제

청구항 9

삭제

청구항 10

삭제

청구항 11

삭제

청구항 12

삭제

청구항 13

삭제

청구항 14

삭제

청구항 15

삭제

청구항 16

삭제

청구항 17

삭제

청구항 18

삭제

청구항 19

삭제

청구항 20

삭제

청구항 21

삭제

청구항 22

삭제

청구항 23

삭제

청구항 24

삭제

청구항 25

삭제

청구항 26

삭제

청구항 27

삭제

청구항 28

삭제

청구항 29

삭제

청구항 30

삭제

청구항 31

삭제

청구항 32

삭제

청구항 33

삭제

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 관련 출원에 대한 교차 참조

[0002] 본원은 2011년 5월 27일자로 출원된 미국 출원 제61/572,276호를 우선권주장으로 하며, 상기 출원의 개시내용은 본원에 그 전문이 참고로 포함된다.

[0003] 당해 발명은 합동 산학 연구 협약에 따라 리전츠 오브 더 유니버시티 오브 미시간, 프린스턴 유니버시티, 더 유니버시티 오브 서던 캘리포니아 및 더 유니버셜 디스플레이 코포레이션 당사자 중 하나 이상에 의하여, 이를 대신하여 및/또는 이와 관련하여 완성되었다. 협약은 당해 발명이 완성된 일자에 그리고 일자 이전에 발효되었으며, 당해 발명은 협약서의 범주내에서 수행된 활동의 결과로서 완성되었다.

[0004] 발명의 분야

[0005] 본 발명은 페닐피리딘 리간드를 함유하는 헤테로렙틱 이리듐 착물에 관한 것이다. 이들 헤테로렙틱 이리듐 착물은 OLED 디바이스에서의 도펀트로서 유용하다.

배 경 기 술

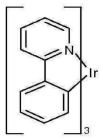
[0006] 배경

[0007] 유기 물질을 사용하는 광전자 디바이스는 여러 이유로 인하여 점차로 중요해지고 있다. 이와 같은 디바이스를 제조하는데 사용되는 다수의 물질은 비교적 저렴하여 유기 광전자 디바이스는 무기 디바이스에 비하여 경제적 잇점면에서 잠재성을 갖는다. 또한, 유기 물질의 고유한 성질, 예컨대 이의 가요성은 가요성 기판상에서의 제조와 같은 특정 적용예에 매우 적합하게 될 수 있다. 유기 광전자 디바이스의 예로는 유기 발광 디바이스(OLED), 유기 광트랜지스터, 유기 광전지 및 유기 광검출기를 들 수 있다. OLED의 경우, 유기 물질은 통상의 물질에 비하여 성능면에서의 잇점을 가질 수 있다. 예를 들면, 유기 발광층이 광을 방출하는 파장은 일반적으로 적절한 도펀트로 용이하게 조절될 수 있다.

[0008] OLED는 디바이스를 가로질러 전압을 인가시 광을 방출하는 유기 박막을 사용하게 한다. OLED는 평판 패널 디스플레이, 조명 및 역광과 같은 적용예에 사용하기 위한 점차로 중요해지는 기술이다. 여러가지의 OLED 물질 및 형상은 미국 특허 제5,844,363호, 제6,303,238호 및 제5,707,745호에 기재되어 있으며, 이들 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다.

[0009] 인광 발광 분자에 대한 하나의 적용예는 총 천연색 디스플레이이다. 이러한 디스플레이에 대한 산업적 기준은 "포화" 색상으로서 지칭하는 특정 색상을 방출하도록 조정된 픽셀을 필요로 한다. 특히, 이러한 기준은 포화 적색, 녹색 및 청색 픽셀을 필요로 한다. 색상은 당업계에 공지된 CIE 좌표를 사용하여 측정될 수 있다.

[0010] 녹색 발광 분자의 일례로는 하기 화학식을 갖는 $Ir(ppy)_3$으로 나타낸 트리스(2-페닐피리딘) 이리듐이다:

[0011] 

[0012] 본원에서의 이와 같은 화학식 및 하기의 화학식에서, 본 출원인은 질소로부터 금속(여기에서는 Ir)으로의 배위 결합을 직선으로 도시한다.

[0013] 본원에서, 용어 "유기"라는 것은 유기 광전자 디바이스를 제조하는데 사용될 수 있는 중합체 물질뿐 아니라, 소분자 유기 물질을 포함한다. "소분자"는 중합체가 아닌 임의의 유기 물질을 지칭하며, "소분자"는 실제로 꽤 클 수도 있다. 소분자는 일부의 상황에서는 반복 단위를 포함할 수 있다. 예를 들면, 치환기로서 장쇄 알킬 기를 사용하는 것은 "소분자" 유형으로부터 분자를 제거하지 않는다. 소분자는 또한 예를 들면 중합체 주쇄상에서의 측쇄기로서 또는 주쇄의 일부로서 중합체에 투입될 수 있다. 소분자는 또한 코어 부분상에 생성된 일련의 화학적 셀로 이루어진 덴드리머의 코어 부분으로서 작용할 수 있다. 덴드리머의 코어 부분은 형광 또는 인광 소분자 이미터일 수 있다. 덴드리머는 "소분자"일 수 있으며, OLED 분야에서 통상적으로 사용되는 모든 덴드리머는 소분자인 것으로 밝혀졌다.

[0014] 본원에서 사용한 바와 같이, "상부"는 기판으로부터 가장 멀리 떨어졌다는 것을 의미하며, "하부"는 기판에 가장 근접하다는 것을 의미한다. 제1층이 제2층"의 상부에 위치하는" 것으로 기재될 경우, 제1층은 기판으로부터 멀리 떨어져 배치된다. 제1층이 제2층과 "접촉되어 있는" 것으로 명시되지 않는다면 제1층과 제2층 사이에는 다른 층이 존재할 수 있다. 예를 들면, 캐소드와 애노드의 사이에 다양한 유기층이 존재할 수 있을지라도, 캐소드는 애노드"의 상부에 위치하는" 것으로 기재될 수 있다.

[0015] 본원에서 사용한 바와 같이, "용액 가공성"은 용액 또는 현탁액 형태로 액체 매체에 용해, 분산 또는 수송될 수 있거나 및/또는 액체 매체로부터 증착될 수 있다는 것을 의미한다.

[0016] 리간드가 발광 물질의 광활성 성질에 직접적으로 기여하는 것으로 밝혀질 경우, 리간드는 "광활성"으로서 지칭될 수 있다. 보조적 리간드가 광활성 리간드의 성질을 변경시킬 수 있을지라도, 리간드가 발광 물질의 광활성 성질에 기여하지 않는 것으로 밝혀질 경우, 리간드는 "보조적"인 것으로 지칭될 수 있다.

[0017] 본원에서 사용한 바와 같이 그리고 일반적으로 당업자가 이해하고 있는 바와 같이, 제1의 "최고 점유 분자 궤도"(HOMO) 또는 "최저 점유 분자 궤도"(LUMO) 에너지 레벨이 진공 에너지 레벨에 근접할 경우, 제1의 에너지 레벨은 제2의 HOMO 또는 LUMO보다 "더 크거나" 또는 "더 높다". 이온화 전위(IP)가 진공 레벨에 대하여 음의 에너지로서 측정되므로, 더 높은 HOMO 에너지 레벨은 더 작은 절대값을 갖는 IP에 해당한다(IP는 음의 값이 더 작다). 유사하게, 더 높은 LUMO 에너지 레벨은 절대값이 더 작은 전자 친화도(EA)에 해당한다(EA의 음의 값이 더 작다). 상부에서의 진공 레벨을 갖는 통상의 에너지 레벨 다이아그램에서, 물질의 LUMO 에너지 레벨은 동일한 물질의 HOMO 에너지 레벨보다 더 높다. "더 높은" HOMO 또는 LUMO 에너지 레벨은 "더 낮은" HOMO 또는 LUMO 에너지 레벨보다 상기 다이아그램의 상부에 더 근접한다는 것을 나타낸다.

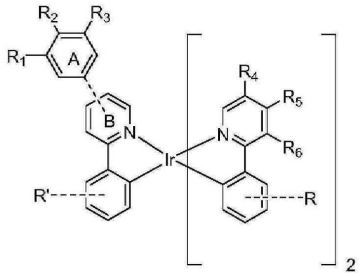
[0018] 본원에서 사용한 바와 같이 그리고 일반적으로 당업자가 이해하는 바와 같이, 제1의 일 함수의 절대값이 더 클 경우, 제1의 일 함수는 제2의 일 함수보다 "더 크거나" 또는 "더 높다". 일 함수는 일반적으로 진공 레벨에 대하여 음의 수로서 측정되므로, 이는 "더 높은" 일 함수의 음의 값이 더 크다는 것을 의미한다. 상부에서 진공 레벨을 갖는 통상의 에너지 레벨 다이아그램에서, "더 높은" 일 함수는 진공 레벨로부터 아래 방향으로 더 먼 것으로서 도시된다. 그래서, HOMO 및 LUMO 에너지 레벨의 정의는 일 함수와는 상이한 조약을 따른다.

[0019] OLED에 대한 세부사항 및 전술한 정의는 미국 특허 제7,279,704호에서 찾아볼 수 있으며, 이 특허 문헌의 개시 내용은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다.

발명의 내용

[0020] 헤테로렙틱 이리듐 착물을 포함하는 화합물이 제공된다. 하나의 구체예에서, 화합물은 하기 화학식 I의 화합물이다:

[0021] <화학식 I>

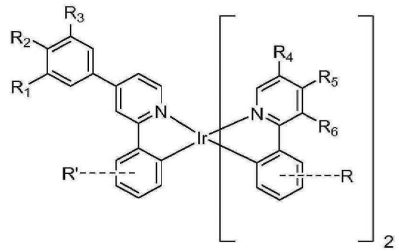


[0022]

[0023] 상기 화학식에서, R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6은 수소, 중수소, 시클로알킬, 중수소화 시클로알킬, 알킬 및 중수소화 알킬로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6 중 하나 이상은 시클로알킬, 중수소화 시클로알킬, 알킬 또는 중수소화 알킬이며, 임의의 2개의 인접하는 R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6은 임의로 함께 결합되어 고리를 형성한다. 고리 A는 고리 B의 4- 또는 5-위치에 결합된다. R 및 R'는 일치환, 이치환, 삼치환 또는 사치환을 나타내며, 수소, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술파닐, 술피닐, 술포닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

[0024] 하나의 구체예에서, 화합물은 하기 화학식 II의 화합물이다:

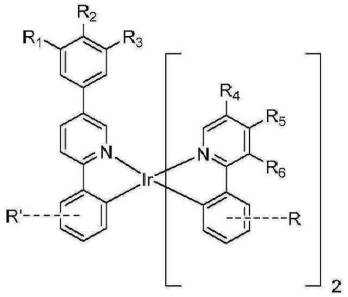
[0025] <화학식 II>



[0026]

[0027] 또다른 구체예에서, 화합물은 하기 화학식 III의 화합물이다:

[0028] <화학식 III>



[0029]

[0030] 하나의 구체예에서, R_1은 알킬이다. 하나의 구체예에서, R_2는 알킬이다. 하나의 구체예에서, R_3은 알킬이다. 하나의 구체예에서, R_4는 알킬이다. 하나의 구체예에서, R_5는 알킬이다. 하나의 구체예에서, R_6은 알킬이다. 하나의 구체예에서, R_1, R_2 및 R_3 중 하나 이상은 알킬이다. 하나의 구체예에서, R_4, R_5 및 R_6 중 하나 이상은 알킬이다. 또다른 구체예에서, R_1, R_2 및 R_3 중 하나 이상은 알킬이고, R_4, R_5 및 R_6 중 하나 이상은 알킬이다.

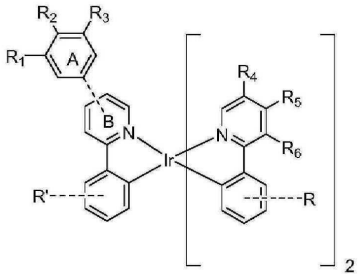
[0031] 하나의 구체예에서, 알킬은 2개 이상의 탄소, 3개 이상의 탄소 또는 6개 이하의 탄소를 함유한다. 또다른 구체예에서, 알킬은 10개 초과의 탄소를 함유한다.

[0032] 하나의 구체예에서, 광이 약 530 ㎚ 내지 약 580 ㎚의 피크 파장을 가질 때 화합물이 약 70 ㎚ 내지 약 110 ㎚의 반치전폭(full width at half maximum)을 갖는 황색광을 발광한다.

[0033] 구체적인 비-제한적인 화합물이 제공된다. 하나의 구체예에서, 화합물은 화합물 1-화합물 89로부터 선택된다.

[0034] 하나의 구체예에서, 제1의 디바이스를 제공한다. 제1의 디바이스는 제1의 유기 발광 디바이스를 포함하며; 애노드, 캐소드 및, 애노드와 캐소드의 사이에 배치된 유기층을 더 포함하며, 유기층은 하기 화학식 I을 갖는 화합물을 포함한다:

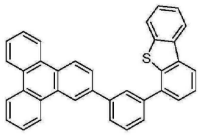
[0035] <화학식 I>



[0036]

[0037] 상기 화학식 I의 화합물에서, R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6은 수소, 중수소, 시클로알킬, 중수소화 시클로알킬, 알킬 및 중수소화 알킬로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6 중 하나 이상은 시클로알킬, 중수소화 시클로알킬, 알킬 또는 중수소화 알킬이고, 임의의 2개의 인접하는 R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6은 임의로 함께 결합되어 고리를 형성한다. 고리 A는 고리 B의 4- 또는 5-위치에 결합된다. R 및 R'는 일치환, 이치환, 삼치환 또는 사치환을 나타내며, 수소, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술파닐, 술피닐, 술포닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

[0038] 하나의 구체예에서, 유기층은 발광층이며 화합물은 발광 도펀트이다. 또다른 구체예에서, 유기층은 발광층이며, 화합물은 비-발광 도펀트이다.

[0039] 또다른 구체예에서, 유기층은 호스트를 더 포함한다. 하나의 구체예에서, 호스트는 트리페닐렌 함유 벤조-융합된 티오펜 또는 벤조-융합된 푸란을 포함하며, 여기서 호스트에서의 임의의 치환기는 C_nH_{2n+1}, OC_nH_{2n+1}, OAr_1, $N(C_nH_{2n+1})_2$, $N(Ar_1)(Ar_2)$, $CH=CH-C_nH_{2n+1}$, $C\equiv CHC_nH_{2n+1}$, Ar_1, Ar_1-Ar_2, $C_nH_{2n}-Ar_1$로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 비융합 치환기이거나 또는 비치환이다. Ar_1 및 Ar_2는 벤젠, 비페닐, 나프탈렌, 트리페닐렌, 카르바졸 및 이의 헤테로방향족 유사체로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되며, n은 1 내지 10이다. 하나의 구체예에서, 호스트는 화학식 
화합물 H
을 갖는다.

[0040] 하나의 구체예에서, 호스트는 금속 착물이다.

[0041] 하나의 구체예에서, 제1의 디바이스는 소비재이다. 또다른 구체예에서, 제1의 디바이스는 유기 발광 디바이스이다. 또다른 구체예에서, 제1의 디바이스는 조명 패널을 포함한다.

[0042] 하나의 구체예에서, 제1의 디바이스는 400 내지 500 ㎚의 피크 파장을 갖는 제2의 발광 도펀트를 더 포함한다. 하나의 구체예에서, 제2의 발광 도펀트는 형광 이미터이다. 또다른 구체예에서, 제2의 발광 도펀트는 인광 이미터이다.

[0043] 하나의 구체예에서, 제1의 디바이스는 화학식 I의 화합물을 포함하는 제1의 유기 발광 디바이스 및, 제1의 유기 발광 디바이스와는 별개이며 400 내지 500 ㎚의 피크 파장을 갖는 발광 도펀트를 포함하는 제2의 발광 디바이스를 더 포함한다. 또다른 구체예에서, 제1의 디바이스는 화학식 I의 화합물을 포함하는 제1의 발광층 및, 400 내

지 500 ㎚의 피크 파장을 갖는 발광 도펀트를 포함하는 제2의 발광층을 갖는 유기 발광 디바이스를 포함한다.

도면의 간단한 설명

[0044] 도 1은 유기 발광 디바이스를 도시한다.

도 2는 별도의 전자 수송층을 갖지 않는 역전된 유기 발광 디바이스를 도시한다.

도 3은 화학식 I의 화합물을 도시한다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0045] 일반적으로, OLED는 애노드 및 캐소드 사이에 배치되어 이에 전기 접속되는 1종 이상의 유기층을 포함한다. 전류가 인가되면, 애노드는 정공을 유기층(들)에 주입하고, 캐소드는 전자를 주입한다. 주입된 정공 및 전자는 각각 반대로 하전된 전극을 향하여 이동한다. 전자 및 정공이 동일한 분자상에 편재화될 경우, 여기된 에너지 상태를 갖는 편재화된 전자-정공쌍인 "엑시톤"이 형성된다. 엑시톤이 광발광 메카니즘에 의하여 이완될 경우 광이 방출된다. 일부의 경우에서, 엑시톤은 엑시머 또는 엑시플렉스상에 편재화될 수 있다. 비-방사 메카니즘, 예컨대 열 이완도 또한 발생할 수 있으나, 일반적으로 바람직하지 않은 것으로 간주된다.

[0046] 초기 OLED는 예를 들면 미국 특허 제 4,769,292호에 개시된 바와 같은 단일항 상태로부터 광("형광")을 방출하는 발광 분자를 사용하였으며, 상기 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. 형광 방출은 일반적으로 10 나노초 미만의 시간 기간으로 발생한다.

[0047] 보다 최근에는, 삼중항 상태로부터의 광("인광")을 방출하는 발광 물질을 갖는 OLED가 예시되어 있다. 문헌 [Baldo et al., "Highly Efficient Phosphorescent Emission from Organic Electroluminescent Devices," *Nature*, vol. 395, 151-154, 1998 ("Baldo-I")] 및 [Baldo et al., "Very high-efficiency green organic light-emitting devices based on electrophosphorescence," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 75, No. 3, 4-6 (1999) ("Baldo-II")]을 참조하며, 이들 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. 인광은 참고로 포함되는 미국 특허 제7,279,704호의 컬럼 5-6에 보다 구체적으로 기재되어 있다.

[0048] 도 1은 유기 발광 디바이스(100)를 도시한다. 도면은 반드시 축척에 의하여 도시하지는 않았다. 디바이스(100)는 기판(110), 애노드(115), 정공 주입층(120), 정공 수송층(125), 전자 차단층(130), 발광층(135), 정공 차단층(140), 전자 수송층(145), 전자 주입층(150), 보호층(155) 및 캐소드(160)를 포함할 수 있다. 캐소드(160)는 제1의 전도층(162) 및 제2의 전도층(164)을 갖는 화합물 캐소드이다. 디바이스(100)는 기재된 순서로 층을 증착시켜 제조될 수 있다. 이들 다양한 층뿐 아니라, 예시의 물질의 성질 및 기능은 참고로 포함되는 미국 특허 제7,279,704호의 컬럼 6-10에 보다 구체적으로 기재되어 있다.

[0049] 이들 각각의 층에 대한 더 많은 예도 이용 가능하다. 예를 들면 가요성 및 투명한 기판-애노드 조합은 미국 특허 제 5,844,363호에 개시되어 있으며, 이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. p-도핑된 정공 수송층의 예는 미국 특허 출원 공개 공보 제2003/0230980호에 개시된 바와 같이, 50:1의 몰비로 F_4-TCNQ로 도핑된 m-MTDATA이며, 이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. 발광 및 호스트 물질의 예는 미국 특허 제6,303,238호(Thompson et al.)에 개시되어 있으며, 이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. n-도핑된 전자 수송층의 예는 미국 특허 출원 공개 공보 제2003/0230980호에 개시된 바와 같이, 1:1의 몰비로 Li로 도핑된 BPhen이고, 이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. 그 전문이 본원에 참고로 포함되는 미국 특허 제5,703,436호 및 제5,707,745호에는 적층된 투명, 전기전도성 스퍼터-증착된 ITO 층을 갖는 Mg:Ag와 같은 금속의 박층을 갖는 화합물 캐소드를 비롯한 캐소드의 예가 개시되어 있다. 차단층의 이론 및 용도는 미국 특허 제 6,097,147호 및 미국 특허 출원 공개 공보 제2003/0230980호에 보다 구체적으로 기재되어 있으며, 이들 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. 주입층의 예는 미국 특허 출원 공개 공보 제2004/0174116호에 제공되어 있으며, 이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. 보호층의 설명은 미국 특허 출원 공개 공보 제2004/0174116호에서 찾아볼 수 있으며, 이들 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다.

[0050] 도 2는 역전된 OLED(200)를 도시한다. 디바이스는 기판(210), 캐소드(215), 발광층(220), 정공 수송층(225) 및 애노드(230)를 포함한다. 디바이스(200)는 기재된 순서로 층을 적층시켜 제조될 수 있다. 가장 흔한 OLED 구조는 애노드의 위에 캐소드가 배치되어 있고 디바이스(200)가 애노드(230)의 아래에 캐소드(215)가 배치되어 있으므로, 디바이스(200)는 "역전된" OLED로 지칭될 수 있다. 디바이스(100)에 관하여 기재된 것과 유사한 물질이 디바이스(200)의 해당 층에 사용될 수 있다. 도 2는 디바이스(100)의 구조로부터 일부 층이 얼마나 생략될 수

있는지의 일례를 제공한다.

[0051] 도 1 및 도 2에 도시된 단순 적층된 구조는 비제한적인 예로서 제공하며, 본 발명의 실시양태는 다양한 기타의 구조와 관련하여 사용될 수 있는 것으로 이해하여야 한다. 기재된 특정한 물질 및 구조는 사실상 예시를 위한 것이며, 기타의 물질 및 구조도 사용될 수 있다. 작용성 OLED는 기재된 다양한 층을 상이한 방식으로 조합하여 달성될 수 있거나 또는 층은 디자인, 성능 및 비용 요인에 기초하여 전적으로 생략할 수 있다. 구체적으로 기재되지 않은 기타의 층도 또한 포함될 수 있다. 이들 구체적으로 기재된 층을 제외한 물질을 사용할 수 있다. 본원에 제공된 다수의 예가 단일 물질을 포함하는 것으로서 다양한 층을 기재하기는 하나, 물질, 예컨대 호스트 및 도펀트의 혼합물 또는 보다 일반적으로 혼합물을 사용할 수 있다. 또한, 층은 다수의 하부층을 가질 수 있다. 본원에서 다양한 층에 제시된 명칭은 엄격하게 제한하고자 하는 것은 아니다. 예를 들면, 디바이스(200)에서 정공 수송층(225)은 정공을 수송하며, 정공을 발광층(220)에 주입하며, 정공 수송층 또는 정공 주입층으로서 기재될 수 있다. 하나의 실시양태에서, OLED는 캐소드와 애노드 사이에 배치된 "유기층"을 갖는 것으로 기재될 수 있다. 이러한 유기층은 단일층을 포함할 수 있거나 또는 예를 들면 도 1 및 도 2와 관련하여 기재된 바와 같은 상이한 유기 물질의 복수의 층을 더 포함할 수 있다.

[0052] 구체적으로 기재하지 않은 구조 및 물질, 예컨대 미국 특허 제 5,247,190호(Friend et al.)에 기재된 바와 같은 중합체 물질(PLED)을 포함하는 OLED를 사용할 수 있으며, 이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. 추가의 예로서, 단일 유기층을 갖는 OLED를 사용할 수 있다. OLED는 예를 들면 미국 특허 제 5,707,745호(Forrest et al.)에 기재된 바와 같이 적층될 수 있으며, 이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. OLED 구조는 도 1 및 도 2에 도시된 단순 적층된 구조로부터 벗어날 수 있다. 예를 들면, 기판은 미국 특허 제 6,091,195호(Forrest et al.)에 기재된 바와 같은 메사형(mesa) 구조 및/또는 미국 특허 제 5,834,893호(Bulovic et al.)에 기재된 피트형(pit) 구조와 같은 아웃-커플링(out-coupling)을 개선시키기 위한 각진 반사면을 포함할 수 있으며, 이들 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다.

[0053] 반대의 의미로 명시하지 않는 한, 다양한 실시양태의 임의의 층은 임의의 적절한 방법에 의하여 적층될 수 있다. 유기층의 경우, 바람직한 방법으로는 미국 특허 제6,013,982호 및 제6,087,196호(이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함됨)에 기재된 바와 같은 열 증발, 잉크-제트, 미국 특허 제 6,337,102호(Forrest et al.)(이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함됨)에 기재된 바와 같은 유기 증기상 증착(OVPD), 미국 특허 출원 제10/233,470호(이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함됨)에 기재된 바와 같은 유기 증기 제트 프린팅(OVJP)에 의한 증착을 들 수 있다. 기타의 적절한 증착 방법은 스핀 코팅 및 기타의 용액계 공정을 포함한다. 용액계 공정은 질소 또는 불활성 분위기 중에서 실시되는 것이 바람직하다. 기타의 층의 경우, 바람직한 방법은 열 증발을 포함한다. 바람직한 패턴 형성 방법은 마스크를 통한 증착, 미국 특허 제6,294,398호 및 제6,468,819호(이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함됨)에 기재된 바와 같은 냉간 용접 및, 잉크-제트 및 OVJD와 같은 일부 증착 방법과 관련된 패턴 형성을 포함한다. 증착시키고자 하는 물질은 특정한 증착 방법과 상용성을 갖도록 변형될 수 있다. 예를 들면, 분지형 또는 비분지형, 바람직하게는 3개 이상의 탄소를 포함하는 알킬 및 아릴 기와 같은 치환기는 이의 용액 가공의 처리 능력을 향상시키기 위하여 소분자에 사용될 수 있다. 20개 이상의 탄소를 갖는 치환기를 사용할 수 있으며, 3 내지 20개의 탄소가 바람직한 범위이다. 비대칭 구조를 갖는 물질은 대칭 구조를 갖는 것보다 더 우수한 용액 가공성을 가질 수 있는데, 비대칭 물질은 재결정화되는 경향이 낮을 수 있기 때문이다. 덴드리머 치환기는 용액 가공을 처리하는 소분자의 능력을 향상시키기 위하여 사용될 수 있다.

[0054] 본 발명의 실시양태에 의하여 제조되는 디바이스는 평판 패널 디스플레이, 컴퓨터 모니터, 텔레비젼, 광고판, 실내 또는 옥외 조명 및/또는 시그날링을 위한 라이트, 헤드업 디스플레이, 완전 투명 디스플레이, 플렉시블 디스플레이, 레이저 프린터, 전화기, 휴대폰, 개인용 정보 단말기(PDA), 랩탑 컴퓨터, 디지탈 카메라, 캠코더, 뷰파인더, 마이크로디스플레이, 자동차, 거대 월, 극장 또는 스타디움 스크린 또는 간판을 비롯한 다양한 소비재에 투입될 수 있다. 패시브 매트릭스 및 액티브 매트릭스를 비롯한 다양한 조절 메카니즘을 사용하여 본 발명에 의한 디바이스를 조절할 수 있다. 다수의 디바이스는 사람에게 안락감을 주는 온도 범위, 예컨대 18℃ 내지 30℃, 더욱 바람직하게는 실온(20℃ 내지 25℃)에서 사용하고자 한다.

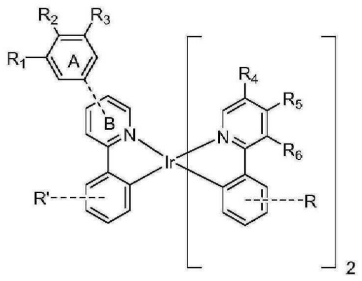
[0055] 본원에 기재된 물질 및 구조는 OLED를 제외한 디바이스에서의 적용예를 가질 수 있다. 예를 들면, 기타의 광전자 디바이스, 예컨대 유기 태양 전지 및 유기 광검출기는 물질 및 구조를 사용할 수 있다. 보다 일반적으로, 유기 디바이스, 예컨대 유기 트랜지스터는 물질 및 구조를 사용할 수 있다.

[0056] 용어 할로, 할로겐, 알킬, 시클로알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로시클릭 기, 아릴, 방향족 기 및 헤테

로아릴은 당업계에 공지되어 있으며, 미국 특허 제7,279,704호의 컬럼 31-32에서 정의되어 있으며, 이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다.

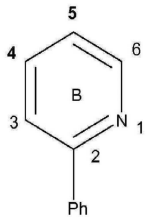
[0057] 헤테로렙틱 이리듐 착물을 포함하는 화합물이 제공된다. 하나의 실시양태에서, 화합물은 하기 화학식 I의 화합물이다:

[0058] <화학식 I>

[0059] 

[0060] 상기 화학식 I의 화합물에서, R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6은 수소, 중수소, 시클로알킬, 중수소화 시클로알킬, 알킬 및 중수소화 알킬로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6 중 하나 이상은 시클로알킬, 중수소화 시클로알킬, 알킬 또는 중수소화 알킬이고, 임의의 2개의 인접하는 R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6은 임의로 함께 결합되어 고리를 형성한다. 그래서, 임의의 R_1 및 R_2, R_2 및 R_3, R_3 및 R_4, R_4 및 R_5 또는 R_5 및 R_6은 결합되어 고리를 형성할 수 있다. 고리 A는 고리 B의 4- 또는 5-위치에 결합된다. R 및 R'는 일치환, 이치환, 삼치환 또는 사치환을 나타내며, 수소, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술파닐, 술피닐, 술포닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

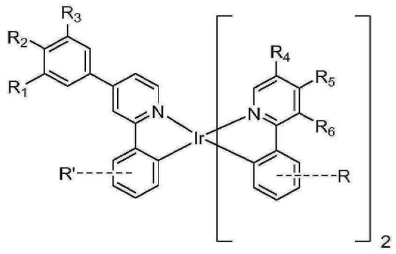
[0061] 고리 B는 하기에 의하여 넘버링한다:

[0062] 

[0063] 그래서, 4-위치는 고리 B에서 피리딘 질소에 대하여 파라이며, 5-위치는 고리 B에 결합된 페닐 고리에 대하여 파라이다.

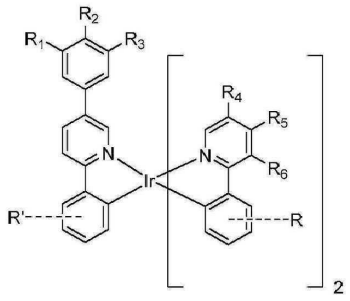
[0064] 하나의 실시양태에서, 화합물은 하기 화학식 II의 화합물이다:

[0065] <화학식 II>

[0066] 

[0067] 또다른 실시양태에서, 화합물은 하기 화학식 III의 화합물이다:

[0068] <화학식 III>



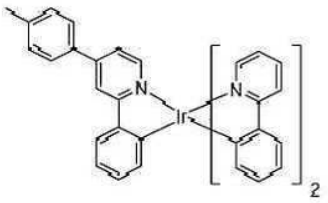
[0069]

[0070] 하나의 실시양태에서, R_1은 알킬이다. 하나의 실시양태에서, R_2는 알킬이다. 하나의 실시양태에서, R_3은 알킬이다. 하나의 실시양태에서, R_4는 알킬이다. 하나의 실시양태에서, R_5는 알킬이다. 하나의 실시양태에서, R_6은 알킬이다. 하나의 실시양태에서, R_1, R_2 및 R_3 중 하나 이상은 알킬이다. 하나의 실시양태에서, R_4, R_5 및 R_6 중 하나 이상은 알킬이다. 또다른 실시양태에서, R_1, R_2 및 R_3 중 하나 이상은 알킬이고, R_4, R_5 및 R_6 중 하나 이상은 알킬이다. 임의의 상기 실시양태에서, 알킬은 부분 또는 완전 중수소화 알킬로 치환될 수 있다.

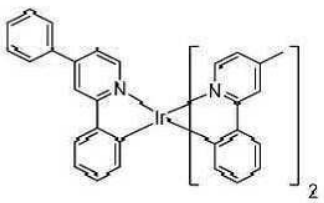
[0071] 하나의 실시양태에서, 알킬은 2개 이상의 탄소, 3개 이상의 탄소 또는 6개 이하의 탄소를 함유한다. 2개 이상의 탄소, 3개 이상의 탄소 또는 6개 이하의 탄소를 갖는 것은 화학식 I의 화합물이 화합물의 승화 온도를 증가시키지 않으면서 스펙트럼의 황색 부분에서 효과적으로 발광하도록 한다. 증가된 승화 온도는 화합물을 정제하기가 곤란하게 될 수 있다. 또다른 실시양태에서, 알킬은 10 개 초과의 탄소를 함유한다. 알킬이 10개 초과의 탄소를 갖는 것은 화학식 I의 화합물의 용액 가공에 유용하여 OLED 디바이스를 저렴하게 제조하게 된다.

[0072] 하나의 실시양태에서, 화합물은 광의 피크 파장이 약 530 nm 내지 약 580 nm일 때 반치전폭이 약 70 nm 내지 약 110 nm인 황색광을 방출한다. 화학식 I의 화합물이 수반하는 범위의 피크 파장을 갖는 상기 범위의 반치전폭(FWHM)을 가질 경우, 이들은 넓은 라인 형상을 갖는 효과적인 황색 이미터이며, 이는 백색광 적용예에 바람직하다.

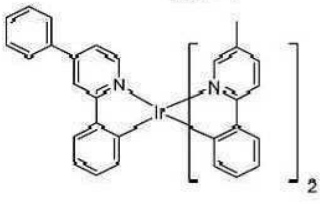
[0073] 구체적인 비제한적인 화합물이 제공된다. 하나의 실시양태에서, 화합물은 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:



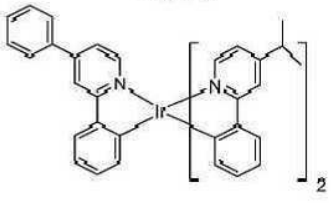
화합물 1



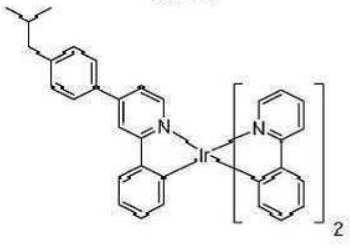
화합물 2



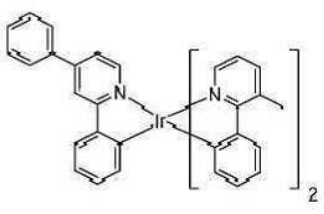
화합물 3



화합물 4

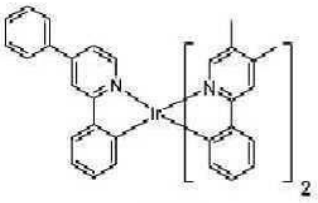


화합물 5

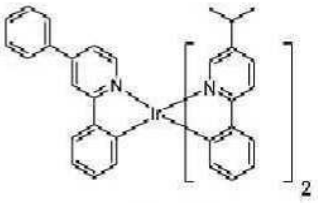


화합물 6

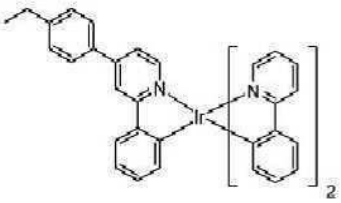
[0074]



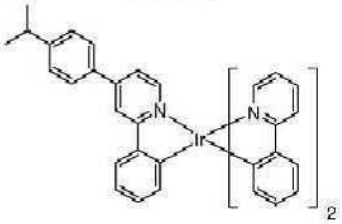
화합물 7



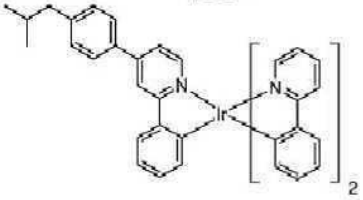
화합물 8



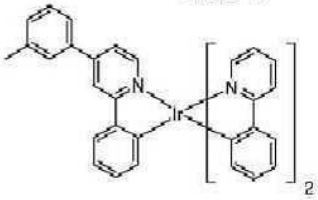
화합물 9



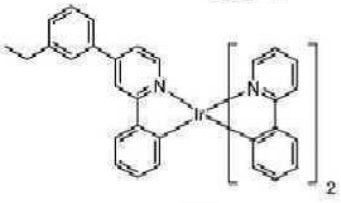
화합물 10



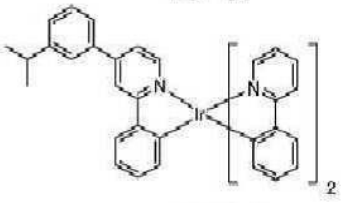
화합물 11



화합물 12

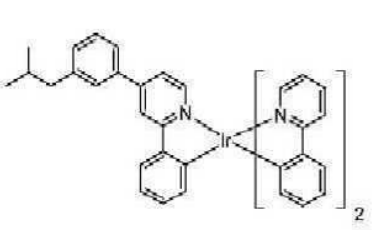


화합물 13

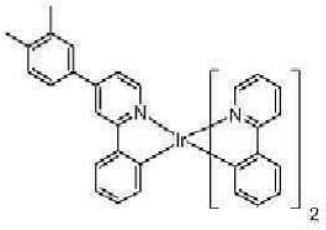


화합물 14

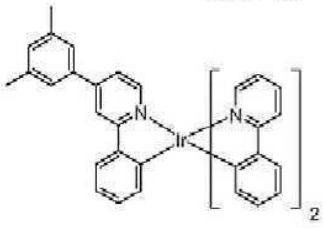
[0075]



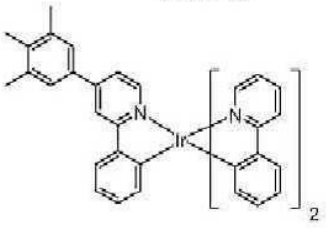
화합물 15



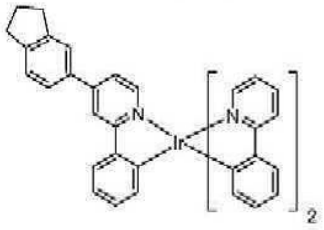
화합물 16



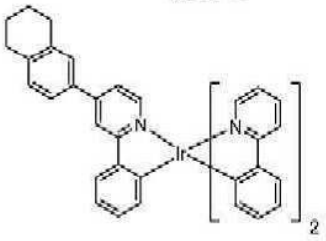
화합물 17



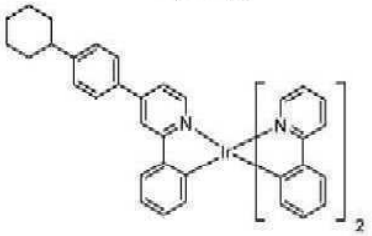
화합물 18



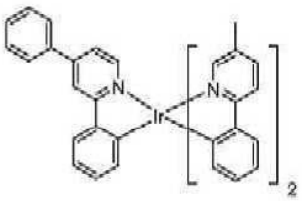
화합물 19



화합물 20

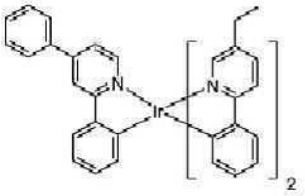


화합물 21

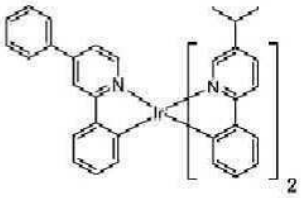


화합물 22

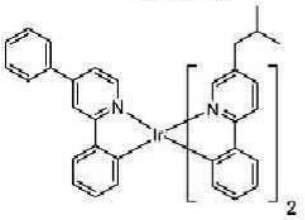
[0076]



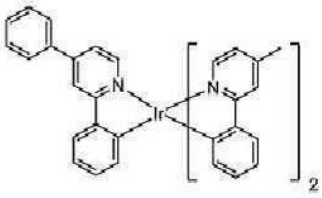
화합물 23



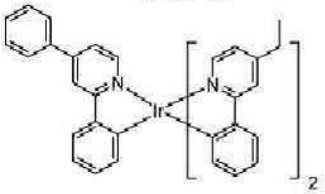
화합물 24



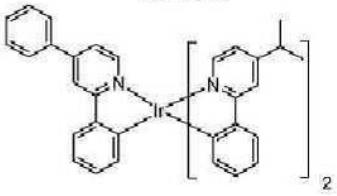
화합물 25



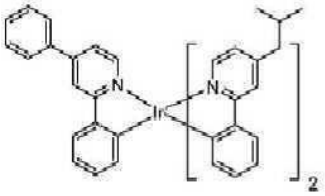
화합물 26



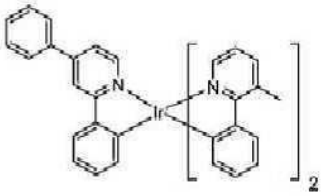
화합물 27



화합물 28

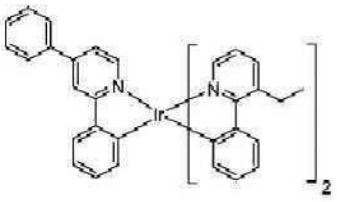


화합물 29

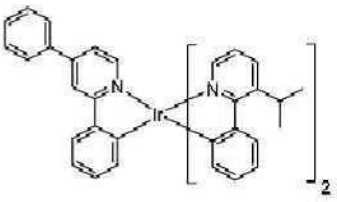


화합물 30

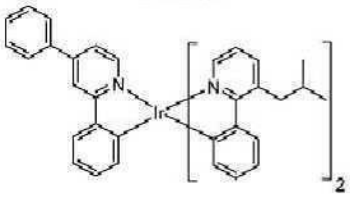
[0077]



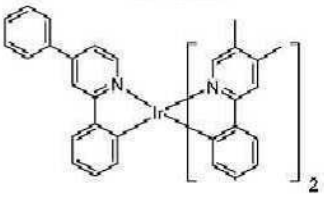
화합물 31



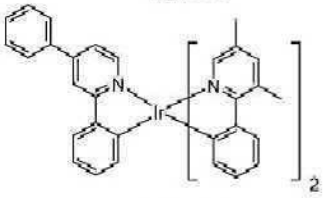
화합물 32



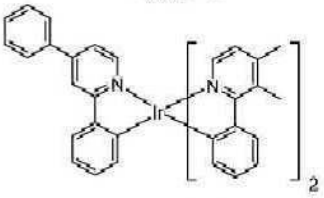
화합물 33



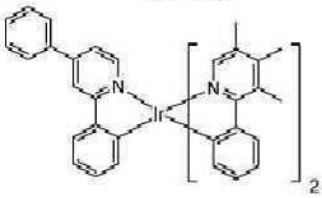
화합물 34



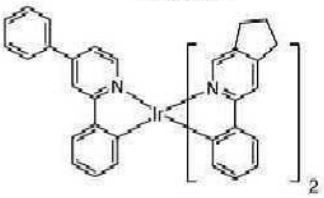
화합물 35



화합물 36

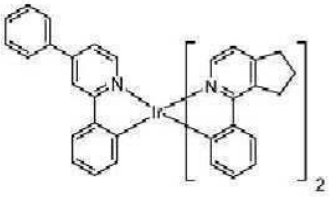


화합물 37

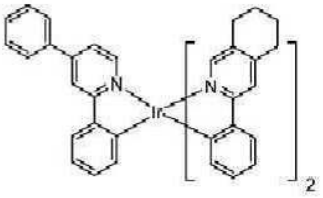


화합물 38

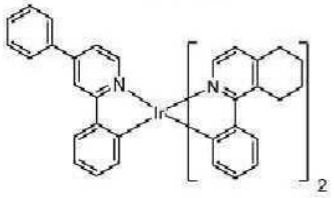
[0078]



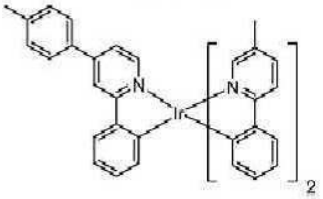
화합물 39



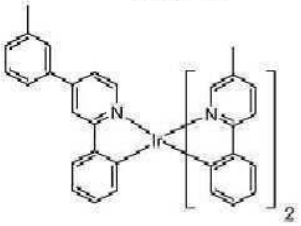
화합물 40



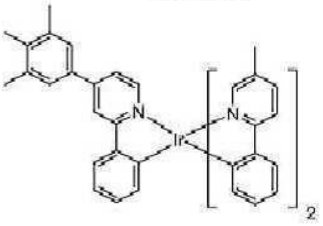
화합물 41



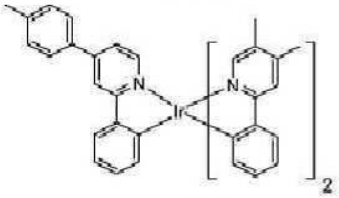
화합물 42



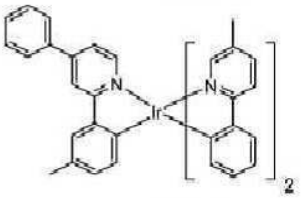
화합물 43



화합물 44

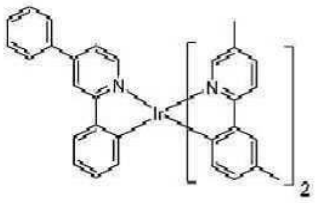


화합물 45

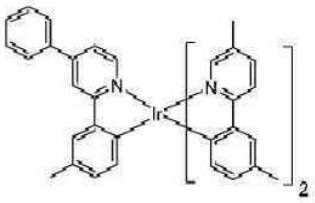


화합물 46

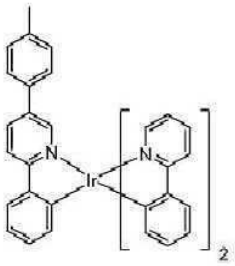
[0079]



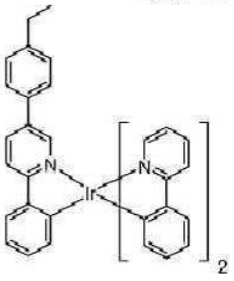
화합물 47



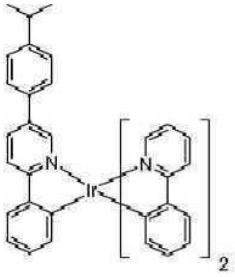
화합물 48



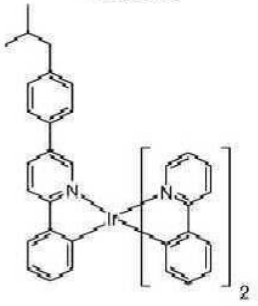
화합물 49



화합물 50

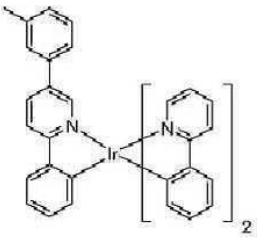


화합물 51

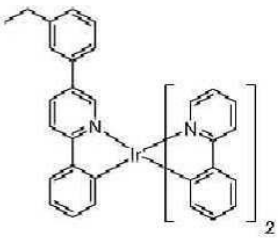


화합물 52

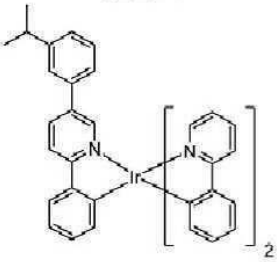
[0080]



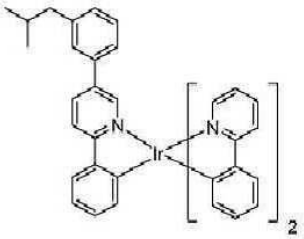
화합물 53



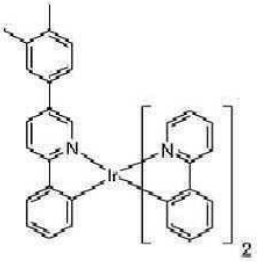
화합물 54



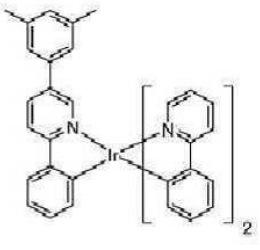
화합물 55



화합물 56

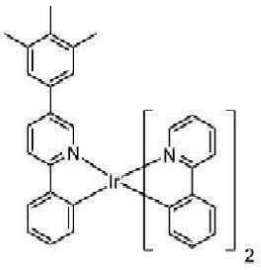


화합물 57

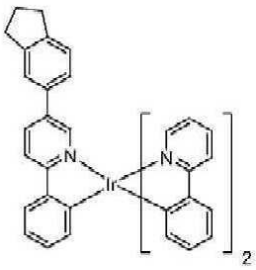


화합물 58

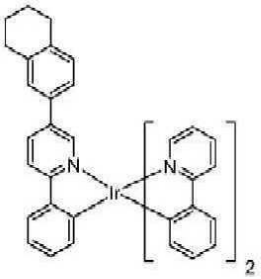
[0081]



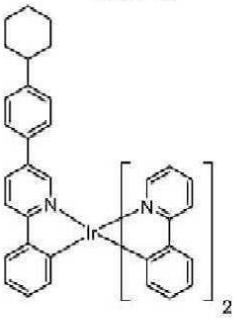
화합물 59



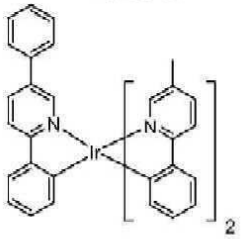
화합물 60



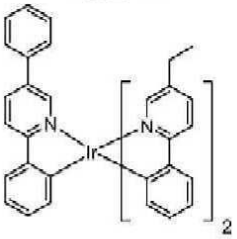
화합물 61



화합물 62

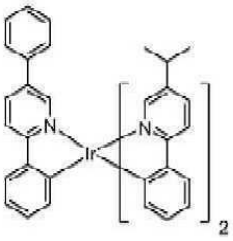


화합물 63

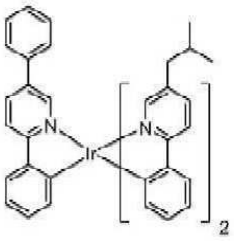


화합물 64

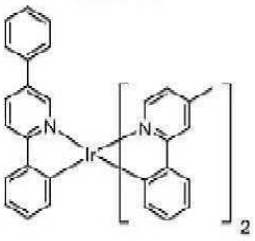
[0082]



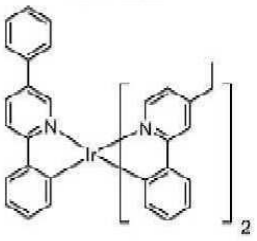
화합물 65



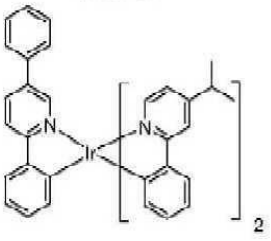
화합물 66



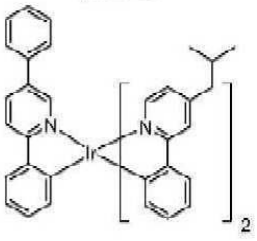
화합물 67



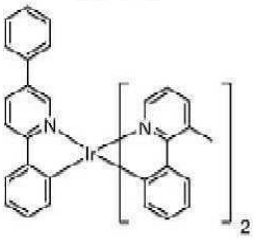
화합물 68



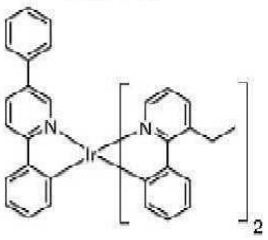
화합물 69



화합물 70

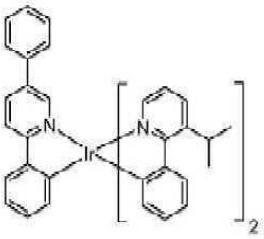


화합물 71

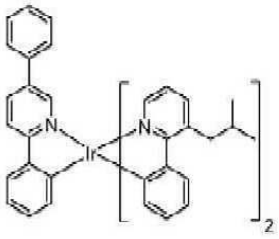


화합물 72

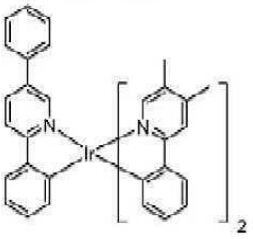
[0083]



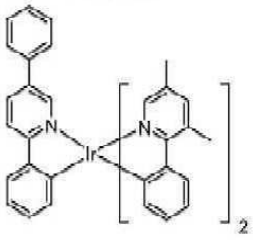
화합물 73



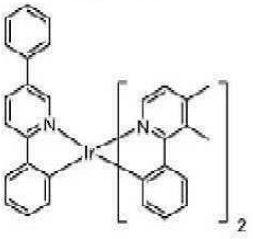
화합물 74



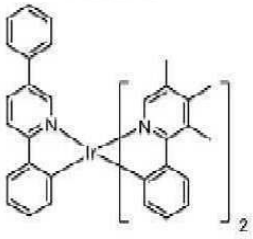
화합물 75



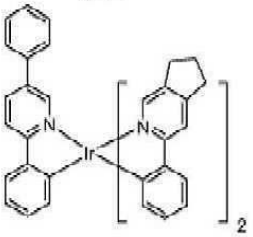
화합물 76



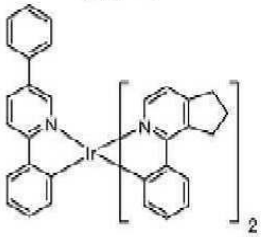
화합물 77



화합물 78

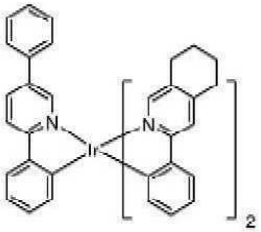


화합물 79

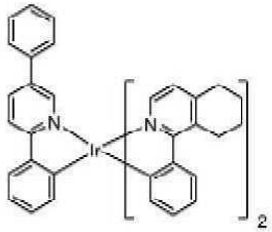


화합물 80

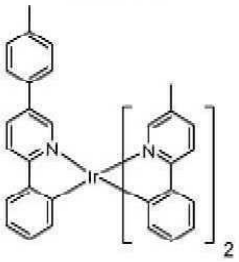
[0084]



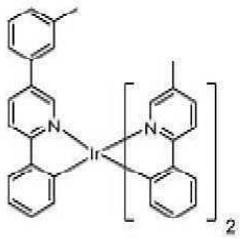
화합물 81



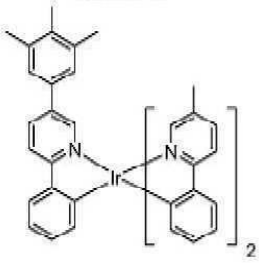
화합물 82



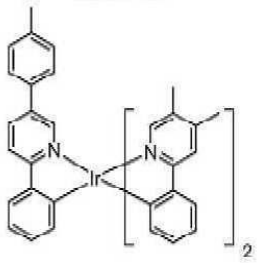
화합물 83



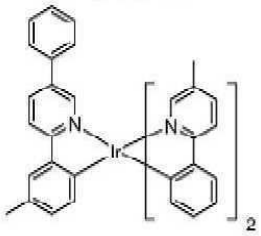
화합물 84



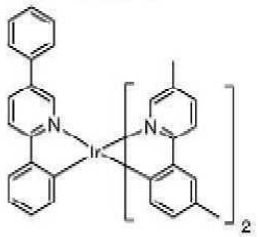
화합물 85



화합물 86

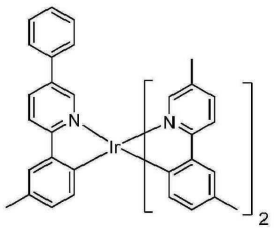


화합물 87



화합물 88

[0085]

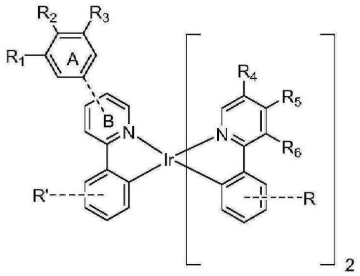


화합물 89

[0086]

[0087] 하나의 실시양태에서, 제1의 디바이스가 제공된다. 제1의 디바이스는 제1의 유기 발광 디바이스를 포함하며; 애노드, 캐소드 및, 애노드와 캐소드의 사이에 배치된 유기층을 더 포함하며, 유기층은 하기 화학식 I을 갖는 화합물을 포함한다:

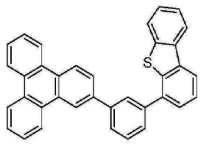
[0088] <화학식 I>



[0089]

[0090] 상기 화학식 I의 화합물에서, R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6은 수소, 중수소, 시클로알킬, 중수소화 시클로알킬, 알킬 및 중수소화 알킬로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6 중 하나 이상은 시클로알킬, 중수소화 시클로알킬, 알킬 또는 중수소화 알킬이고, 임의의 2개의 인접하는 R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 및 R_6은 임의로 함께 결합되어 고리를 형성한다. 고리 A는 고리 B의 4- 또는 5-위치에 결합된다. R 및 R'는 일치환, 이치환, 삼치환 또는 사치환을 나타내며, 수소, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술파닐, 술피닐, 술포닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다.

[0091] 하나의 실시양태에서, 유기층은 발광층이며 화합물은 발광 도펀트이다. 또다른 실시양태에서, 유기층은 발광층이며 화합물은 비-발광 도펀트이다.

[0092] 또다른 실시양태에서, 유기층은 호스트를 더 포함한다. 하나의 실시양태에서, 호스트는 트리페닐렌 함유 벤조-융합된 티오펜 또는 벤조-융합된 푸란을 포함하며, 여기서 호스트에서의 임의의 치환기는 C_nH_{2n+1}, OC_nH_{2n+1}, OAr_1, $N(C_nH_{2n+1})_2$, $N(Ar_1)(Ar_2)$, $CH=CH-C_nH_{2n+1}$, $C\equiv CHC_nH_{2n+1}$, Ar_1, Ar_1-Ar_2, $C_nH_{2n}-Ar_1$로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 비융합 치환기이거나 또는 비치환이다. Ar_1 및 Ar_2는 벤젠, 비페닐, 나프탈렌, 트리페닐렌, 카르바졸 및 이의 헤테로방향족 유사체로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되며, n은 1 내지 10이다. 하나의 실시양태에서, 호스트는 화학식  화합물 H 을 갖는다.

[0093] 하나의 실시양태에서, 호스트는 금속 착물이다. 본원에 기재된 임의의 금속 착물은 적절한 호스트가 된다.

[0094] 화학식 I의 화합물을 혼입한 OLED는 넓은 황색 발광 프로파일뿐 아니라, 높은 양자 효율 및 긴 상업적 수명을 갖는다. 넓은 황색 발광이 가능한 디바이스는 백색 조명 공급원에서 특히 바람직하다.

[0095] 백색 조명 공급원의 품질은 파라미터의 단순한 세트에 의하여 충분히 설명될 수 있다. 광원의 색상은 이의 CIE 색도 좌표 x 및 y(1931 2-도 표준 관찰자 CIE 색도)에 의하여 제공된다. CIE 좌표는 통상적으로 2차원 플롯에 나타낸다. 단색 색상은 하부 좌측에서 청색으로부터 시작하여 하부 우측에서 적색으로 시계 방향으로 스펙트럼의 색상을 통한 편자형 곡선의 둘레에 속한다. 해당 에너지 및 스펙트럼 형상의 광원의 CIE 좌표는 곡선의 부위 내에 포함될 것이다. 모든 파장에서의 광의 압축은 도표의 중심(CIE x,y-좌표, 0.33, 0.33)에서 발견되는 백색 또는 중성 지점을 산출한다. 2종 이상의 광원으로부터의 광의 혼합은 독립적인 광원의 CIE 좌표의 강도 가중 평균에 의하여 나타낸 색상을 갖는 광을 산출한다. 그래서, 2종 이상의 광원으로부터의 광을 혼합하는 것은 백색 광을 생성하는데 사용될 수 있다.

[0096] 조명을 위한 이들 백색 광원의 사용을 고려시, 광원의 CIE 좌표에 추가하여 CIE 연색 지수(CRI)를 고려할 수 있다. CRI는 광원이 얼마나 잘 물체의 색상을 비추도록 하는지의 표시를 제공한다. 소정 광원의 표준 발광체로의 완벽한 부합은 100의 CRI를 제공한다. CRI를 통하여 70 이상의 값은 특정한 적용예에 허용 가능할 수 있으며, 바람직한 백색 광원은 CRI가 약 80 이상일 수 있다.

[0097] 화학식 I의 화합물은 상당한 적색 및 녹색 성분을 갖는 황색 발광 프로파일을 갖는다. 화학식 I의 화합물을 혼입한 OLED에서의 적절한 필터와 함께 청색 이미터, 즉 400 내지 500 nm의 피크 파장을 갖는 이미터의 첨가는 RGB 스펙트럼의 재현을 허용한다. 일부 실시양태에서, 화학식 I의 화합물을 혼입하는 OLED는 청색 이미터 및 화학식 I의 황색 이미터인 2종의 발광 화합물만을 사용하는 컬러 디스플레이(또는 조명 적용예)에 사용된다. 청색 이미터 및 화학식 I의 넓은 황색 이미터인 2종의 발광 화합물만을 사용하는 컬러 디스플레이는 디스플레이의 적색, 녹색 및 청색 색상 성분을 선택적으로 통과시키는 컬러 필터를 사용할 수 있다. 적색 및 녹색 성분은 모두 화학식 I의 넓은 황색 이미터로부터 유래할 수 있다.

[0098] 하나의 실시양태에서, 제1의 디바이스는 소비재이다. 또다른 실시양태에서, 제1의 디바이스는 유기 발광 디바이스이다. 또다른 구체예에서, 제1의 디바이스는 조명 패널을 포함한다.

[0099] 하나의 실시양태에서, 제1의 디바이스는 400 내지 500 nm의 피크 파장을 갖는 제2의 발광 도펀트를 더 포함한다. 하나의 실시양태에서, 제2의 발광 도펀트는 형광 이미터이다. 또다른 실시양태에서, 제2의 발광 도펀트는 인광 이미터이다.

[0100] 하나의 실시양태에서, 제1의 디바이스는 화학식 I의 화합물을 포함하는 제1의 유기 발광 디바이스 및, 제1의 유기 발광 디바이스와는 별개이며 400 내지 500 nm의 피크 파장을 갖는 발광 도펀트를 포함하는 제2의 발광 디바이스를 더 포함한다. 제1의 및 제2의 발광 디바이스는 목적하는 디스플레이 또는 조명 적용예의 요구에 의존하여 임의의 적절한 공간 배열로 배치될 수 있다.

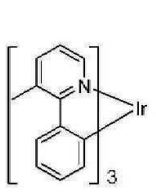
[0101] 또다른 실시양태에서, 제1의 디바이스는 화학식 I의 화합물을 포함하는 제1의 발광층 및, 400 내지 500 nm의 피크 파장을 갖는 발광 도펀트를 포함하는 제2의 발광층을 갖는 유기 발광 디바이스를 포함한다. 제1의 발광층 및 제2의 발광층은 이들 사이에서 하나 이상의 기타 층을 가질 수 있다.

[0102] 디바이스 실시예

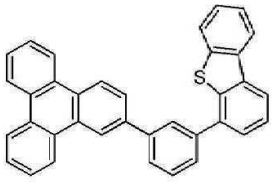
[0103] 모든 실시예 디바이스는 고 진공(<10^{-7} torr) 열 증발(VTE)에 의하여 제조하였다. 애노드 전극은 800 Å의 산화인듐주석(ITO)이다. 캐소드는 10 Å의 LiF에 이어서 1,000 Å의 Al로 이루어진다. 모든 디바이스는 제조 직후 질소 글로브 박스(<1 ppm의 H_2O 및 O_2)내에서 에폭시 수지로 밀봉된 유리 뚜껑으로 캡슐화되고, 수분 게터를 패키지의 내부에 투입하였다.

[0104] 디바이스 실시예의 유기 적층물은 ITO 표면으로부터 정공 주입층(HIL)으로서 100 Å의 화합물 A, 정공 수송층(HTL)으로서 300 Å의 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(α-NPD), 발광층(EML)으로서 화합물 H(호스트로서)로 도핑된 300 Å 7-15 중량%의 화학식 I의 화합물, 차단층(BL)으로서 50 Å 또는 100 Å의 화합물 H, 전자 수송층(ETL)으로서 450 Å 또는 500 Å의 Alq(트리스-8-히드록시퀴놀린 알루미늄)로 순차적으로 이루어졌다. 비교예는 EML에서 8 중량%의 화합물 X를 사용하였다. 이들 디바이스로부터의 디바이스 결과 및 데이타를 하기 표 1 및 표 2에 요약한다. 본원에서 사용한 바와 같이, NPD, Alq, 화합물 A, 화합물 H 및 화합물 X는 하기 구조를 갖는다:

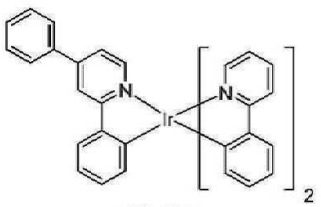
[0105]



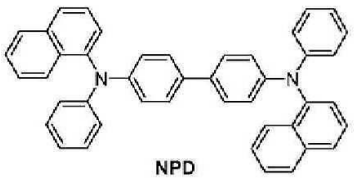
화합물 A



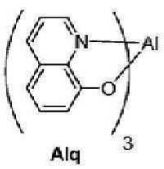
화합물 H



화합물 X



NPD



Alq

[0106] <표 1>

VTE 인광 OLED

실시예	HIL	HTL	EML (300 Å, 도핑율 %)		BL	ETL
비교예 1	화합물 A 100Å	NPD 300Å	화합물 H	화합물 X 8%	화합물 H 50Å	Alq 450Å
실시예 1	화합물 A 100Å	NPD 300Å	화합물 H	화합물 3 12%	화합물 H 50Å	Alq 450Å
실시예 2	화합물 A 100Å	NPD 300Å	화합물 H	화합물 4 12%	화합물 H 50Å	Alq 450Å
실시예 3	화합물 A 100Å	NPD 300Å	화합물 H	화합물 5 10%	화합물 H 50Å	Alq 450Å
실시예 4	화합물 A 100Å	NPD 300Å	화합물 H	화합물 6 7%	화합물 H 50Å	Alq 450Å
실시예 5	화합물 A 100Å	NPD 300Å	화합물 H	화합물 7 10%	화합물 H 50Å	Alq 500Å
실시예 6	화합물 A 100Å	NPD 300Å	화합물 H	화합물 8 7%	화합물 H 50Å	Alq 450Å

[0107]

[0108] <표 2>

VTE 디바이스 데이타

실시예	x	y	λ_{max}	FWHM (nm)	전압 (V)	LE (Cd/A)	EQE (%)	PE (lm/W)	LT80% (h)
비교예 1	0.435	0.550	556	84	5.9	58.3	17.3	31.3	510
실시예 1	0.458	0.532	562	82	5.0	66.8	20.5	42.2	900
실시예 2	0.460	0.530	562	82	5.1	61.6	19.0	38.2	1250
실시예 3	0.428	0.556	552	84	5.6	77.2	22.6	43.0	630
실시예 4	0.461	0.528	566	86	6.2	61.5	19.3	31.0	540
실시예 5	0.485	0.508	570	84	5.0	64.6	21.2	40.4	4300
실시예 6	0.462	0.528	564	82	5.7	52.4	16.2	28.9	830

[0109]

[0110] 디바이스 데이타는 화학식 I의 화합물이 높은 효율 및 상업적으로 유용한 수명과 함께 (백색광 디바이스에 사용하기에 바람직한) 넓은 라인 형상을 갖는 효과적인 황색 이미터이라는 것을 나타낸다. 화학식 I의 화합물을 사용하여 생성된 디바이스(실시예 1-6)는 일반적으로 비교예보다 더 높은 발광 효율(LE), 외부 양자 효율(EQE) 및 전력 효율(PE)을 나타낸다. 특정 이론으로 한정하지는 않지만, 알킬 치환은 알킬 기의 결여로 인하여 디바이스에서의 도펀트의 집합을 감소시키고, 전하 수송 성질을 변경시키며, 비교예에 대하여 더 높은 효율을 초래하는 것으로 여겨진다. 추가로, 화합물 3-5, 화합물 7 및 화합물 8은 모두 비교 화합물 X보다 디바이스에서 더 낮은 작동(turn-on) 전압을 나타낸다. 마지막으로, 실시예 1-6에서 화학식 I의 화합물은 비교예에서보다 더 긴 디바이스 수명을 나타낸다. 예를 들면, 화합물 4 및 화합물 7은 각각 비교 화합물 X보다 약 2.5배 및 8배 더 높은 디바이스 수명을 갖는다.

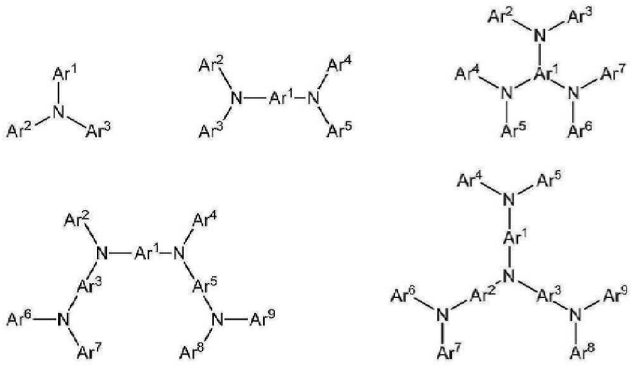
[0111] 기타의 물질과의 조합

[0112] 유기 발광 디바이스에서 특정 층에 대하여 유용한 것으로 본원에 기재된 물질은 디바이스에 존재하는 다양한 기타의 물질과의 조합에 사용될 수 있다. 예를 들면, 본원에 개시된 발광 도펀트는 호스트, 수송층, 차단층, 주입층, 전극 및 존재할 수 있는 기타의 층과 결합되어 사용될 수 있다. 하기에 기재되거나 또는 지칭된 물질은 본원에 개시된 화합물과 조합하여 유용할 수 있는 비제한적인 물질이며, 당업자중 하나는 조합에 유용할 수 있는 기타의 물질을 확인하는 문헌을 용이하게 참조할 수 있다.

[0113] HIL/HTL:

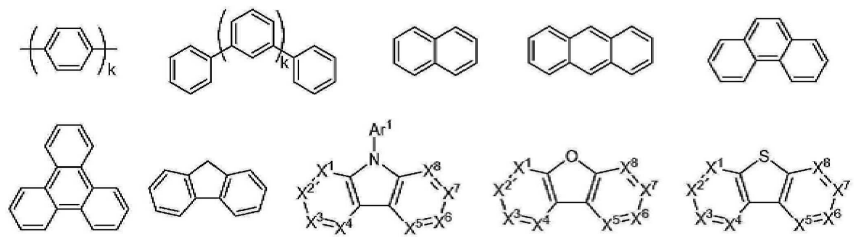
[0114] 본 발명에서 사용하고자 하는 정공 주입/수송 물질은 특정하게 한정되지 않으며, 화합물이 정공 주입/수송 물질로서 사용되는 한 임의의 화합물을 사용할 수 있다. 물질의 비제한적인 예로는 프탈로시아닌 또는 포르피린 유도체; 방향족 아민 유도체; 인돌로카르바졸 유도체; 플루오로탄화수소를 포함하는 중합체; 전도성 도펀트를 갖는 중합체; 전도성 중합체, 예컨대 PEDOT/PSS; 포스폰산 및 실란 유도체와 같은 화합물로부터 유도된 자체조립 단량체; 금속 산화물 유도체, 예컨대 MoO_x; p-형 반도체 유기 화합물, 예컨대 1,4,5,8,9,12-헥사아자트리페닐렌 헥사카르보니트릴; 금속 착물 및 가교성 화합물을 들 수 있다.

[0115] HIL 또는 HTL에 사용된 방향족 아민 유도체의 비제한적인 예로는 하기 화학식을 들 수 있다:

[0116] 

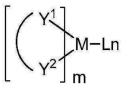
[0117] 각각의 Ar^1 내지 Ar^9는 벤젠, 비페닐, 트리페닐, 트리페닐렌, 나프탈렌, 안트라센, 페날렌, 페난트렌, 플루오렌, 피렌, 크리센, 페릴렌, 아줄렌과 같은 방향족 탄화수소 고리형 화합물로 이루어진 군; 디벤조티오펜, 디벤조푸란, 디벤조셀레노펜, 푸란, 티오펜, 벤조푸란, 벤조티오펜, 벤조셀레노펜, 카르바졸, 인돌로카르바졸, 피리딜인돌, 피롤로디피리딘, 피라졸, 이미다졸, 트리아졸, 옥사졸, 티아졸, 옥사디아졸, 옥사트리아졸, 디옥사졸, 티아디아졸, 피리딘, 피리다진, 피리미딘, 피라진, 트리아진, 옥사진, 옥사티아진, 옥사디아진, 인돌, 벤즈이미다졸, 인다졸, 인독사진, 벤족사졸, 벤즈이속사졸, 벤조티아졸, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 시놀린, 퀴나졸린, 퀴녹살린, 나프티리딘, 프탈라진, 프테리딘, 크산텐, 아크리딘, 페나진, 페노티아진, 펜옥사진, 벤조푸로피리딘, 푸로디피리딘, 벤조티에노피리딘, 티에노디피리딘, 벤조셀레노페노피리딘 및 셀레노페노디피리딘과 같은 방향족 헤테로시클릭 화합물로 이루어진 군; 및 방향족 탄화수소 고리형 기 및 방향족 헤테로시클릭 기로부터 선택된 동일한 유형 또는 상이한 유형의 군이며 산소 원자, 질소 원자, 황 원자, 규소 원자, 인 원자, 붕소 원자, 쇄 구조 단위 및 지방족 고리형 기에 서로 직접 또는 이들 중 1종 이상을 통하여 결합되는 2 내지 10개의 고리형 구조 단위로 이루어진 군으로부터 선택된다. 각각의 Ar은 수소, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술파닐, 술피닐, 술포닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택된 치환기로 추가로 치환된다.

[0118] 하나의 구체예에서, Ar^1 내지 Ar^9는 하기로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다:

[0119] 

[0120] k는 1 내지 20의 정수이며; X^1 내지 X^8은 C(CH 포함) 또는 N이고; Ar^1은 상기 정의된 바와 동일한 기를 갖는다.

[0121] HIL 또는 HTL에 사용되는 금속 착물의 비제한적인 예는 하기 화학식을 갖는다:

[0122] 

[0123] M은 원자량이 40보다 큰 금속이며; (Y^1-Y^2)는 2좌 리간드이고, Y^1 및 Y^2는 C, N, O, P 및 S로부터 독립적으로 선택되며; L은 보조 리간드이며; m은 1 내지 금속에 결합될 수 있는 리간드 최대수의 정수값이고; m+n은 금속에 결합될 수 있는 리간드의 최대수이다.

[0124] 하나의 구체예에서, (Y^1-Y^2)는 2-페닐피리딘 유도체이다.

[0125] 또다른 구체예에서, (Y^1-Y^2)는 카르벤 리간드이다.

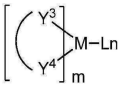
[0126] 또다른 구체예에서, M은 Ir, Pt, Os 및 Zn으로부터 선택된다.

[0127] 추가의 구체예에서, 금속 착물은 약 0.6 V 미만인 용액중의 최소 산화 전위 대 Fc^+/Fc 커플을 갖는다.

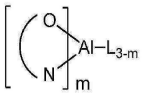
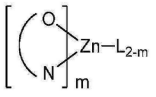
[0128] 호스트:

[0129] 본 발명의 유기 EL 디바이스의 발광층은 바람직하게는 발광 물질로서 적어도 금속 착물을 포함하며, 도펀트 물질로서 금속 착물을 사용하는 호스트 물질을 포함할 수 있다. 호스트 물질의 예로는 특정하여 한정되지는 않았으나, 임의의 금속 착물 또는 유기 화합물은 호스트의 삼중항 에너지가 도펀트의 것보다 더 크기만 하다면 사용할 수 있다.

[0130] 호스트로서 사용된 금속 착물의 예는 하기 화학식을 갖는 것이 바람직하다:

[0131] 

[0132] M은 금속이고; (Y^3-Y^4)는 2좌 리간드이고, Y^3 및 Y^4는 C, N, O, P 및 S로부터 독립적으로 선택되며; L은 보조 리간드이며; m은 1 내지 금속이 결합될 수 있는 리간드 최대수의 정수값이고; m+n은 금속에 결합될 수 있는 리간드의 최대수이다.

[0133] 하나의 구체예에서, 금속 착물은   이다.

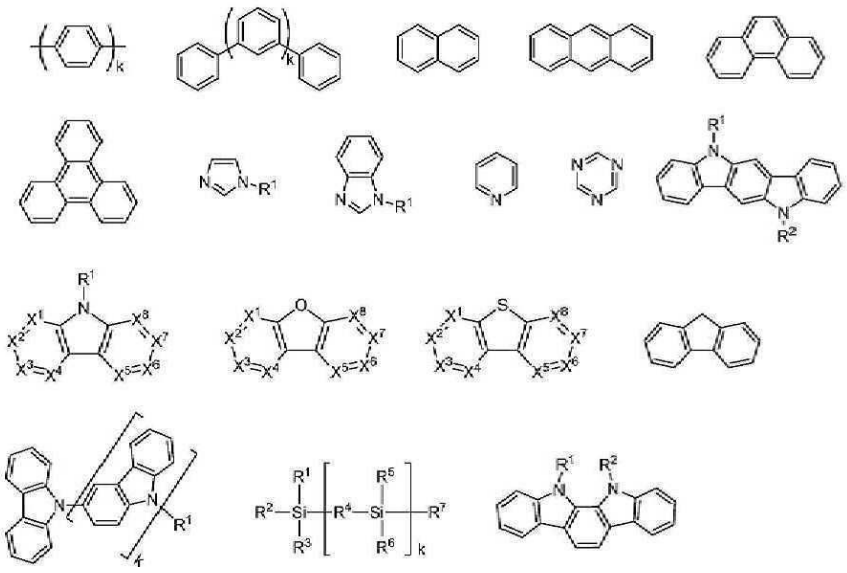
[0134] (O-N)은 원자 O 및 N에 배위 결합된 금속을 갖는 2좌 리간드이다.

[0135] 또다른 구체예에서, M은 Ir 및 Pt로부터 선택된다.

[0136] 추가의 구체예에서, (Y^3-Y^4)는 카르벤 리간드이다.

[0137] 호스트로서 사용된 유기 화합물의 예는 방향족 탄화수소 고리형 화합물, 예컨대 벤젠, 비페닐, 트리페닐, 트리페닐렌, 나프탈렌, 안트라센, 페날렌, 페난트렌, 플루오렌, 피렌, 크리센, 페릴렌, 아줄렌으로 이루어진 군; 방향족 헤테로시클릭 화합물, 예컨대 디벤조티오펜, 디벤조푸란, 디벤조셀레노펜, 푸란, 티오펜, 벤조푸란, 벤조티오펜, 벤조셀레노펜, 카르바졸, 인돌로카르바졸, 피리딜인돌, 피롤로디피리딘, 피라졸, 이미다졸, 트리아졸, 옥사졸, 티아졸, 옥사디아졸, 옥사트리아졸, 디옥사졸, 티아디아졸, 피리딘, 피리다진, 피리미딘, 피라진, 트리아진, 옥사진, 옥사티아진, 옥사디아진, 인돌, 벤즈이미다졸, 인다졸, 인독사진, 벤족사졸, 벤즈이속사졸, 벤조티아졸, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 신놀린, 퀴나졸린, 퀴녹살린, 나프티리딘, 프탈라진, 프테리딘, 크산텐, 아크리딘, 페나진, 페노티아진, 펜옥사진, 벤조푸로피리딘, 푸로디피리딘, 벤조티에노피리딘, 티에노디피리딘, 벤조셀레노페노피리딘 및 셀레노페노디피리딘으로 이루어진 군; 및 방향족 탄화수소 고리형 기 및 방향족 헤테로시클릭 기로부터 선택된 동일한 유형 또는 상이한 유형의 기이며 서로 직접 결합되거나 또는 산소 원자, 질소 원자, 황 원자, 규소 원자, 인 원자, 붕소 원자, 쇄 구조 단위 및 지방족 고리형 기 중 1종 이상에 의하여 결합되는 2 내지 10개의 고리형 구조 단위로 이루어진 군으로부터 선택된 것을 들 수 있다. 각각의 기는 수소, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술파닐, 술피닐, 술포닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택된 치환기로 추가로 치환된다.

[0138] 하나의 구체예에서, 호스트 화합물은 분자에서 하기 기 중 1종 이상을 포함한다:

[0139] 

[0140] R^1 내지 R^7은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되며, 아릴 또는 헤테로아릴인 경우, 전술한 Ar과 유사한 정의를 갖는다.

[0141] k는 0 내지 20의 정수이다.

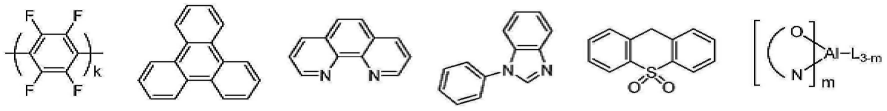
[0142] X^1 내지 X^8은 C(CH 포함) 또는 N으로부터 선택된다.

[0143] HBL:

[0144] 정공 차단층(HBL)은 발광층에서 배출되는 정공 및/또는 엑시톤의 수를 감소시키는데 사용될 수 있다. 디바이스에서의 이러한 차단층의 존재는 실질적으로 차단층이 결여된 유사한 디바이스에 비하여 더 높은 효율을 초래할 수 있다. 또한, 차단층은 OLED의 소정의 부위로 방출을 한정시키는데 사용될 수 있다.

[0145] 하나의 구체예에서, HBL에 사용된 화합물은 상기 기재된 호스트로서 사용된 동일한 분자를 함유한다.

[0146] 또다른 구체예에서, HBL에 사용된 화합물은 분자내에서 하기 기 중 하나 이상을 함유한다:

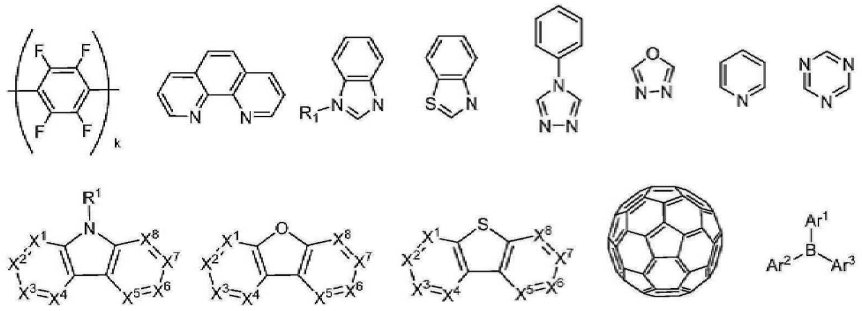
[0147] 

[0148] k는 0 내지 20의 정수이고; L은 보조 리간드이고, m은 1 내지 3의 정수이다.

[0149] ETL:

[0150] 전자 수송층(ETL)은 전자를 수송할 수 있는 물질을 포함할 수 있다. 전자 수송층은 고유하거나(도핑되지 않음) 또는 도핑될 수 있다. 도핑은 전도율을 향상시키는데 사용될 수 있다. ETL 물질의 예는 특정하게 한정되지는 않았으며, 임의의 금속 착물 또는 유기 화합물은 통상적으로 전자를 수송하는데 사용되는 한 사용될 수 있다.

[0151] 하나의 실시양태에서, ETL에 사용되는 화합물은 분자에서 하기 기 중 1종 이상을 포함한다:



[0152]

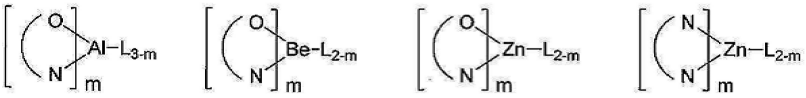
[0153] R^1은 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다. 아릴 또는 헤테로아릴인 경우, 전술한 Ar과 유사한 정의를 갖는다.

[0154] Ar^1 내지 Ar^3은 전술한 Ar과 유사한 정의를 갖는다.

[0155] k는 0 내지 20의 정수이다.

[0156] X^1 내지 X^8은 C(CH 포함) 또는 N으로부터 선택된다.

[0157] 또다른 구체예에서, ETL에 사용된 금속 착물은 하기의 화학식을 포함하지만, 이에 한정되는 것은 아니다:



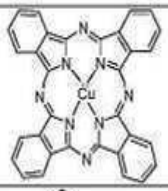
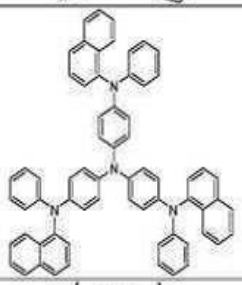
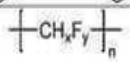
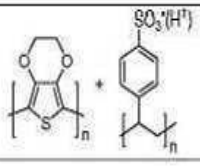
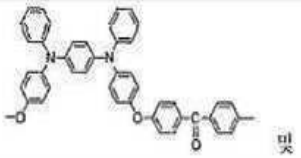
[0158]

[0159] (O-N) 또는 (N-N)은 원자 O, N 또는 N,N에 배위 결합된 금속을 갖는 2좌 리간드이며; L은 보조 리간드이며; m은 1 내지 금속에 결합될 수 있는 리간드 최대수의 정수값이다.

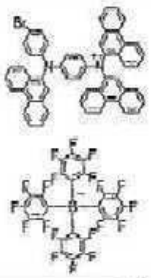
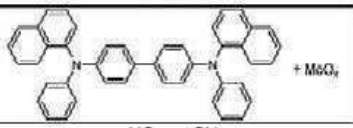
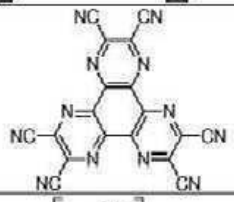
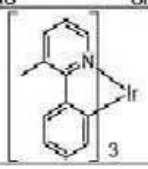
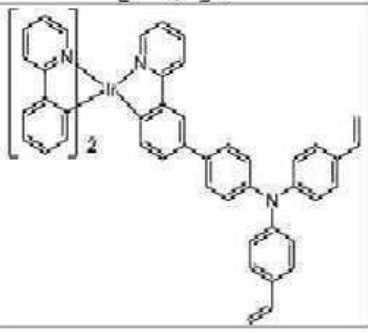
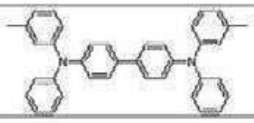
[0160] OLED 디바이스의 각각의 층에 사용된 임의의 전술한 화합물에서, 수소 원자는 부분 또는 완전 중수소화될 수 있다.

[0161] 본원에 개시된 물질 이외에 및/또는 이와 조합하여, 다수의 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 호스트 물질, 도펀트 물질, 엑시톤/정공 차단층 물질, 전자 수송 및 전자 주입 물질이 OLED에 사용될 수 있다. 본원에 개시된 물질과 조합하여 OLED에 사용될 수 있는 물질의 비제한적인 예는 하기 표 3에 제시되어 있다. 하기 표 3은 물질의 비제한적인 유형, 각각의 유형에 대한 화합물의 비제한적인 예 및 물질을 개시하는 참고 문헌을 제시한다.

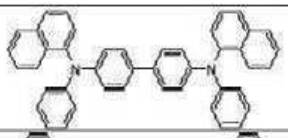
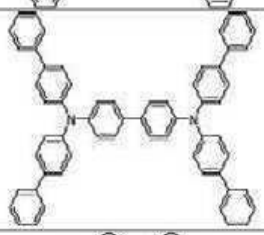
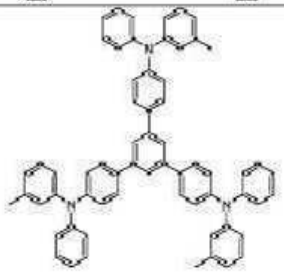
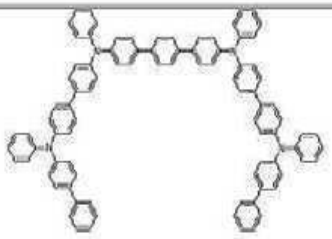
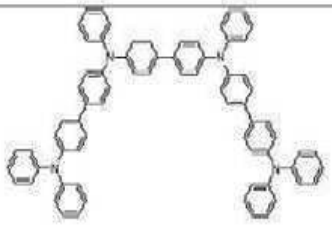
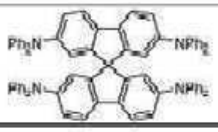
[0162] <표 3>

물질	물질의 예	문헌
정공 주입 물질		
프탈로시아닌 및 포르피린 화합물		Appl. Phys. Lett. 69, 2160 (1996)
스타버스트 트리아릴아민		J. Lumin. 72-74, 985 (1997)
CF_x 플루오로탄화수소 중합체		Appl. Phys. Lett. 78, 673 (2001)
전도성 중합체 (예, PEDOT:PSS, 폴리아닐린, 폴리티오펜)		Synth. Met. 87, 171 (1997) WO2007002683
포스폰산 및 실란 SAM		US20030162053
전도성 도펀트를 갖는 트리아릴아민 또는 폴리티오펜 중합체		EA01725079A1

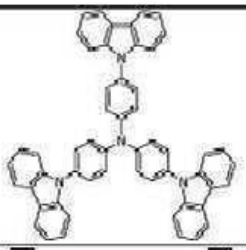
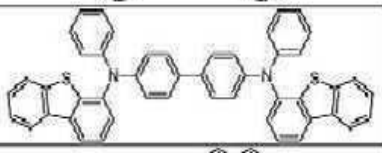
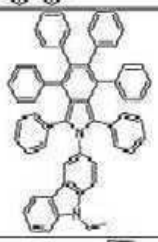
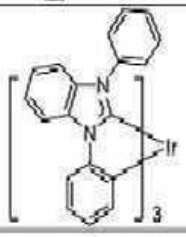
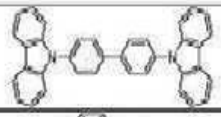
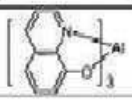
[0163]

		
불리브덴 및 텅스텐 산화물과 금속 산화물과 착물을 형성한 아릴아민		SID Symposium Digest, 37, 923 (2006) WO2009018009
p-형 반도체 유기 화물		US20020158242
금속 유기금속 착물		US20060240279
교차 화합물		US20080220265
정공 수송 물질		
트리아릴아민 (예, TPD, α-NPD)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987)

[0164]

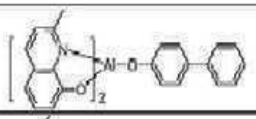
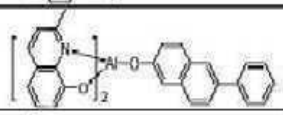
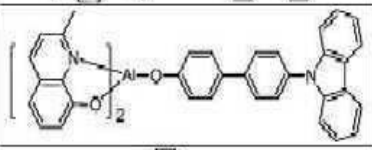
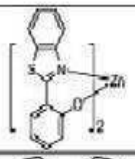
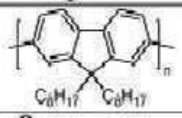
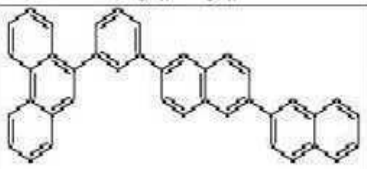
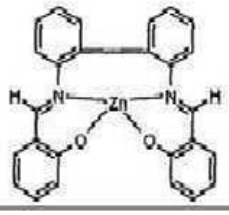
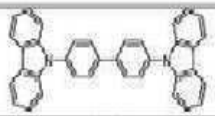
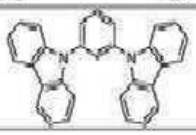
		US5061569
		EP650955
		J. Mater. Chem. 3, 319 (1993)
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)
스피로플루오렌 코어상의 트리아릴아민		Synth. Met. 91, 209 (1997)

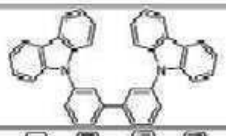
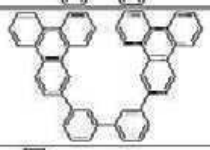
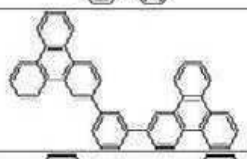
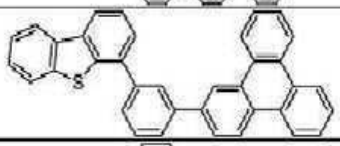
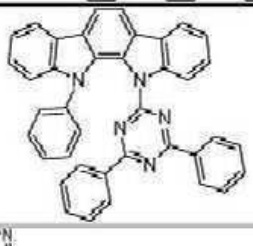
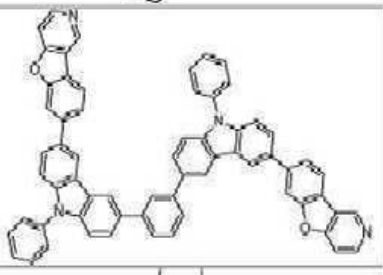
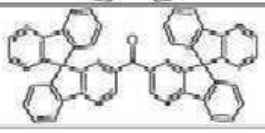
[0165]

아릴아민 카르바졸 화합물		Adv. Mater. 6, 677 (1994), US20080124572
(디)벤조티오펜/ (디)벤조푸란과의 트리아릴아민		US20070278938, US20080106190
인돌로카르바졸		Synth. Met. 111, 421 (2000)
이소인돌 화합물		Chem. Mater. 15, 3148 (2003)
금속 카르벤 착물		US20080018221
인광 OLED 호스트 물질		
적색 호스트		
아릴카르바졸		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
금속 8-하드록시퀴놀레이트 (예, Alq3, BAlq)		Nature 395, 151 (1998)

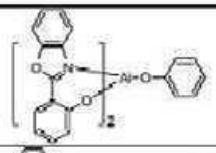
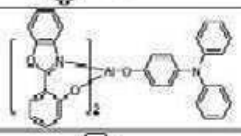
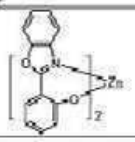
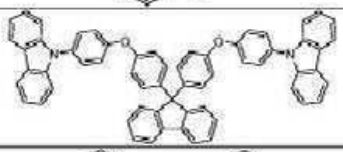
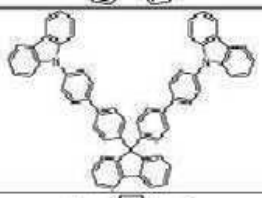
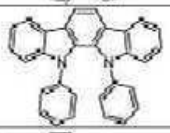
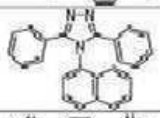
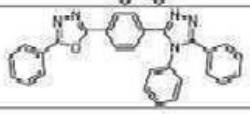
[0166]

[0167]

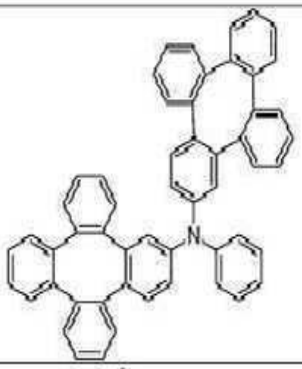
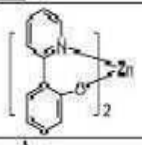
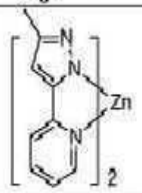
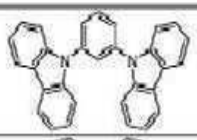
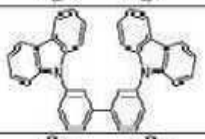
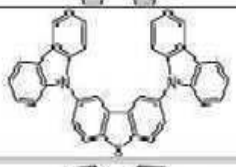
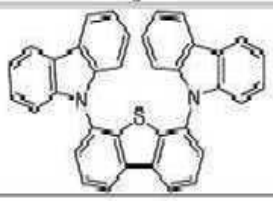
		US20060202194
		WO2005014551
		WO2006072002
금속 페녹시벤조디아졸 화합물		Appl. Phys. Lett. 90, 123509 (2007)
폴리 올리고머 및 공중합체 (예, 폴리플루오렌)		Org. Electron. 1, 15 (2000)
방향족 융합 고리		WO2009066779, WO2009066778, WO2009063833, US20090045731, US20090045730, WO2009008311, US20090008605, US20090009065
아연 착물		WO2009062578
녹색 호스트		
아릴카르바졸		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US20030175553

		WO2001039234
아릴아민계 화합물		US20060280965
		US20060280965
		WO2009021126
정공제 주입제 타입 분자		WO2008056746
아자-카르바졸/DBT/DBF		JP2008074939
중합체(예, PVK)		Appl. Phys. Lett. 77, 2280 (2000)
스피로플루오렌 화합물		WO2004093207

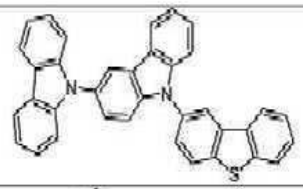
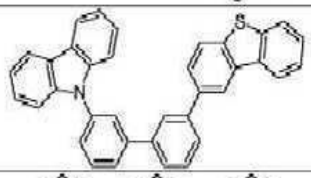
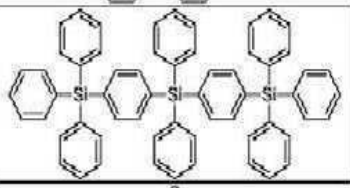
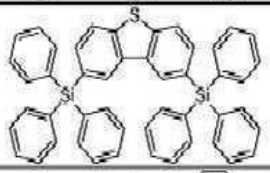
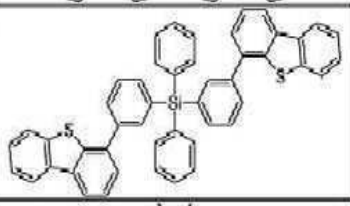
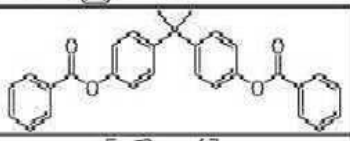
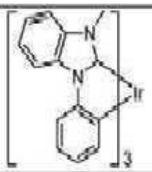
[0168]

금속 퀴옥시메톤옥시콤 화합물		WO2005089025
		WO2006132173
		JP200511610
스피로플루오렌-카르바졸 화합물		JP2007254297
		JP2007254297
인돌로카르바졸		WO2007063796
		WO2007063754
5-원 고리 전자 결여 헤테로사이클 (예, 트리아졸, 옥사디아졸)		J. Appl. Phys. 90, 5048 (2001)
		WO2004107822

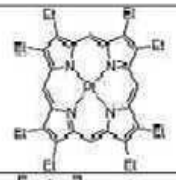
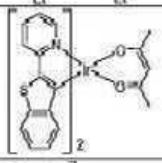
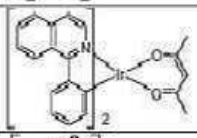
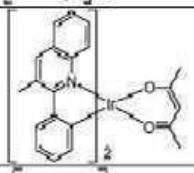
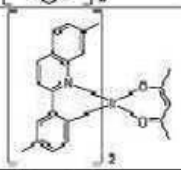
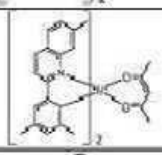
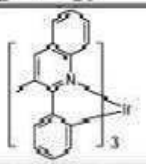
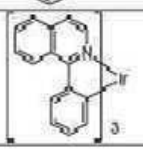
[0169]

테트라페닐렌 화물		US20050112407
금속 페녹시피리딘 화합물		WO2005030900
금속 페위 컴플 착물 (예, N^N리간드를 갖는 Zn, Al)		US20040137268, US20040137267
청색 호스트		
아릴카르바졸		Appl. Phys. Lett, 82, 2422 (2003)
		US20070190359
디벤조티오펜/디벤조푸란-카르바졸 화합물		WO2006114966, US20090167162
		US20090167162

[0170]

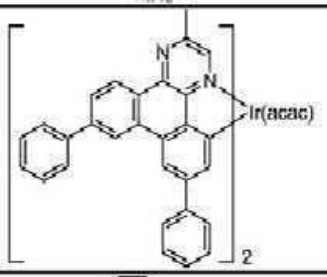
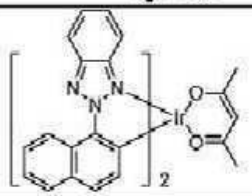
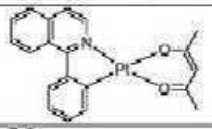
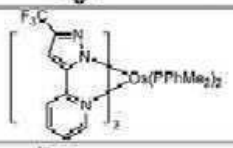
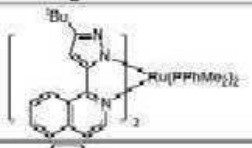
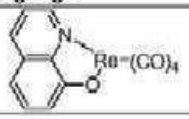
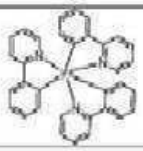
		WO2009086028
		US20090030202, US20090017330
규소 아릴 화합물		US20050238919
		WO2009003898
규소/게르마늄 아릴 화합물		EP2034538A
아릴 벤조일 에스테르		WO2006100298
고 삼중항 금속 유기금속 착물		US7154114
인광 도펀트		
적색 도펀트		

[0171]

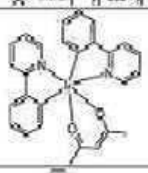
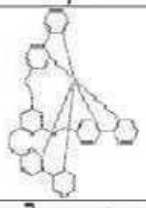
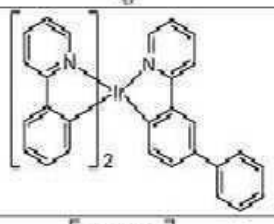
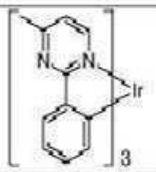
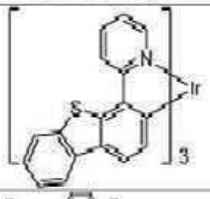
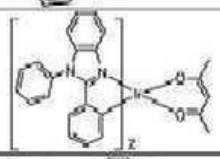
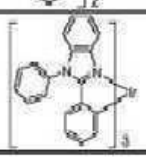
중금속 포르피린 (예, PtOEP)		Nature 395, 151 (1998)
이리듐(III) 유기금속 착물		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US2006835469
		US2006835469
		US20060202194
		US20060202194
		US20070087321
		US20070087321

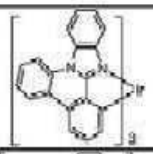
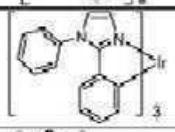
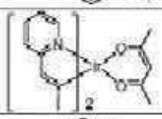
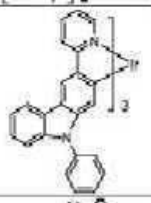
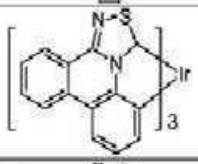
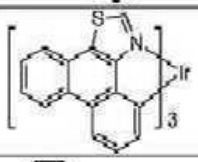
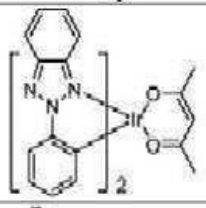
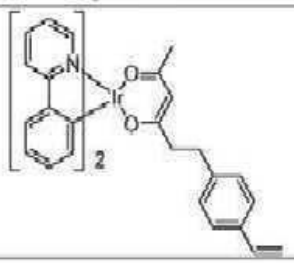
[0172]

[0173]

		Adv. Mater. 19, 739 (2007)
		WO2009100991
		WO2008101842
백금(II) 유기금속 착물		WO2003040257
오스뮴(III) 착물		Chem. Mater. 17, 3532 (2005)
루테늄(II) 착물		Adv. Mater. 17, 1059 (2005)
레늄 (I), (II) 및 (III) 착물		US20050244673
녹색 도펀트		
이리듐(III) 유기금속 착물		Inorg. Chem. 40, 1704 (2001)

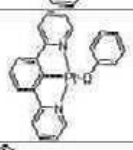
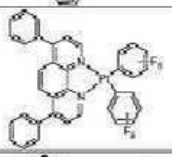
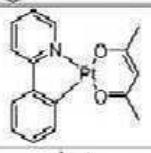
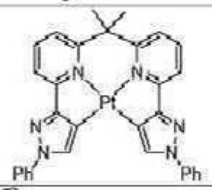
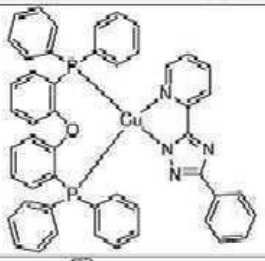
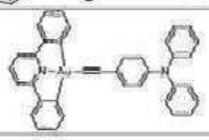
[0174]

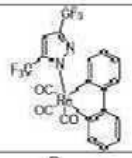
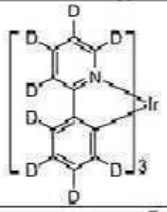
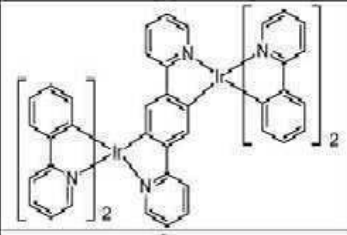
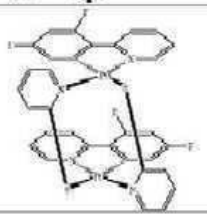
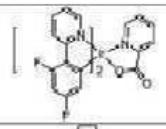
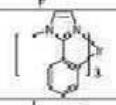
	및 그의 유도체	
		US20020034656
		US7332232
		US20090108737
		US20090039776
		US6921915
		US6687266
		Chem. Mater. 16, 2480 (2004)

		US20070190359
		US 20060008670 JP2007123392
		Adv. Mater. 16, 2003 (2004)
		Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7800
		WO2009050290
		US20090165846
		US20080015355
중합체 규칙 유기규칙 화합물에 대한 단량체		US7250226, US7396598

[0175]

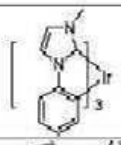
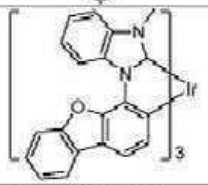
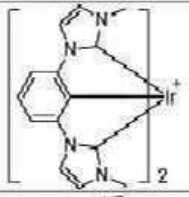
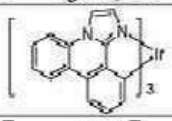
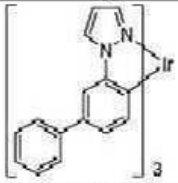
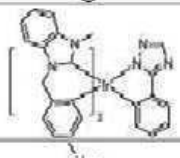
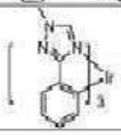
[0176]

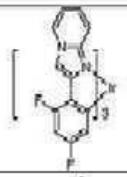
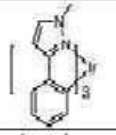
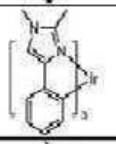
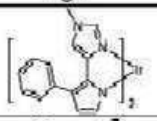
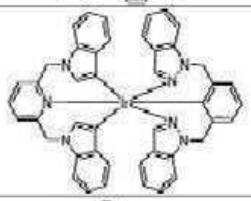
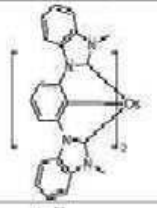
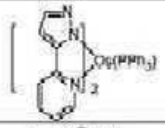
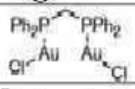
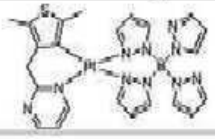
디좌 배위자 리간드를 포함하는 Pt(II) 유기금속 착물		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Chem. Lett. 34, 592 (2005)
		WO2002015645
		US20060263635
Cu 화합물		WO2009000673
참 착물		Chem. Commun. 2906 (2005)

레늄(III) 착물		Inorg. Chem. 42, 1248 (2003)
중수소화 유기금속 착물		US20030138657
2종 이상의 금속 중심을 갖는 유기금속 착물		US20030152802
		US7090928
청색 도펀트		
이리듐(III) 유기금속 착물		WO2002002714
		WO2006009024
		US20060251923

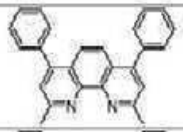
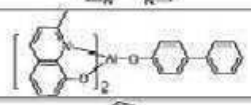
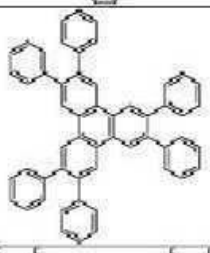
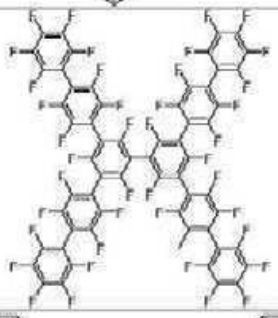
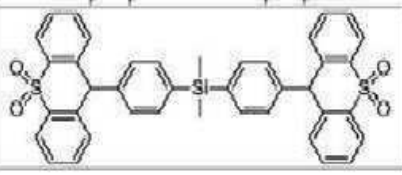
[0177]

[0178]

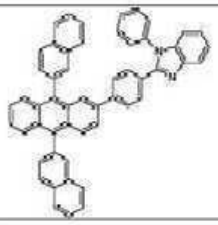
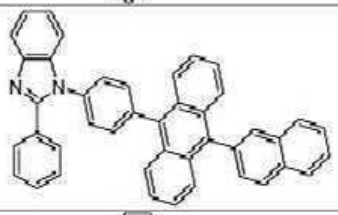
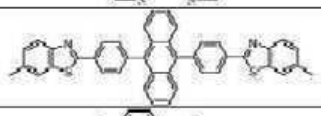
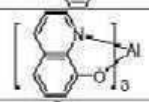
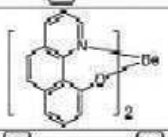
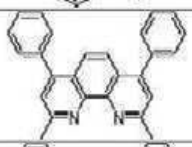
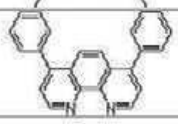
		US7393599, WO2006056418, US20050260441, WO2005019373
		US7534505
		US7445855
		US20070190359, US20080297033
		US7338722
		US20020134984
		Angew. Chem. Int. Ed. 47, 1 (2008)
		Chem. Mater. 18, 5119 (2006)

		Inorg. Chem. 46, 4308 (2007)
		WO2005123873
		WO2005123873
		WO2007004380
		WO2006082742
오스뮴(II) 착물		US7279704
		Organometallics 23, 3745 (2004)
금 착물		Appl. Phys. Lett.74,1361 (1999)
백금(II) 착물		WO2006098120, WO2006103874
엑시톤/전공 차단층 물질		

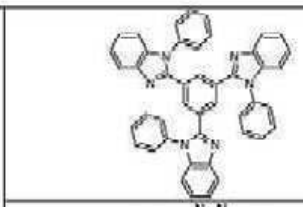
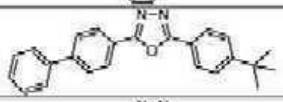
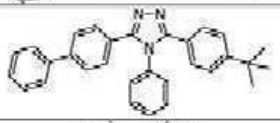
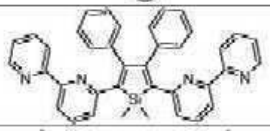
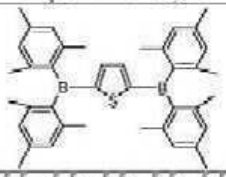
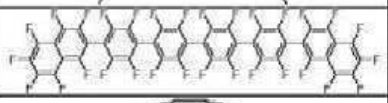
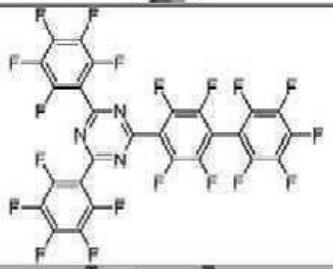
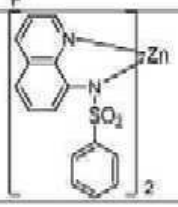
[0179]

바토쿠프린 화합물 (예, BCP, BPhen)		Appl. Phys. Lett. 75, 4 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
금속 8-히드록시퀴놀레이트 (예, BAlq)		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
5-원 고리 전자 결여 헤테로시이클, 예컨대 트리아졸, 옥사디아졸, 이미다졸, 벤조이미다졸		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
트리페닐렌 화합물		US20050025993
불소화 방향족 화합물		Appl. Phys. Lett. 79, 156 (2001)
페노티아진-S-옥시드		WO2008132085
전자 수송 물질		

[0180]

안트라센-벤조이미다졸 화합물		WO2003060956
		US20090179554
아자 트리페닐렌 유도체		US20090115316
안트라센-벤조티아졸 화합물		Appl. Phys. Lett. 89, 063504 (2006)
금속 8-하드록시퀴놀레이트 (예, Alq_3, Zrq_4)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987) US7230107
금속 하드록시 벤조퀴놀레이트		Chem. Lett. 5, 905 (1993)
바토큐프로인 화합물, 예컨대 BCP, BPhen, 등		Appl. Phys. Lett. 91, 263503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)

[0181]

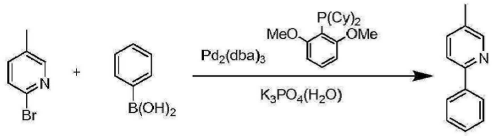
5-원 고리 전자 결여 헤테로사이클 (예, 트리아졸, 옥사디아졸, 이미다졸, 벤조이미다졸)		Appl. Phys. Lett. 74, 865 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 55, 1489 (1989)
		Jpn. J. Apply. Phys. 32, L917 (1993)
실롤 화합물		Org. Electron. 4, 113 (2003)
아릴보란 화합물		J. Am. Chem. Soc. 120, 9714 (1998)
불소화 방향족 화합물		J. Am. Chem. Soc. 122, 1832 (2000)
풀러렌(예, C60)		US20090101870
트리아진 화합물		US20040036077
Zn(N^N) 화합물		US6328187

[0182]

[0183] 실험

[0184] 본 명세서에서 사용한 화학적 약어는 하기와 같다: Cy는 시클로헥실이며, dba는 디벤질리덴아세톤이며, EtOAc는 에틸 아세테이트이고, S-Phos는 디시클로헥실(2',6'-디메톡시-[1,1'-비페닐]-3-일)포스핀, THF는 테트라히드로푸란이고, DCM은 디클로로메탄이고, PPh_3은 트리페닐포스핀이다.

[0185] 화합물 3의 합성

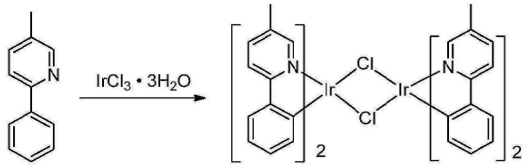


[0186]

[0187] 단계 1

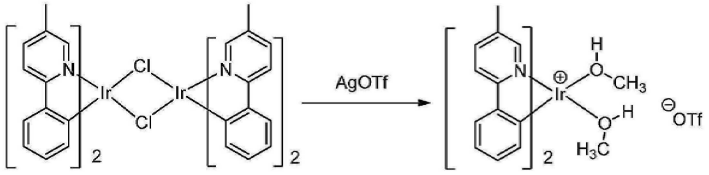
[0188] 5-메틸-2-페닐피리딘의 합성

[0189] 1 ℓ 둥근 바닥 플라스크에 톨루엔(600 mℓ) 및 물(60 mℓ)과 함께 2-브로모-5-메틸피리딘(30 g, 174 mmol), 페닐보론산(25.5 g, 209 mmol), 디시클로헥실(2',6'-디메톡시-[1,1'-비페닐]-2-일)포스핀(2.86 g, 6.98 mmol) 및 인산칼륨 3염기성 일수화물(120 g, 523 mmol)을 첨가하였다. N_2를 사용하여 반응 혼합물을 20 분 동안 탈기시켰다. $Pd_2(dba)_3$(3.19 g, 3.49 mmol)를 첨가하고, 반응 혼합물을 18시간 동안 환류시켰다. 반응 혼합물을 냉각시키고, 수성층을 제거하고, 유기층을 무수 상태로 농축시켜 잔류물을 얻었다. 잔류물을 EtOAc:헥산(1:3)에 용해시키고, 작은 실리카 겔 플러그에 통과시키고, EtOAc:헥산(1:3)으로 용출시켰다. 용매를 제거하고, 미정제 생성물을 쿠겔로(Kugelrohr)에 의하여 150℃에서 정제하여 26 g의 5-메틸-2-페닐피리딘을 얻고, 이를 백색 고체(HPLC 순도: 99.2%)로서 얻었다.

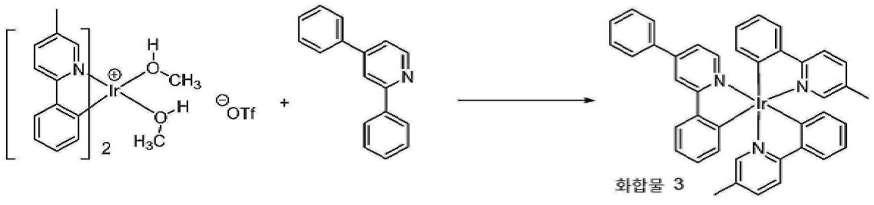
[0190] 

[0191] 단계 2

[0192] 이리듐 클로로-가교된 이량체의 합성: 500 mℓ 둥근 바닥 플라스크에 2-에톡시에탄올(100 mℓ) 및 물(33.3 mℓ)과 함께 5-메틸-2-페닐피리딘(12 g, 70.9 mmol) 및 염화이리듐(III) 수화물(7.14 g, 20.2 mmol)을 질소 분위기하에서 첨가하였다. 생성된 반응 혼합물을 130℃에서 18 시간 동안 환류시켰다. 생성된 침전물을 여과하고, 메탄올(3-4회) 및 헥산(3-4회)으로 세정하였다. 얻은 생성물을 건조시켜 11.0 g(96% 수율)의 목적 생성물을 얻었다.

[0193] 

[0194] 이리듐 트리플루오로메탄술포네이트 염의 합성: 상기 단계 2에서 얻은 바와 같은 이리듐 이량체(11 g, 9.75 mmol)를 600 mℓ의 디클로로메탄에 현탁시켰다. 별도의 플라스크에, 은(I) 트리플루오로메탄술포네이트(5.26 g, 20.48 mmol)를 MeOH(300 mℓ)에 용해시키고, 실온에서 연속 교반하면서 디클로로메탄 현탁액에 서서히 첨가하였다. 반응 혼합물을 밤새 암실에서 교반하였다. 반응 혼합물을 조밀하게 팩킹된 셀라이트(Celite)® 층을 통하여 여과하고, 용매를 진공하에 제거하여 15 g(100% 수율)의 생성물을 녹갈색 고체로서 얻었다. 생성물을 추가로 정제하지 않고 사용하였다.

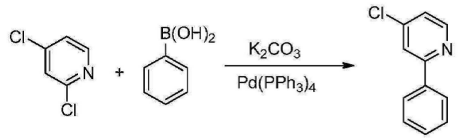
[0195] 

[0196] 단계 3

[0197] 화합물 3의 합성: EtOH(30 mℓ) 및 MeOH(30 mℓ) 중의 상기 단계 2로부터 얻은 바와 같은 이리듐 트리플루오로메탄술포네이트 착물(3.0 g, 4.04 mmol) 및 2,4-디페닐피리딘(3.11 g, 13.45 mmol)의 혼합물을 20 시간 동안 불활성 분위기하에서 환류시켰다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 에탄올로 희석하고, 셀라이트®를 첨가하고, 혼합물을 10 분 동안 교반하였다. 혼합물을 프릿위의 작은 실리카 겔 플러그상에서 여과하고, 에탄올(3-4회) 및 헥산(3-4회)으로 세정하였다. 여과액을 버렸다. 그후, 셀라이트®/실리카 플러그를 디클로로메탄으로 세정하여 미정제 생성물을 용출시켰다. 미정제 생성물을 1/1 (v/v) 디클로로메탄/헥산에 이어서 4/1 (v/v) 디클

로로메탄/헥산을 사용하여 실리카 겔상에서 크로마토그래피하여 0.9 g의 화합물 3(28% 수율)을 얻고, 이를 HPLC(99.9% 순도) 및 LC/MS로 확인하였다.

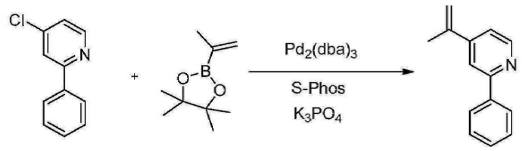
[0198] 화합물 4의 합성



[0199]

[0200] 단계 1

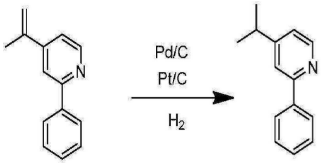
[0201] 4-클로로-2-페닐피리딘의 합성: 1 ℓ 둥근 바닥 플라스크에 2,4-디클로로피리딘(30 g, 203 mmol), 페닐보론산(24.7 g, 203 mmol), 탄산칼륨(84 g, 608 mmol), $Pd(PPh_3)_4$(2.3 g, 2.0 mmol), 디메톡시에탄(500 mℓ) 및 물(150 mℓ)을 넣었다. 반응 혼합물을 탈기시키고, 20 시간 동안 환류 가열하였다. 층을 냉각 및 분리시킨 후, 수성층을 EtOAc(2×100 mℓ)로 추출하였다. 용매를 제거한 후, 미정제 생성물을 컬럼 크로마토그래피(SiO_2, 헥산 중의 5% EtOAc 내지 헥산 중의 10% EtOAc)로 처리하여 34 g(88 % 수율)의 순수한 생성물을 얻었다.



[0202]

[0203] 단계 2

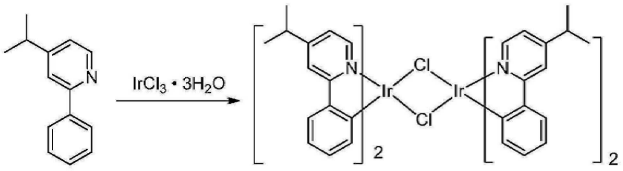
[0204] 2-페닐-4-(프로프-1-엔-2-일)피리딘의 합성: 4-클로로-2-페닐피리딘(14.0 g, 73.8 mmol) 및 인산칼륨(51.0 g, 221 mmol)을 300 mℓ의 톨루엔 및 30 mℓ의 물에 용해시켰다. 반응을 질소로 20 분 동안 퍼징시킨 후, 4,4,5,5-테트라메틸-2-(프로프-1-엔-2-일)-1,3,2-디옥사보롤란(16.65 mℓ, 89 mmol), $Pd_2(dba)_3$(1.35 g, 1.48 mmol) 및 S-Phos(2.42 g, 5.91 mmol)를 첨가하였다. 반응을 18 시간 동안 환류시켰다. 냉각후, 100 mℓ의 물을 첨가하고, 층을 분리하고, 수성층을 100 mℓ의 에틸 아세테이트로 2회 추출하였다. 유기층을 DCM으로 용출시키는 실리카 겔의 플러그에 통과시켰다. 용매의 증발후, 미정제 생성물을 컬럼 크로마토그래피(SiO_2, 헥산 중의 5% EtOAc 내지 헥산 중의 10% EtOAc)로 처리하여 13.5 g의 순수한 생성물(90% 수율)을 얻었다.



[0205]

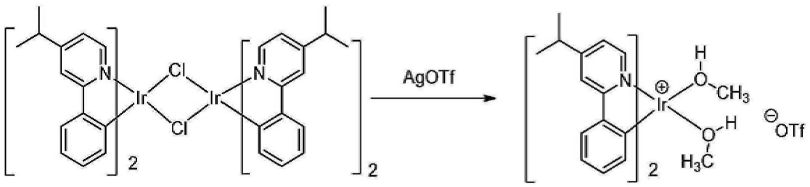
[0206] 단계 3

[0207] 2-페닐-4-프로필피리딘의 합성: 2-페닐-4-(프로프-1-엔-2-일)피리딘(13.5 g, 69.1 mmol)을 수소화기 병에 EtOH(150 mℓ)와 함께 첨가하였다. N_2를 10 분 동안 버블링시켜 반응 혼합물을 탈기시켰다. Pd/C(0.736 g, 6.91 mmol) 및 Pt/C(0.674 g, 3.46 mmol)를 첨가하였다. 반응 혼합물을 파르(Parr) 수소화기의 위에 2 시간 동안 두었다(H_2 약 84 psi, 이론치 계산에 의함). 반응 혼합물을 조밀하게 팩킹된 셀라이트® 층에서 여과하고, 디클로로메탄으로 세정하였다. 용매를 증발시키고, GC/MS로 완전 수소화를 확인하였다. 미정제 생성물을 컬럼 크로마토그래피용 셀라이트®의 위에 흡착시켰다. 미정제 생성물을 헥산 중의 10% EtOAc를 사용하여 실리카 겔상에서 크로마토그래피하여 10 g(75% 수율)의 목적 생성물(HPLC 순도: 99.8%)을 얻었다. 생성물을 GC/MS에 의하여 확인하였다.

[0208] 

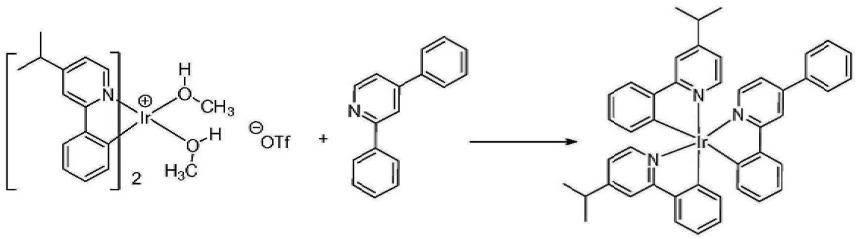
[0209] 단계 4

[0210] 이리듐 클로로-가교된 이량체의 합성: 500 ㎖ 둥근 바닥 플라스크에 2-에톡시에탄올(90 ㎖) 및 물(30 ㎖)과 함께 4-이소프로필-2-페닐피리딘(8.0 g, 40.6 mmol) 및 염화이리듐(III) 수화물(7.4 g, 20.28 mmol)을 질소 분위기하에서 첨가하였다. 생성된 반응 혼합물을 130℃에서 18 시간 동안 환류시켰다. 생성된 침전물을 여과하고, 메탄올(3-4회) 및 헥산(3-4회)으로 세정하였다. 얻은 생성물을 건조시켜 6.1 g(95 % 수율)의 목적 생성물을 얻었다.

[0211] 

[0212] 단계 5

[0213] 이리듐 트리플루오로메탄술포네이트 염의 합성: 상기 단계 4에서와 같이 얻은 이리듐 이량체(6.2 g, 4.94 mmol)를 500 ㎖의 디클로로메탄에 용해시켰다. 별도의 플라스크에서 은(I) 트리플루오로메탄술포네이트(2.66 g, 10.37 mmol)를 MeOH(250 ㎖)에 용해시키고, 실온에서 연속 교반하면서 디클로로메탄 용액에 서서히 첨가하였다. 반응 혼합물을 밤새 암실에서 교반하였다. 반응 혼합물을 조밀하게 팩킹된 셀라이트® 층을 통하여 여과하고, 용매를 진공하에 제거하여 7.8 g(100% 수율)의 생성물을 녹갈색 고체로서 얻었다. 생성물을 추가로 정제하지 않고 사용하였다.

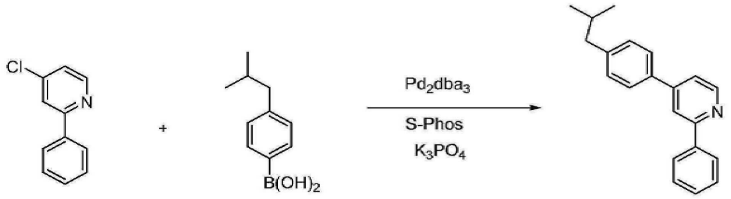
[0214] 

[0215] 단계 6

[0216] 화합물 4의 합성: EtOH(30 ㎖) 및 MeOH(30 ㎖) 중의 상기 단계 5에서와 같이 얻은 이리듐 트리플루오로메탄술포네이트 착물(2.4 g, 3.01 mmol) 및 2,4-디페닐피리딘(2.4 g,10.38 mmol)의 혼합물을 20 시간 동안 N_2 분위기하에서 환류시켰다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 에탄올로 희석하고, 셀라이트®를 첨가하고, 혼합물을 10분 동안 교반하였다. 혼합물을 작은 실리카 겔 플러그에서 여과하고, 에탄올(3-4회) 및 헥산(3-4회)으로 세정하였다. 여과액을 버렸다. 그후, 셀라이트®/실리카 플러그를 디클로로메탄으로 세정하여 생성물을 용출시켰다. 미정제 생성물을 헥산 중의 30% THF를 사용하여 실리카 겔상에서 크로마토그래피하여 1.24 g(51% 수율)의 화합물 4를 황색 고체로서 얻었다. 생성물을 HPLC(99.9% 순도) 및 LC/MS에 의하여 확인하였다.

[0217] 화합물 5의 합성

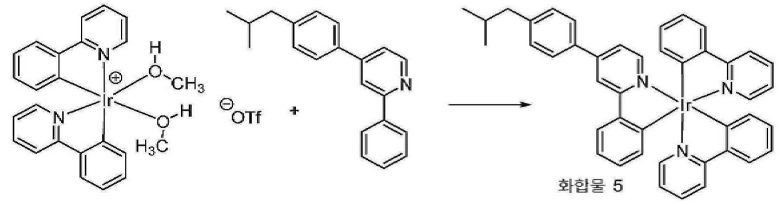
[0218] 단계 1



[0219]

[0220] 4-(4-이소부틸페닐)-2-페닐피리딘의 합성: 250 ㎖ 둥근 바닥 플라스크에 4-클로로-2-페닐피리딘(5 g, 26.4 mmol), (4-이소부틸페닐)보론산(7.04 g, 39.5 mmol), $Pd_2(dba)_3$(0.483 g, 0.527 mmol), 디시클로헥실(2',6'-디메톡시-[1,1'-비페닐]-3-일)포스핀(S-Phos)(0.866 g, 2.109 mmol), K_3PO_4(16.79 g, 79 mmol), 톨루엔(100 ㎖) 및 물(10 ㎖)을 가하여 황색 현탁액을 얻었다. 현탁액을 21 시간 동안 환류 가열하였다. 반응 혼합물을 물에 붓고, EtOAc로 추출하였다. 유기층을 합하고, 컬럼 크로마토그래피(SiO_2, 헥산 중의 10% EtOAc)하여 4-(4-이소부틸페닐)-2-페닐피리딘(6 g, 20.9 mmol, 79 % 수율)을 얻었다.

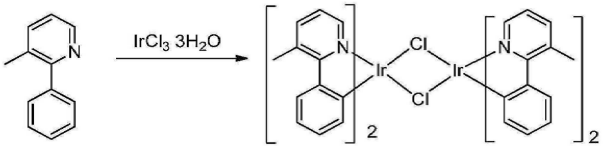
[0221] 단계 2



[0222]

[0223] 화합물 5의 합성: EtOH(30 ㎖) 및 MeOH(30 ㎖) 중의 이리듐 트리플루오로메탄술포네이트 착물(3.0 g, 3.76 mmol) 및 4-(4-이소부틸페닐)-2-페닐피리딘(3.0 g, 10.44 mmol)의 혼합물을 20 시간 동안 불활성 분위기하에서 환류시켰다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 에탄올로 희석하고, 셀라이트®를 첨가하고, 혼합물을 10 분 동안 교반하였다. 혼합물을 프릿위의 작은 실리카 겔 플러그상에서 여과하고, 에탄올(3-4회) 및 헥산(3-4회)으로 세정하였다. 여과액을 버렸다. 그후, 셀라이트®/실리카 플러그를 디클로로메탄으로 세정하여 생성물을 용출시켰다. 미정제 생성물을 1/1 디클로로메탄/헥산을 사용하여 실리카 겔상에서 크로마토그래피하여 2.0 g(65% 수율)의 화합물 5를 황색 고체로서 얻었다. 화합물 5는 HPLC(99.8% 순도) 및 LC/MS에 의하여 확인하였다.

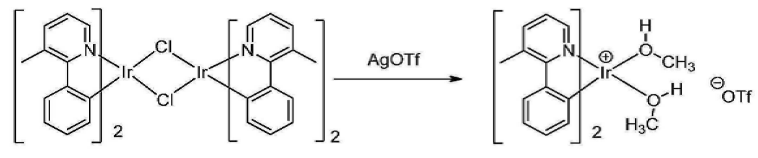
[0224] 화합물 6의 합성



[0225]

[0226] 단계 1

[0227] 이리듐 클로로-가교된 이량체의 합성: 500 ㎖ 둥근 바닥 플라스크에 3-메틸-2-페닐피리딘(5.7 g, 33.7 mmol) 및 염화이리듐(III) 수화물(5.94 g, 16.84 mmol), 2-에톡시에탄올(100 ㎖) 및 물(33.3 ㎖)을 첨가하였다. 생성된 반응 혼합물을 130℃에서 18 시간 동안 질소 분위기하에서 환류하였다. 생성된 침전물을 여과하고, 메탄올(3-4회) 및 헥산(3-4회)으로 세정하였다. 얻은 생성물을 건조시켜 6.35 g(66 % 수율)의 목적 생성물을 얻었다.

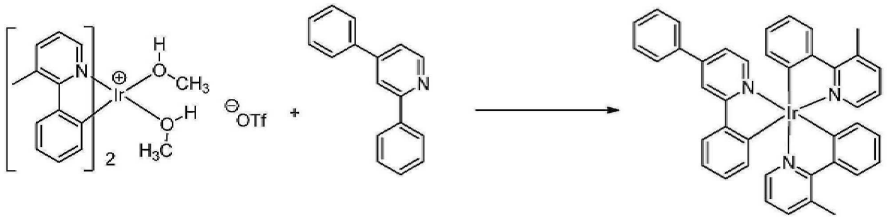


[0228]

[0229] 단계 2

[0230] 이리듐 트리플루오로메탄술포네이트 염의 합성: 이리듐 이량체(4.33 g, 3.84 mmol)를 500 ㎖의 디클로로메탄에

용해시켰다. 별도의 플라스크에서 은(I) 트리플루오로메탄술포네이트(2.07 g, 8.06 mmol)를 MeOH(250 ㎖)에 용해시키고, 실온에서 연속 교반하면서 디클로로메탄 용액에 서서히 첨가하였다. 반응 혼합물을 밤새 암실에서 교반하였다. 반응 혼합물을 조밀하게 팩킹된 셀라이트® 층을 통하여 여과하고, 용매를 진공하에 제거하여 5.86 g(100% 수율)의 생성물을 갈색 고체로서 얻었다. 생성물을 추가로 정제하지 않고 사용하였다.



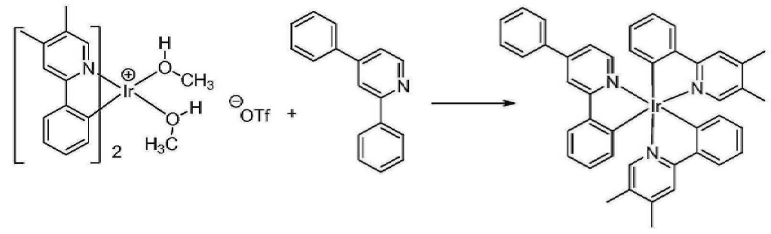
화합물 6

[0231]

[0232] 단계 3

[0233] 화합물 6의 합성: EtOH(30 ㎖) 및 MeOH(30 ㎖) 중의 이리듐 트리플루오로메탄술포네이트 착물(2.85 g, 3.84 mmol) 및 2-(디벤조[b,d]푸란-4-일)-4,5-디메틸피리딘(2.85 g, 12.33 mmol)의 혼합물을 20 시간 동안 불활성 분위기하에서 환류시켰다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 에탄올로 희석하고, 셀라이트®를 첨가하고, 혼합물을 10 분 동안 교반하였다. 혼합물을 프릿위의 작은 실리카 겔 플러그상에서 여과하고, 에탄올(3-4회) 및 헥산(3-4회)으로 세정하였다. 여과액을 버렸다. 그후, 셀라이트®/실리카 플러그를 디클로로메탄으로 세정하여 생성물을 용출시켰다. 미정제 생성물을 1/1 (v/v) 디클로로메탄/헥산을 사용하여 실리카 겔상에서 크로마토그래피하여 0.5 g(17% 수율)의 화합물 6을 황색 고체로서 얻었다. 화합물 6은 HPLC (99.8% 순도) 및 LC/MS에 의하여 확인하였다.

[0234] 화합물 7의 합성

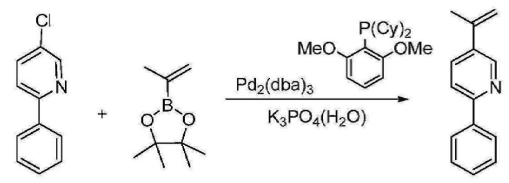


화합물 7

[0235]

[0236] EtOH(30 ㎖) 및 MeOH(30 ㎖) 중의 이리듐 트리플루오로메탄술포네이트 착물(3.0 g, 3.76 mmol) 및 4-(4-이소부틸페닐)-2-페닐피리딘(3.0 g, 10.44 mmol)의 혼합물을 20 시간 동안 불활성 분위기하에서 환류시켰다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 에탄올로 희석하고, 셀라이트®를 첨가하고, 혼합물을 10 분 동안 교반하였다. 혼합물을 프릿위의 작은 실리카 겔 플러그상에서 여과하고, 에탄올(3-4회) 및 헥산(3-4회)으로 세정하였다. 여과액을 버렸다. 그후, 셀라이트®/실리카 플러그를 디클로로메탄으로 세정하여 생성물을 용출시켰다. 미정제 생성물을 톨루엔을 사용하는 실리카 겔상에서 크로마토그래피하여 1.35 g(44% 수율)의 화합물 7을 황색 고체로서 얻었다. 화합물 7은 HPLC(99.9% 순도) 및 LC/MS에 의하여 확인하였다.

[0237] 화합물 8의 합성

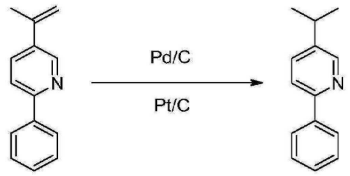


[0238]

[0239] 단계 1

[0240] 2-페닐-5-(프로프-1-엔-2-일)피리딘의 합성: 1 ℓ 둥근 바닥 플라스크에 톨루엔(200 ㎖) 및 물(20 ㎖)과 함께

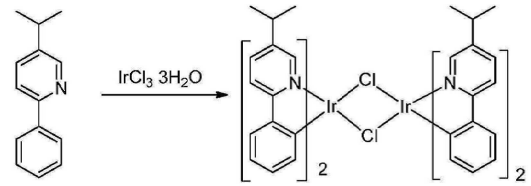
5-클로로-2-페닐피리딘(10.15 g, 53.5 mmol), 디시클로헥실(2',6'-디메톡시-[1,1'-비페닐]-2-일)포스핀(1.8 g, 4.3 mmol), 인산칼륨 3염기성 일수화물(37.0 g, 161 mmol)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 N_2로 20 분 동안 탈기시킨 후, 4,4,5,5-테트라메틸-2-(프로프-1-엔-2-일)-1,3,2-디옥사보롤란(12.07 ㎖, 64.2 mmol) 및 $Pd_2(dba)_3$(0.980 g, 1.070 mmol)를 첨가하고, 반응 혼합물을 18 시간 동안 환류시켰다. 수성층을 제거하고, 유기층을 무수 상태로 농축시켰다. 미정제 생성물을 헥산 중의 0-20% EtOAc를 사용하는 실리카 겔상에서 크로마토그래피하여 11 g의 목적 생성물(HPLC 순도: 95%)을 얻었다. 생성물을 GC/MS에 의하여 확인하였다.



[0241]

[0242] 단계 2

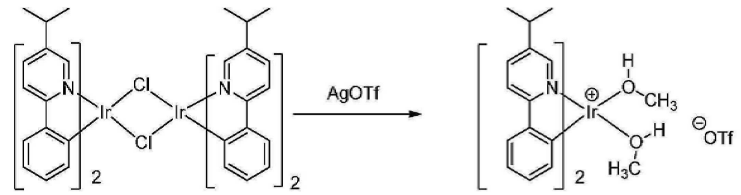
[0243] 2-페닐-5-이소프로필피리딘의 합성: 2-페닐-5-(프로프-1-엔-2-일)피리딘(11 g, 56.3 mmol)을 EtOH(150 ㎖)와 함께 수소화기 병에 첨가하였다. N_2를 10 분 동안 버블링하여 반응 혼합물을 탈기시킨 후, Pd/C(0.60 g, 5.63 mmol) 및 Pt/C(0.55 g, 2.82 mmol)를 첨가하였다. 반응 혼합물을 파르 수소화기에서 1.5 시간 동안 두었다(H_2 ~ 70 psi, 이론치 계산에 의함). 반응 혼합물을 조밀하게 팩킹된 셀라이트® 층에서 여과하고, 디클로로메탄으로 세정하였다. 용매를 회전증발기상에서 제거하고, GC/MS에 의하여 완전 전환을 확인하였다. 미정제 생성물을 컬럼 크로마토그래피용 셀라이트® 상에서 흡착시켰다. 헥산 중의 10% EtOAc를 사용하는 실리카 겔에서 미정제 생성물을 크로마토그래피하여 6 g(54% 수율)의 목적 생성물(HPLC 순도: 100%)을 얻었다. 생성물을 GC/MS에 의하여 확인하였다.



[0244]

[0245] 단계 3

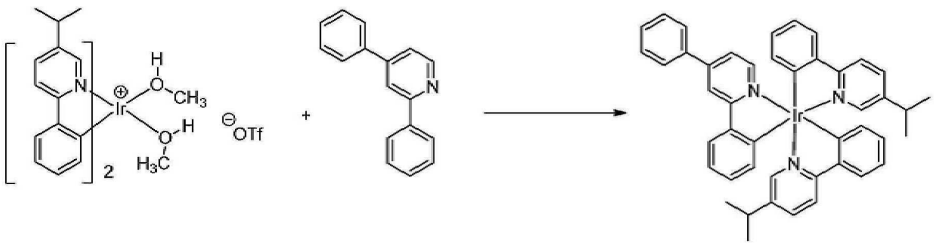
[0246] 이리듐 클로로-가교된 이량체의 합성: 500 ㎖ 둥근 바닥 플라스크에 2-에톡시에탄올(100 ㎖) 및 물(33.3 ㎖)과 함께 5-이소프로필-2-페닐피리딘(6.0 g, 30.4 mmol) 및 염화이리듐(III) 수화물(3.57 g, 10.14 mmol)을 질소 분위기하에서 첨가하였다. 생성된 반응 혼합물을 130℃에서 18 시간 동안 환류시켰다. 생성된 침전물을 여과하고, 메탄올(3-4회) 및 헥산(3-4회)으로 세정하였다. 얻은 생성물을 건조시켜 7 g(100 % 수율)의 목적 생성물을 얻었다.



[0247]

[0248] 단계 4

[0249] 이리듐 트리플루오로메탄술포네이트 염의 합성: 이리듐 이량체(5.3 g, 4.27 mmol)를 500 ㎖의 디클로로메탄에 용해시켰다. 별도의 플라스크에, 은(I) 트리플루오로메탄술포네이트(2.3 g, 8.97 mmol)를 MeOH(250 ㎖)에 용해시키고, 실온에서 연속 교반하면서 디클로로메탄 용액에 서서히 첨가하였다. 반응 혼합물을 밤새 암실에서 교반하였다. 반응 혼합물을 조밀하게 팩킹된 셀라이트® 층을 통하여 여과하고, 용매를 진공하에 제거하여 6.9 g(100% 수율)의 생성물을 갈색 고체로서 얻었다. 생성물을 추가로 정제하지 않고 사용하였다.



화합물 8

[0250]

[0251] 단계 5

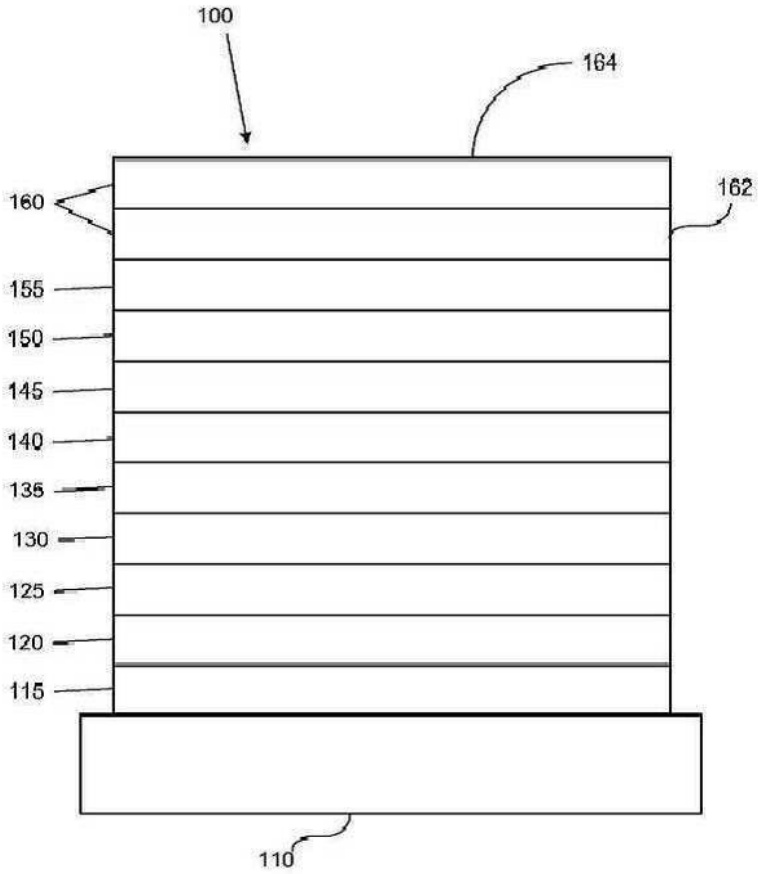
[0252] 화합물 8의 합성

[0253] EtOH(30 ㎖) 및 MeOH(30 ㎖) 중의 이리듐 트리플루오로메탄술포네이트 착물(3.0 g, 3.76 mmol) 및 2-(디벤조[b,d]푸란-4-일)-4,5-디메틸피리딘(3.0 g, 10.98 mmol)의 혼합물을 20 시간 동안 불활성 분위기하에서 환류시켰다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 에탄올로 희석하고, 셀라이트®를 첨가하고, 혼합물을 10 분 동안 교반하였다. 혼합물을 프릿위의 작은 실리카 겔 플러그상에서 여과하고, 에탄올(3-4회) 및 헥산(3-4회)으로 세정하였다. 여과액을 버렸다. 그후, 셀라이트®/실리카 플러그를 디클로로메탄으로 세정하여 생성물을 용출시켰다. 1/1 디클로로메탄/헥산을 사용하여 실리카 겔상에서 미정제 생성물을 크로마토그래피하여 2.1 g(65% 수율)의 화합물 8을 황색 고체로서 얻었다. 생성물을 HPLC (99.8% 순도) 및 LC/MS에 의하여 확인하였다.

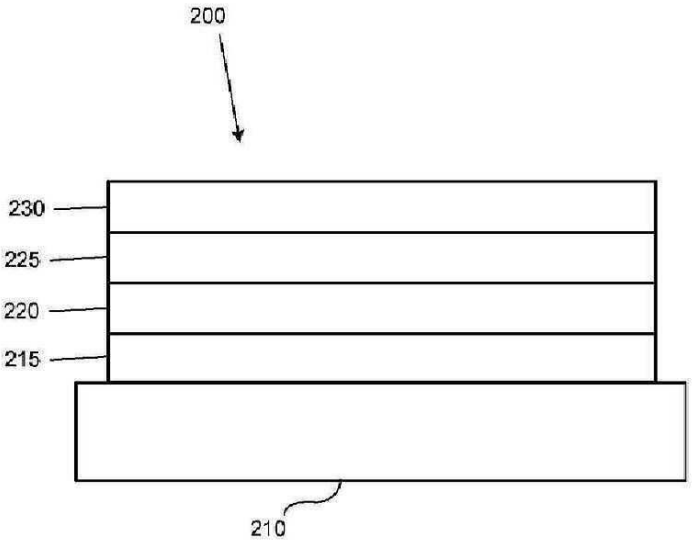
[0254] 본원에 기재된 다양한 실시양태는 단지 예시를 위한 것이며, 본 발명의 범주를 한정하고자 하는 것이 아닌 것으로 이해하여야 한다. 예를 들면, 본원에 기재된 다수의 물질 및 구조는 본 발명의 정신으로부터 벗어남이 없이 기타의 물질 및 구조로 치환될 수 있다. 청구된 바와 같은 본 발명은 당업자에게 자명한 바와 같이 본원에 기재된 특정한 예 및 바람직한 실시양태로부터의 변형을 포함한다. 본 발명이 작동되는 이유와 관련한 다양한 이론은 제한을 의도하는 것이 아닌 것으로 이해하여야 한다.

도면

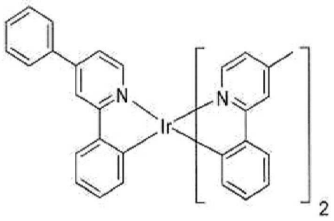
도면1


100
164
162
160
155
150
145
140
135
130
125
120
115
110

도면2


200
230
225
220
215
210

도면3



화합물 2

화학식 I