(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2017-0123717
(43) 공개일자 2017년11월08일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *C07F 15/00* (2006.01)
H01L 51/00 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
H05B 33/14 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
C07F 15/0033 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2017-7031196(분할)
(22) 출원일자(국제) 2010년04월28일
심사청구일자 없음
(62) 원출원 특허 10-2011-7027933
원출원일자(국제) 2010년04월28일
심사청구일자 2014년10월28일
(85) 번역문제출일자 2017년10월27일
(86) 국제출원번호 PCT/US2010/032720
(87) 국제공개번호 WO 2010/129323
국제공개일자 2010년11월11일
(30) 우선권주장
61/173,346 2009년04월28일 미국(US)
12/768,068 2010년04월27일 미국(US)

(71) 출원인
유니버셜 디스플레이 코포레이션
미국, 뉴저지 08618, 유잉, 필립스 불바르 375
(72) 발명자
시아 충퀸
미국 08648 뉴저지주 로렌스빌 클리베덴 코트 16
피오델리소 제임스
미국 19067 펜실베이니아주 모리스빌 저스티스 레인 401
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
김진희, 김태홍

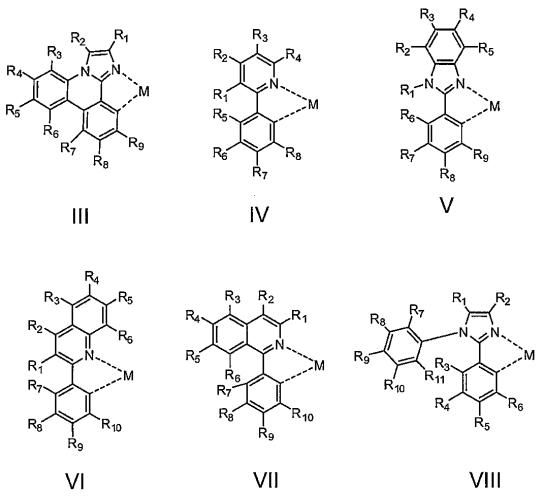
전체 청구항 수 : 총 51 항

(54) 발명의 명칭 **메틸-d3 치환을 갖는 이리듐 착체**

(57) 요 약

중수소 치환을 갖는 리간드를 포함하는 신규한 유기 화합물이 제공된다. 특히, 화합물은 메틸-d_3 치환된 리간드를 포함하는 이리듐 착체이다. 화합물은 개선된 색상, 효율 및 수명을 갖는 소자를 제공하기 위해 유기 발광 소자에 사용될 수 있다.

대 표 도 - 도4



(52) CPC특허분류
H01L 51/0085 (2013.01)
H01L 51/5016 (2013.01)
H05B 33/14 (2013.01)
C09K 2211/1007 (2013.01)
C09K 2211/1029 (2013.01)
C09K 2211/1044 (2013.01)
C09K 2211/185 (2013.01)
(72) 발명자
콩 레이몬드 씨
미국 08536 뉴저지주 플레인스보로 버 코트 1
알레인 버트
미국 08618 뉴저지주 유잉 마스터슨 코트 543

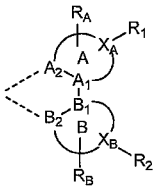
명 세 서

청구범위

청구항 1

원자량이 40을 초과하는 금속에 배위된, 하기 구조를 갖는 리간드를 포함하는 화합물:

화학식 I



상기 화학식에서,

A 및 B는 독립적으로 5원 또는 6원 방향족 또는 헤테로 방향족 고리를 나타낼 수 있고;

A_1, A_2, B_1 및 B_2는 독립적으로 C 또는 N이며;

R_A 및 R_B는 일, 이 또는 삼 치환기를 나타낼 수 있고;

X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 헤테로 원자이며;

R_A, R_B, R_1 및 R_2는 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택되고;

R_A, R_B, R_1 및 R_2 중 1 이상은 CD, CD_2 또는 CD_3을 포함하며;

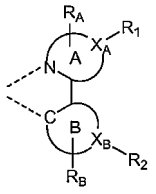
R_A, R_B, R_1 및 R_2는 연결될 수 있고;

R_A, R_B, R_1 및 R_2는 융합될 수 있다.

청구항 2

제1항에 있어서, 리간드는 하기 구조를 갖는 것인 화합물:

화학식 Ia



.

청구항 3

제2항에 있어서, R_A, R_B, R_1 및 R_2 중 1 이상은 CD_3을 포함하는 것인 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서, R_A 및 R_B 중 1 이상의 치환기는 고리 A, 고리 B, 또는 고리 A 또는 고리 B에 공액 또는 융합된 고리에 직접 부착된 CD_3인 것인 화합물.

청구항 5

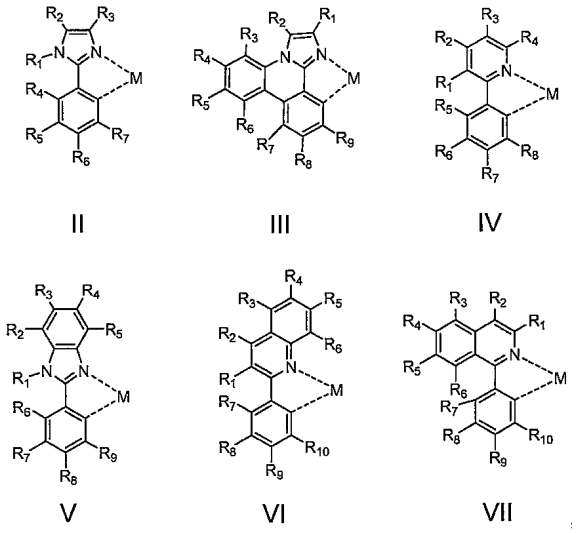
제1항에 있어서, X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 N이고, X_A가 N일 경우, R_1은 아릴인 것인 화합물.

청구항 6

제1항에 있어서, X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 N이고, X_A가 N일 경우, R_1은 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택되는 기로 추가로 치환된 페닐이며, 상기 기는 CD, CD_2 또는 CD_3 중 1 이상을 포함하는 것인 화합물.

청구항 7

제1항에 있어서, 리간드는 하기로 구성된 군에서 선택되는 것인 화합물:



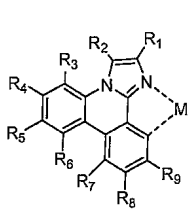
상기 화학식들에서,

R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10}은 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택되고;

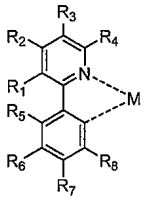
R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10} 중 1 이상은 CD_3을 포함한다.

청구항 8

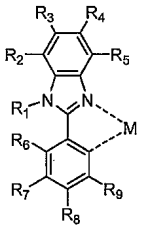
제1항에 있어서, 리간드는 하기로 구성된 군에서 선택되는 것인 화합물:



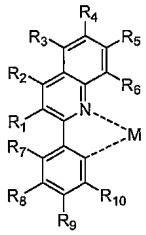
III



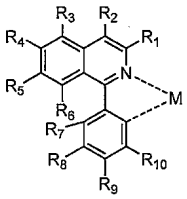
IV



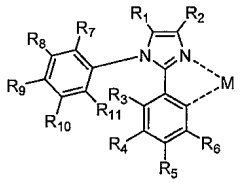
V



VI



VII



VIII

상기 화학식들에서,

R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11}은 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택되고;

R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11}은 연결될 수 있고;

R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11}은 융합될 수 있으며;

R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11} 중 1 이상은 CD, CD_2 또는 CD_3을 포함하는 알킬기를 포함한다.

청구항 9

제1항에 있어서, A는 이미다졸, 피라졸, 트리아졸, 옥사졸, 옥사디아졸, 피리딘, 피리다진, 피리미딘, 피라진 및 트리아진으로 구성된 군에서 선택되는 것인 화합물.

청구항 10

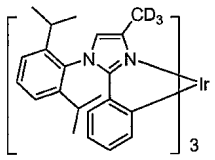
제1항에 있어서, B는 벤젠, 피리딘, 푸란, 피롤 및 티오펜으로 구성된 군에서 선택되는 것인 화합물.

청구항 11

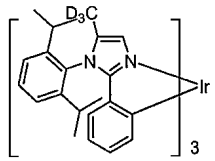
제1항에 있어서, 금속은 Ir인 것인 화합물.

청구항 12

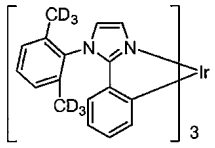
제1항에 있어서, 하기로 구성된 군에서 선택되는 것인 화합물:



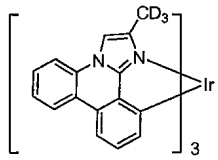
화합물 2



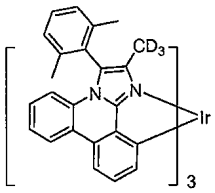
화합물 3



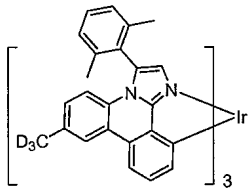
화합물 4



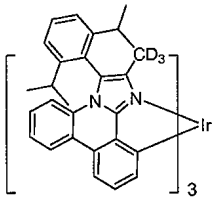
화합물 5



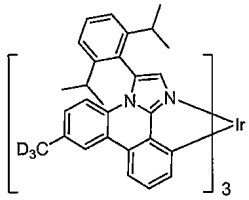
화합물 6



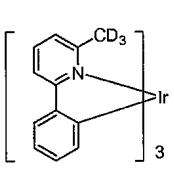
화합물 7



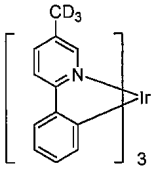
화합물8



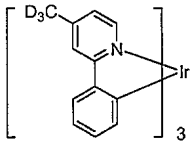
화합물 9



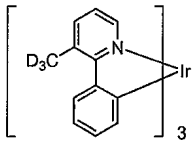
화합물 10



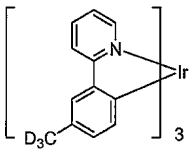
화합물 11



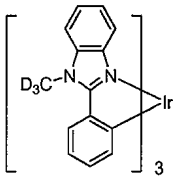
화합물 12



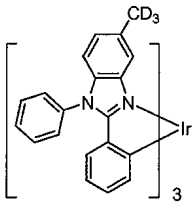
화합물 13



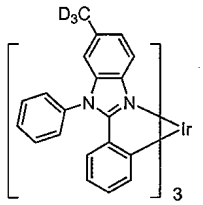
화합물 14



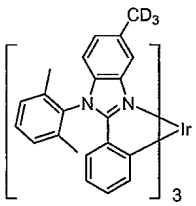
화합물 15



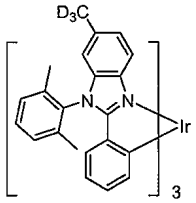
화합물 16



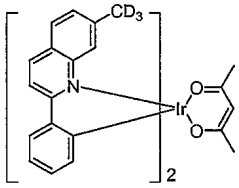
화합물 17



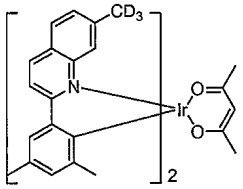
화합물 18



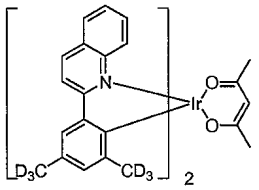
화합물 19



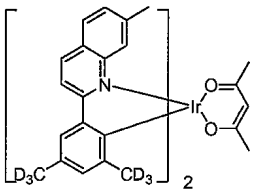
화합물 20



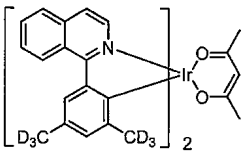
화합물 21



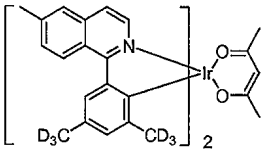
화합물 22



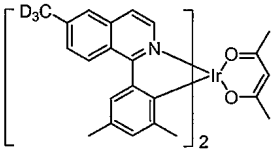
화합물 23



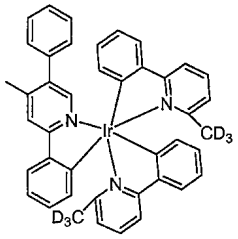
화합물 24



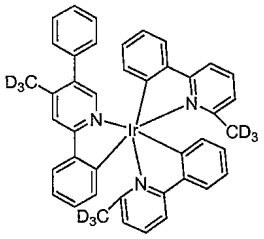
화합물 25



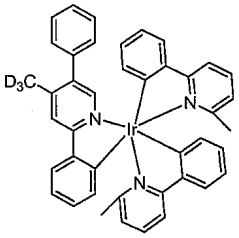
화합물 26



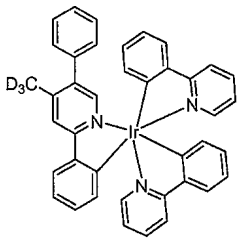
화합물 27



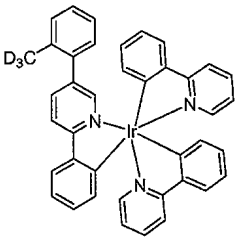
화합물 28



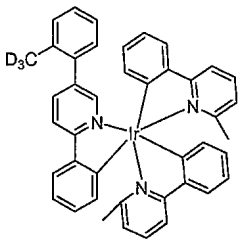
화합물 29



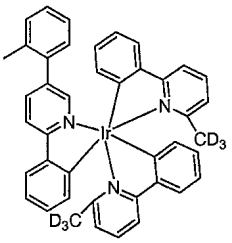
화합물 30



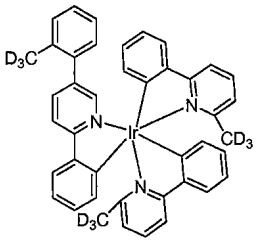
화합물 31



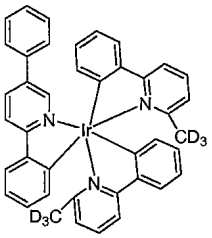
화합물 32



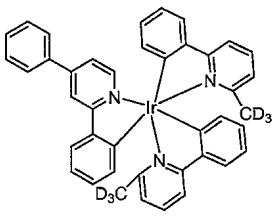
화합물 33



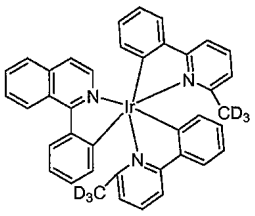
화합물 34



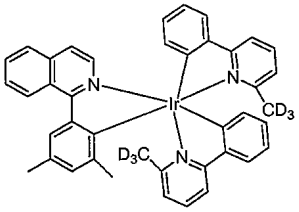
화합물 35



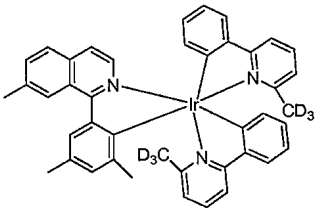
화합물 36



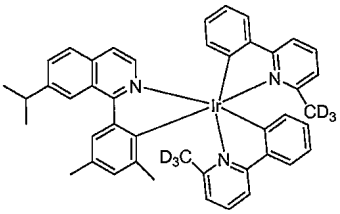
화합물 37



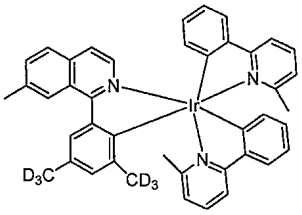
화합물 38



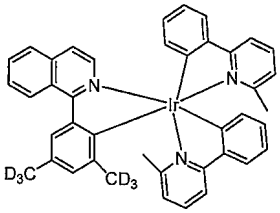
화합물 39



화합물 40



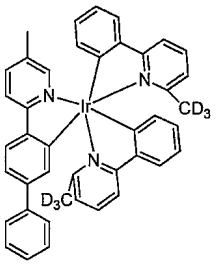
화합물 41



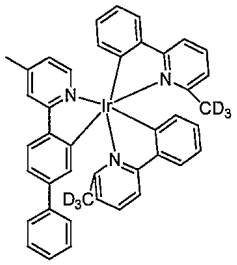
화합물 42

청구항 13

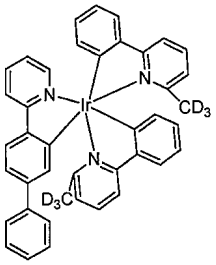
제1항에 있어서, 하기로 구성된 군에서 선택되는 것인 화합물:



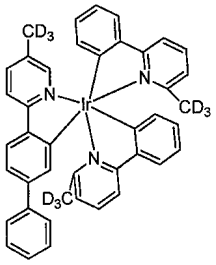
화합물 43



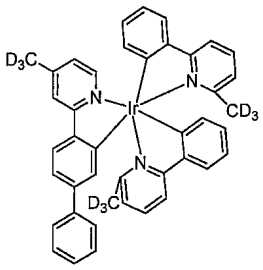
화합물 44



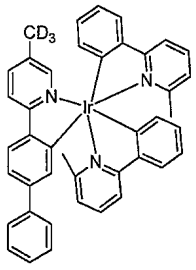
화합물 45



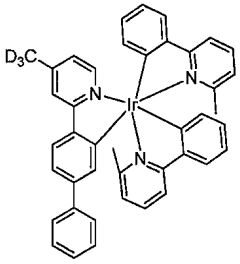
화합물 46



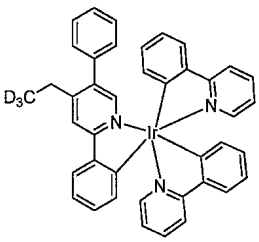
화합물 47



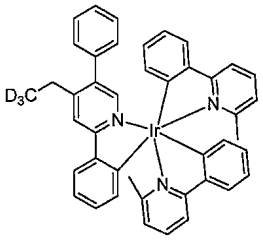
화합물 48



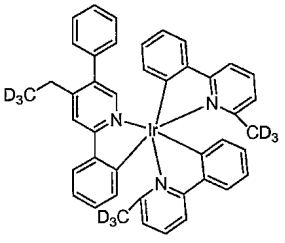
화합물 49



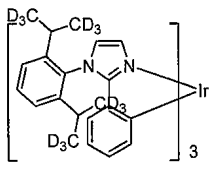
화합물 50



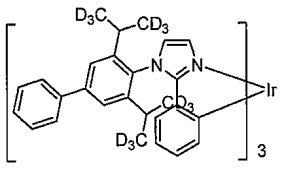
화합물 51



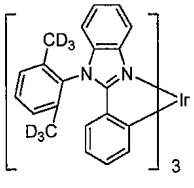
화합물 52



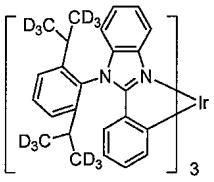
화합물 53



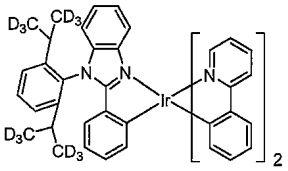
화합물 54



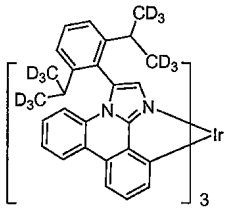
화합물 55



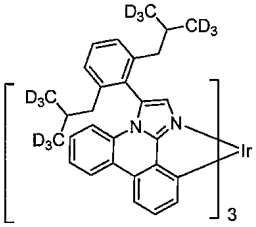
화합물 56



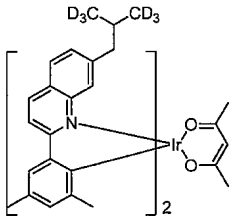
화합물 57



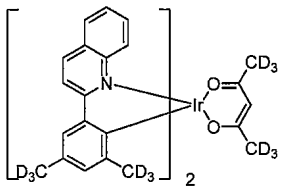
화합물 58



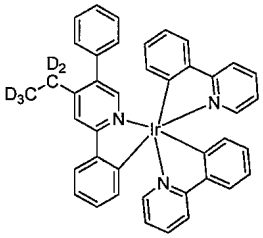
화합물 59



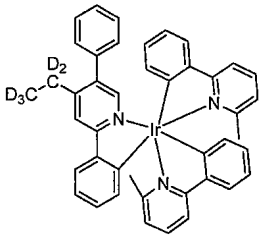
화합물 60



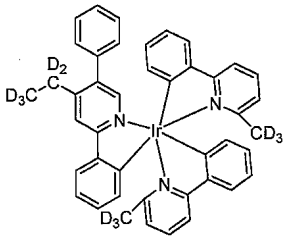
화합물 61



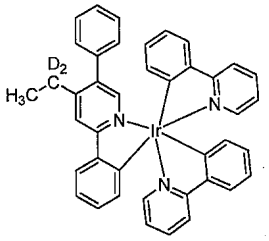
화합물 62



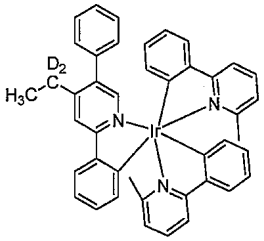
화합물 63



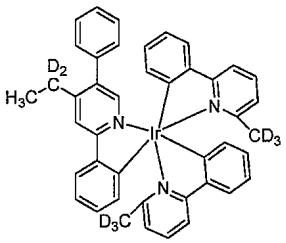
화합물 64



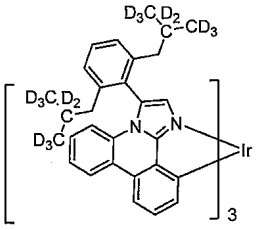
화합물 65



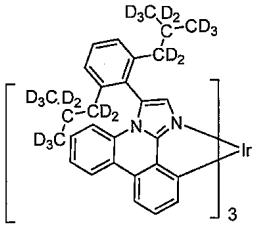
화합물 66



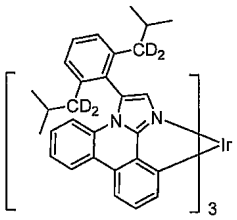
화합물 67



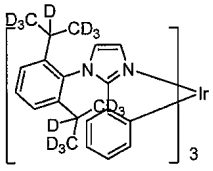
화합물 68



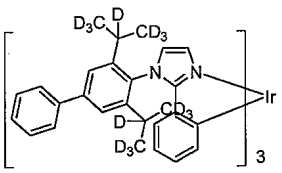
화합물 69



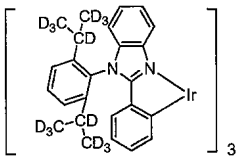
화합물 70



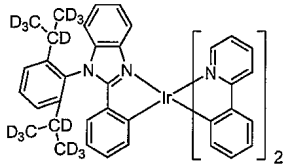
화합물 71



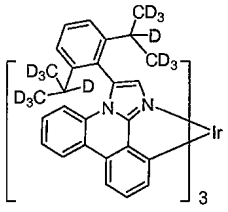
화합물 72



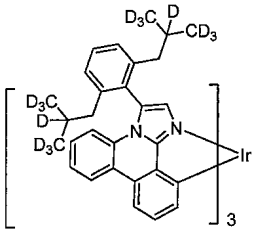
화합물 73



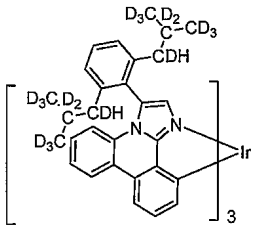
화합물 74



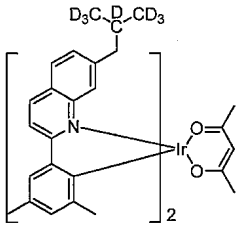
화합물 75



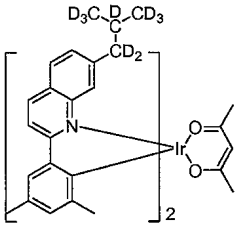
화합물 76



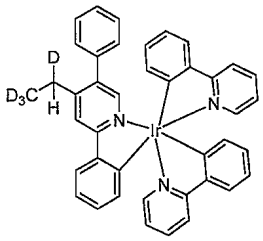
화합물 77



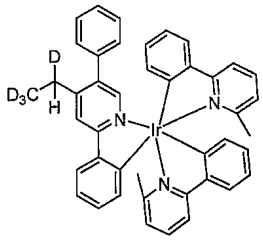
화합물 78



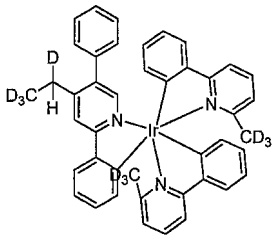
화합물 79



화합물 80



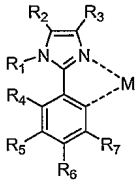
화합물 81



화합물 82

청구항 14

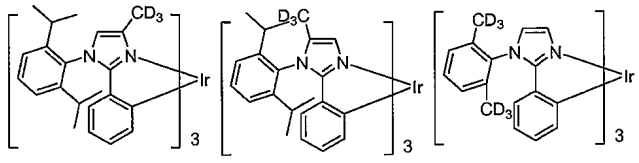
제1항에 있어서, 하기 화학식을 갖는 것인 화합물:



II

청구항 15

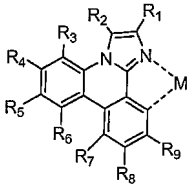
제14항에 있어서, 하기로 구성된 군에서 선택되는 것인 화합물:



화합물 2 화합물 3 화합물 4

청구항 16

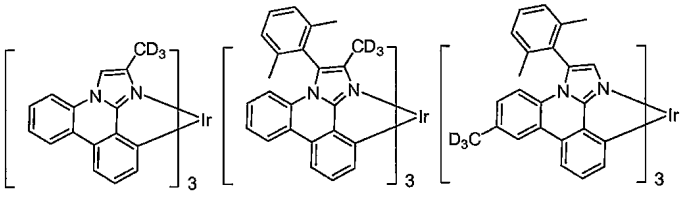
제1항에 있어서, 하기 화학식을 갖는 것인 화합물:



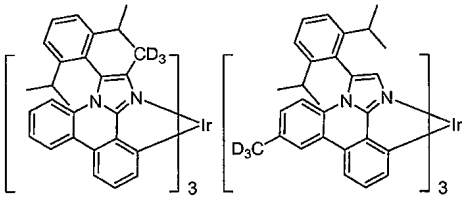
III

청구항 17

제16항에 있어서, 하기로 구성된 군에서 선택되는 것인 화합물:



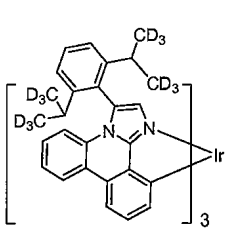
화합물 5 화합물 6 화합물 7



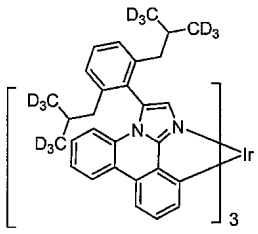
화합물 8 화합물 9

청구항 18

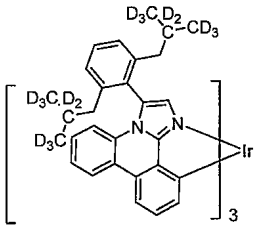
제16항에 있어서, 하기로 구성된 군에서 선택되는 것인 화합물:



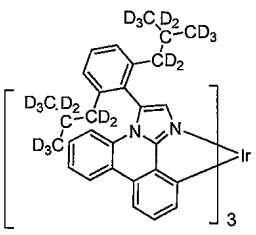
화합물 58



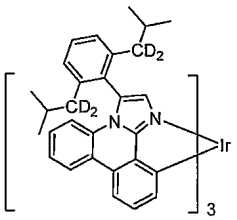
화합물 59



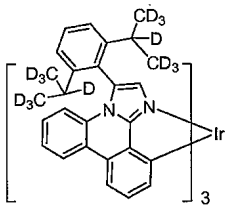
화합물 68



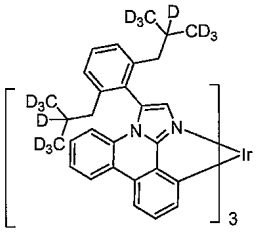
화합물 69



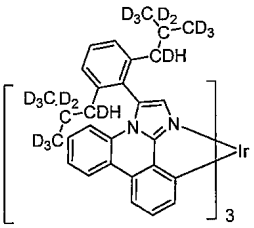
화합물 70



화합물 75



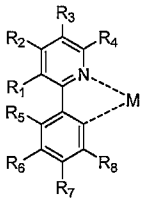
화합물 76



화합물 77

청구항 19

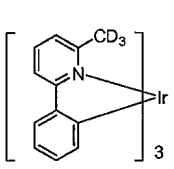
제1항에 있어서, 하기 화학식을 갖는 것인 화합물:



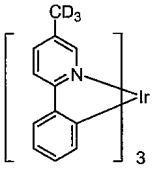
IV

청구항 20

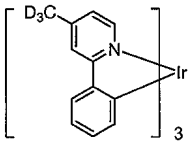
제19항에 있어서, 하기로 구성된 군에서 선택되는 것인 화합물:



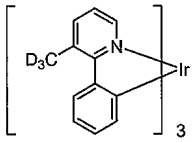
화합물 10



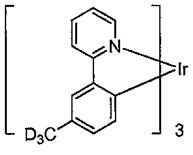
화합물 11



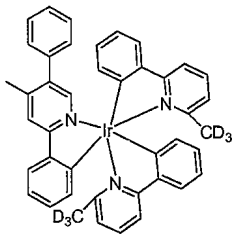
화합물 12



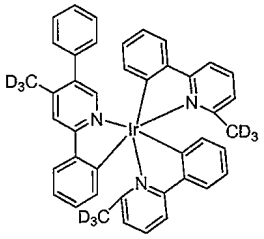
화합물 13



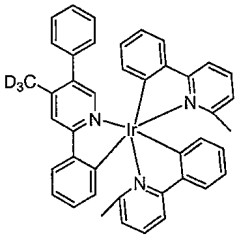
화합물 14



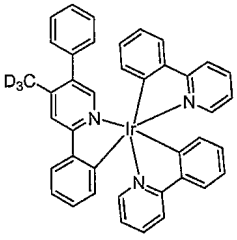
화합물 27



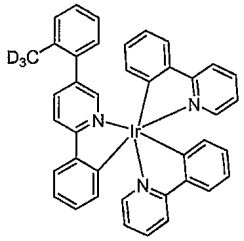
화합물 28



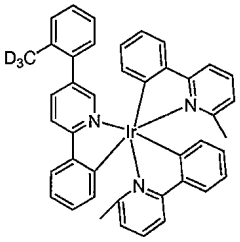
화합물 29



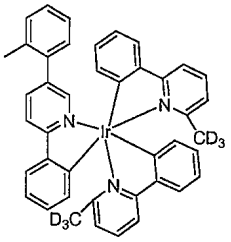
화합물 30



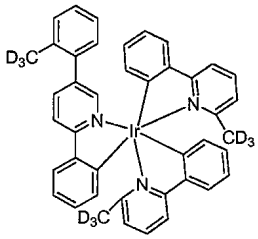
화합물 31



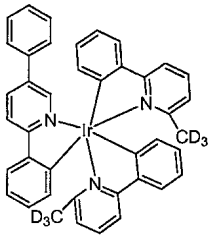
화합물 32



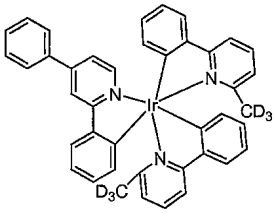
화합물 33



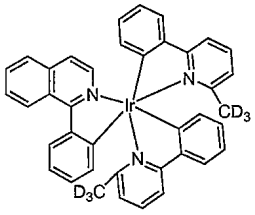
화합물 34



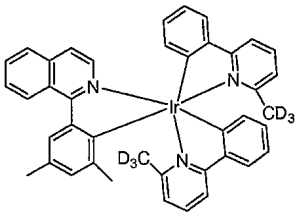
화합물 35



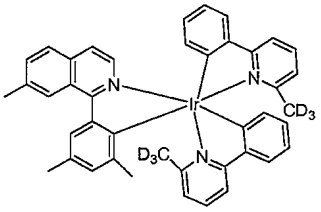
화합물 36



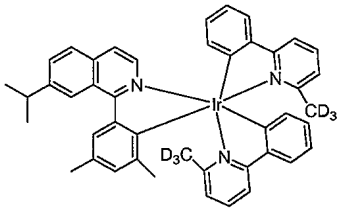
화합물 37



화합물 38



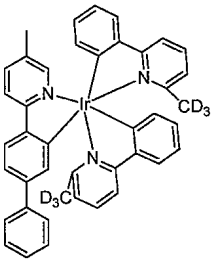
화합물 39



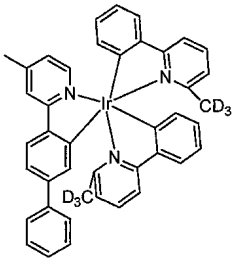
화합물 40

청구항 21

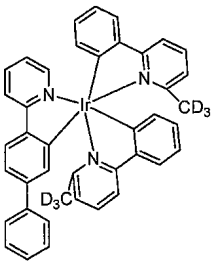
제19항에 있어서, 하기로 구성된 군에서 선택되는 것인 화합물:



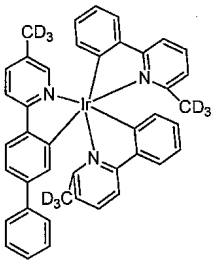
화합물 43



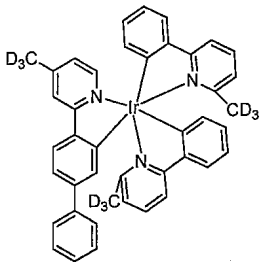
화합물 44



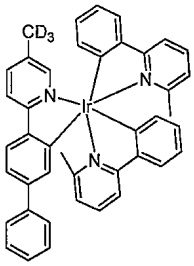
화합물 45



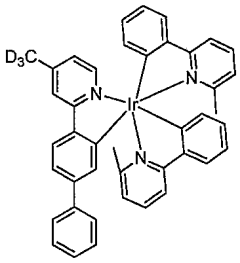
화합물 46



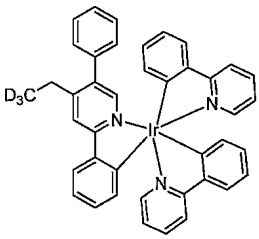
화합물 47



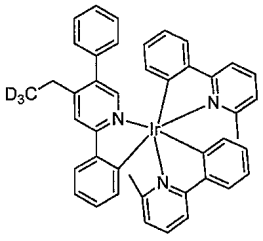
화합물 48



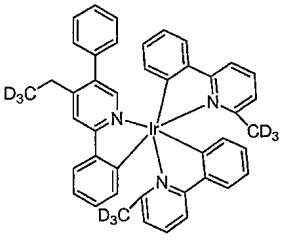
화합물 49



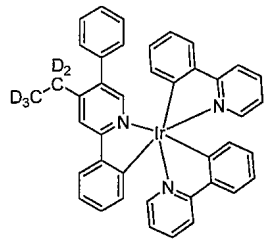
화합물 50



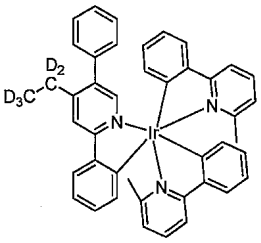
화합물 51



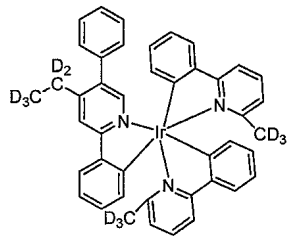
화합물 52



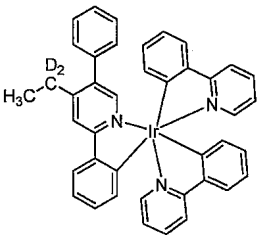
화합물 62



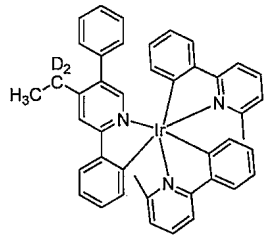
화합물 63



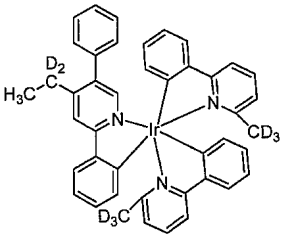
화합물 64



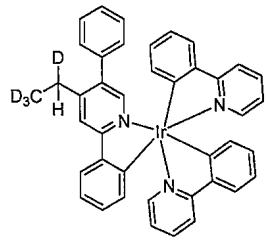
화합물 65



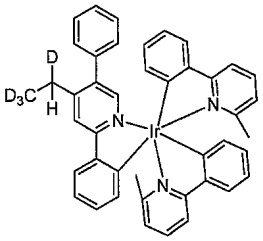
화합물 66



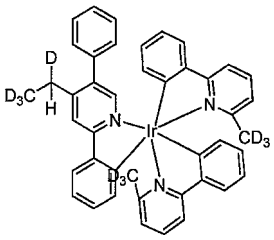
화합물 67



화합물 80



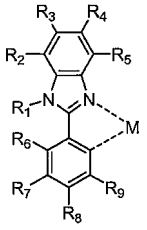
화합물 81



화합물 82

청구항 22

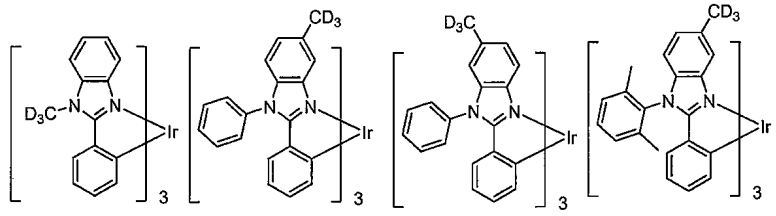
제1항에 있어서, 하기 화학식을 갖는 것인 화합물:



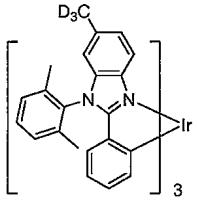
V

청구항 23

제22항에 있어서, 하기로 구성된 군에서 선택되는 것인 화합물:



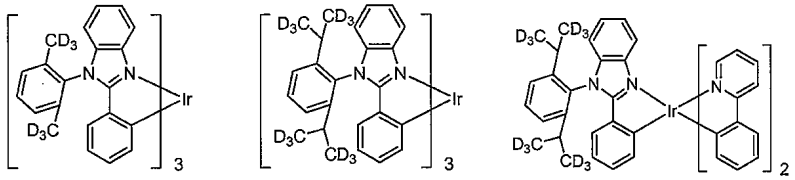
화합물 15 화합물 16 화합물 17 화합물 18



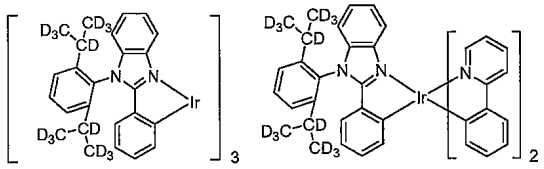
화합물 19

청구항 24

제22항에 있어서, 하기로 구성된 군에서 선택되는 것인 화합물:



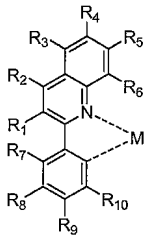
화합물 55 화합물 56 화합물 57



화합물 73 화합물 74

청구항 25

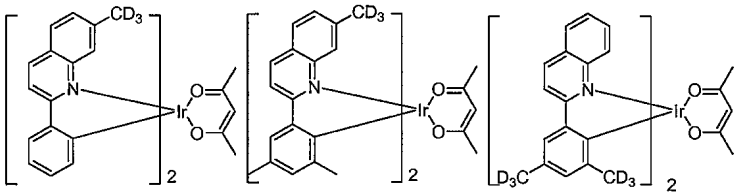
제1항에 있어서, 하기 화학식을 갖는 것인 화합물:



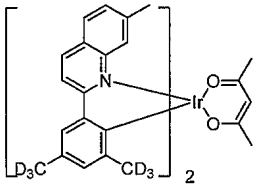
VI

청구항 26

제25항에 있어서, 하기로 구성된 군에서 선택되는 것인 화합물:



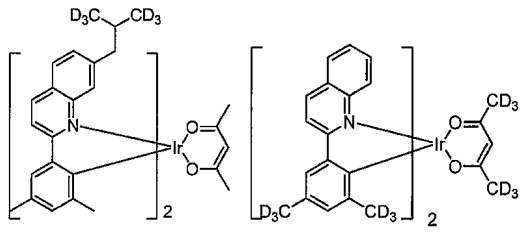
화합물 20 화합물 21 화합물 22



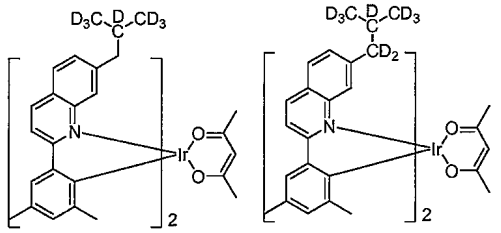
화합물 23

청구항 27

제25항에 있어서, 하기로 구성된 군에서 선택되는 것인 화합물:



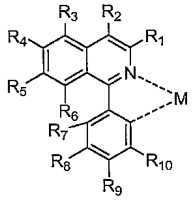
화합물 60 화합물 61



화합물 78 화합물 79

청구항 28

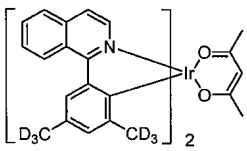
제1항에 있어서, 하기 화학식을 갖는 것인 화합물:



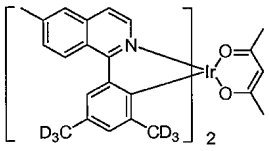
VII

청구항 29

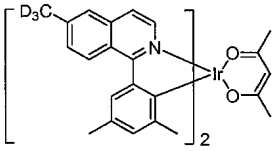
제28항에 있어서, 하기로 구성된 군에서 선택되는 것인 화합물:



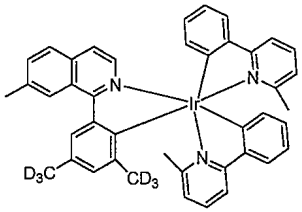
화합물 24



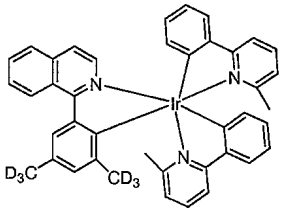
화합물 25



화합물 26



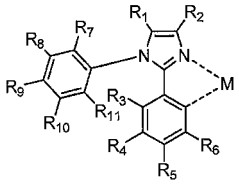
화합물 41



화합물 42

청구항 30

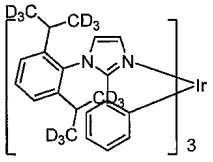
제1항에 있어서, 하기 화학식을 갖는 것인 화합물:



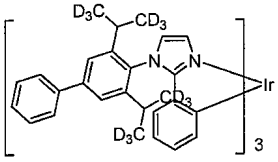
VIII

청구항 31

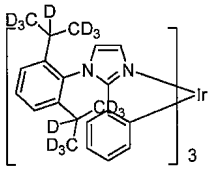
제30항에 있어서, 하기로 구성된 군에서 선택되는 것인 화합물:



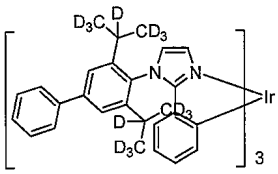
화합물 53



화합물 54



화합물 71



화합물 72

.

청구항 32

제1항에 있어서, 화학식 I을 갖는 리간드는 동종 리간드성(homoleptic) 화합물 내 리간드인 것인 화합물.

청구항 33

제1항에 있어서, 화학식 I을 갖는 리간드는 이종 리간드성(heteroleptic) 화합물 내 리간드인 것인 화합물.

청구항 34

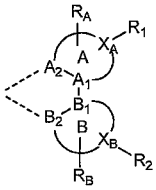
애노드;

캐소드; 및

애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기층

을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기층은 원자량이 40을 초과하는 금속에 배위된, 하기 구조를 갖는 리간드를 추가로 포함하는 화합물을 포함하는 유기 발광 소자:

화학식 I



상기 화학식에서,

A 및 B는 독립적으로 5원 또는 6원 방향족 또는 헤테로 방향족 고리를 나타낼 수 있고;

A_1, A_2, B_1 및 B_2는 독립적으로 C 또는 N이며;

R_A 및 R_B는 일, 이 또는 삼 치환기를 나타낼 수 있고;

X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 헤테로 원자이며;

R_A, R_B, R_1 및 R_2는 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택되고;

R_A, R_B, R_1 및 R_2 중 1 이상은 CD, CD_2 또는 CD_3을 포함하며;

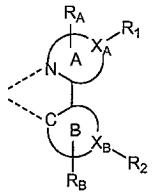
R_A, R_B, R_1 및 R_2는 연결될 수 있고;

R_A, R_B, R_1 및 R_2는 융합될 수 있다.

청구항 35

제34항에 있어서, 리간드는 하기 구조를 갖는 것인 유기 발광 소자:

화학식 Ia



.

청구항 36

제35항에 있어서, R_A, R_B, R_1 및 R_2 중 1 이상은 CD_3인 것인 유기 발광 소자.

청구항 37

제34항에 있어서, R_A 및 R_B 중 1 이상의 치환기는 고리 A, 고리 B, 또는 고리 A 또는 고리 B에 공액 또는 융합된 고리에 직접 부착된 CD_3인 것인 유기 발광 소자.

청구항 38

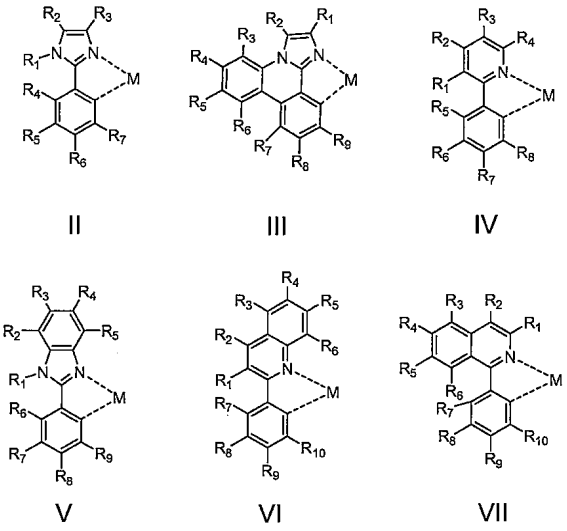
제34항에 있어서, X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 N이고, X_A가 N일 경우, R_1은 아릴인 것인 유기 발광 소자.

청구항 39

제34항에 있어서, X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 N이고, X_A가 N일 경우, R_1은 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택되는 기로 추가로 치환된 페닐이며, 상기 기는 CD, CD_2 또는 CD_3 중 1 이상을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

청구항 40

제34항에 있어서, 리간드는 하기로 구성된 군에서 선택되는 것인 유기 발광 소자:



상기 화학식들에서,

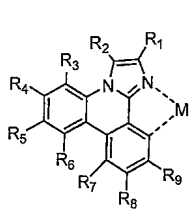
R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10}은 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬,

아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택되고;

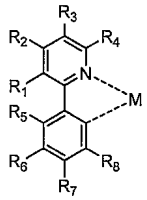
R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10} 중 1 이상은 CD_3을 포함한다.

청구항 41

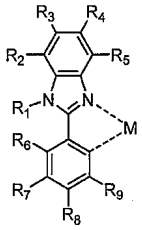
제34항에 있어서, 리간드는 하기로 구성된 군에서 선택되는 것인 유기 발광 소자:



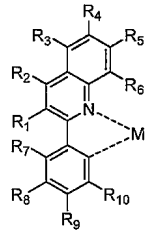
III



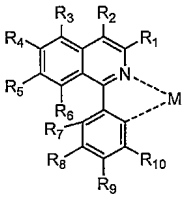
IV



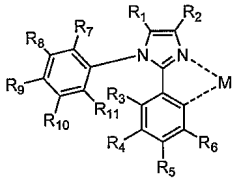
V



VI



VII



VIII

상기 화학식들에서,

R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11}은 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택되고;

R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11}은 연결될 수 있고;

R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11}은 융합될 수 있으며;

R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11} 중 1 이상 CD, CD_2 또는 CD_3을 포함하는 알킬기를 포함한다.

청구항 42

제34항에 있어서, A는 이미다졸, 피라졸, 트리아졸, 옥사졸, 옥사디아졸, 피리딘, 피리다진, 피리미딘, 피라진 및 트리아진으로 구성된 군에서 선택되는 것인 유기 발광 소자.

청구항 43

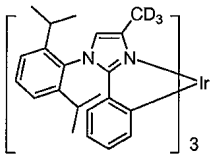
제34항에 있어서, B는 벤젠, 피리딘, 푸란, 피롤 및 티오펜으로 구성된 군에서 선택되는 것인 유기 발광 소자.

청구항 44

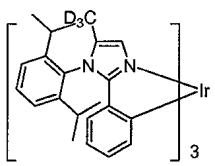
제34항에 있어서, 금속은 Ir인 것인 유기 발광 소자.

청구항 45

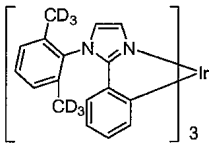
제34항에 있어서, 화합물은 하기로 구성된 군에서 선택되는 것인 유기 발광 소자:



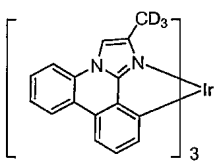
화합물 2



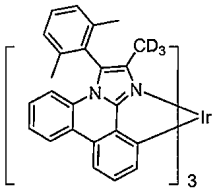
화합물 3



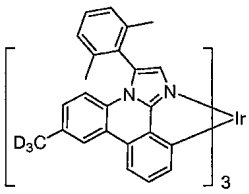
화합물 4



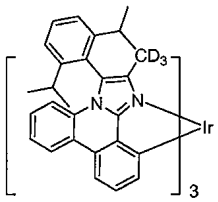
화합물 5



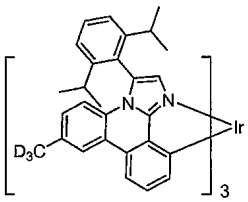
화합물 6



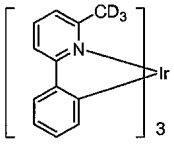
화합물 7



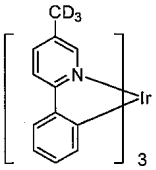
화합물 8



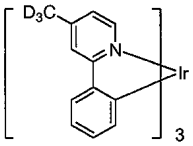
화합물 9



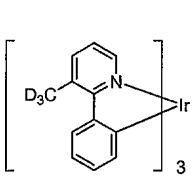
화합물 10



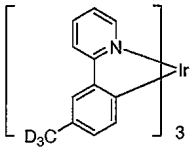
화합물 11



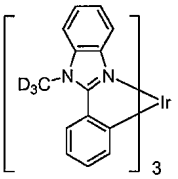
화합물 12



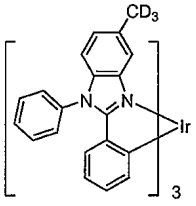
화합물 13



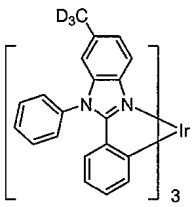
화합물 14



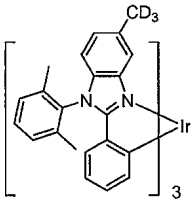
화합물 15



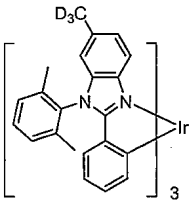
화합물 16



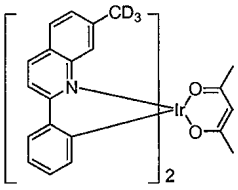
화합물 17



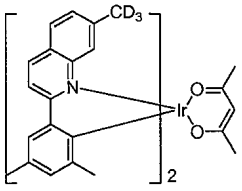
화합물 18



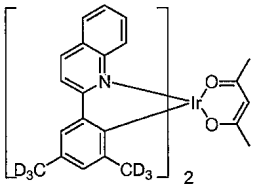
화합물 19



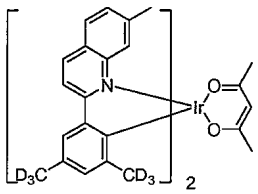
화합물 20



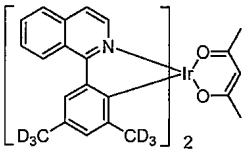
화합물 21



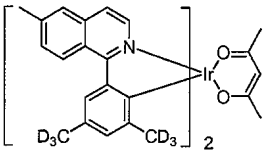
화합물 22



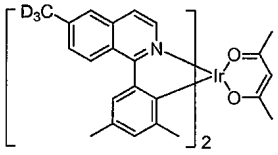
화합물 23



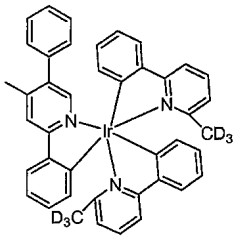
화합물 24



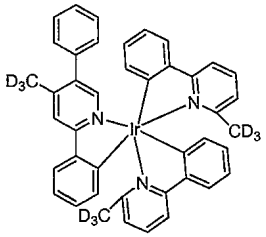
화합물 25



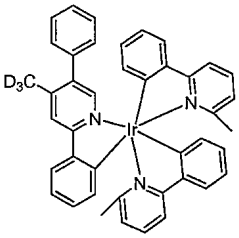
화합물 26



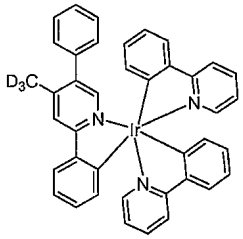
화합물 27



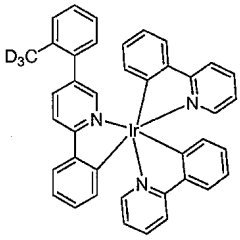
화합물 28



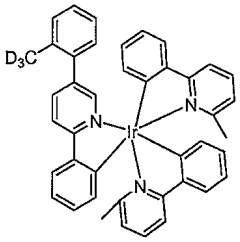
화합물 29



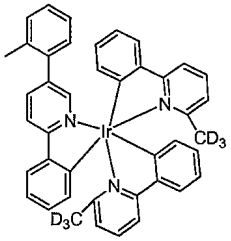
화합물 30



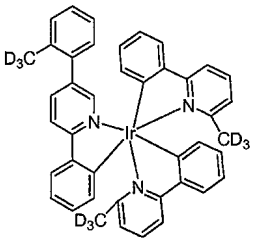
화합물 31



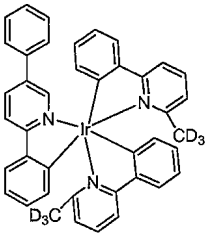
화합물 32



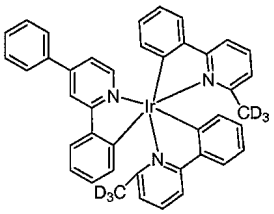
화합물 33



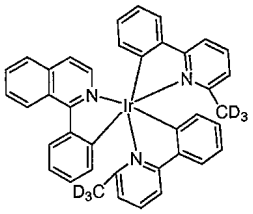
화합물 34



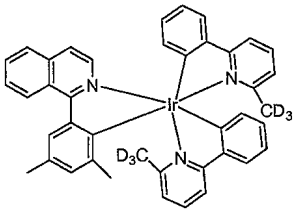
화합물 35



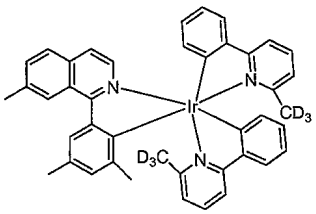
화합물 36



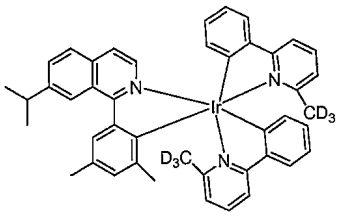
화합물 37



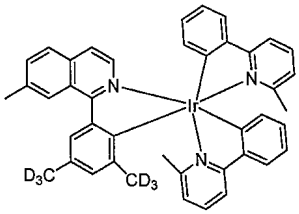
화합물 38



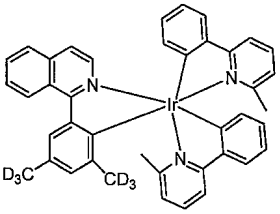
화합물 37



화합물 40



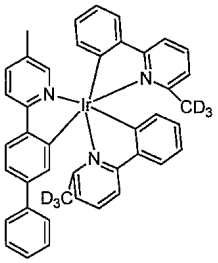
화합물 41



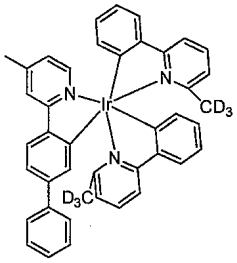
화합물 42

청구항 46

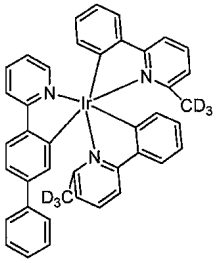
제34항에 있어서, 화합물은 하기로 구성된 군에서 선택되는 것인 유기 발광 소자:



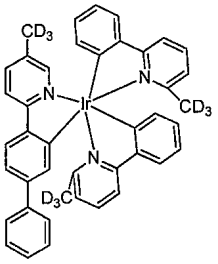
화합물 43



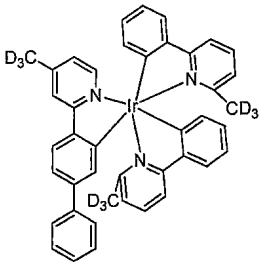
화합물 44



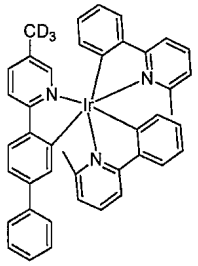
화합물 45



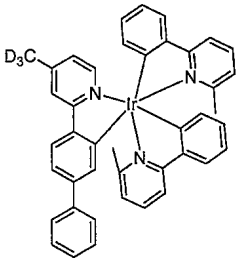
화합물 46



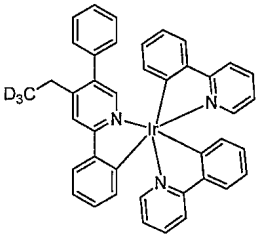
화합물 47



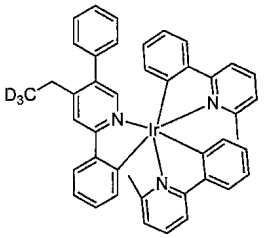
화합물 48



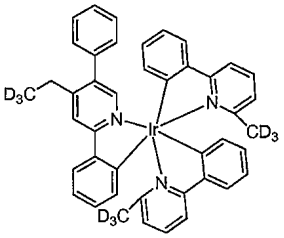
화합물 49



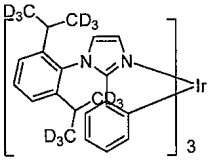
화합물 50



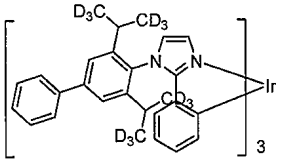
화합물 51



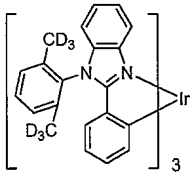
화합물 52



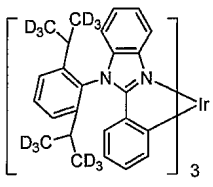
화합물 53



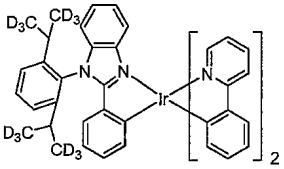
화합물 54



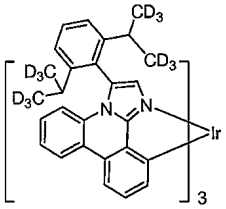
화합물 55



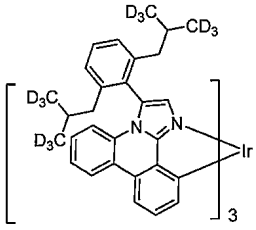
화합물 56



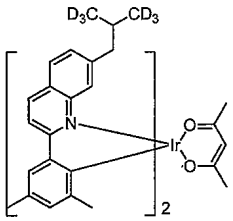
화합물 57



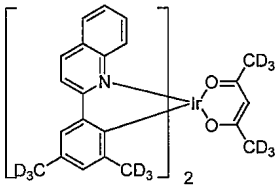
화합물 58



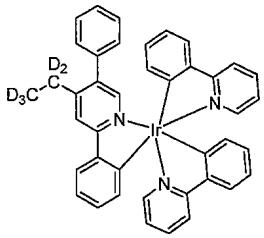
화합물 59



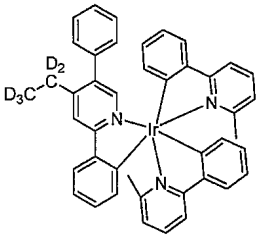
화합물 60



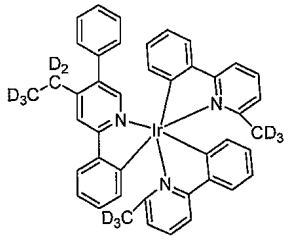
화합물 61



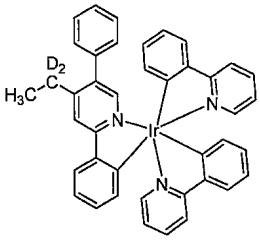
화합물 62



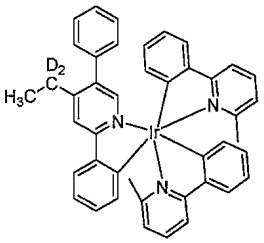
화합물 63



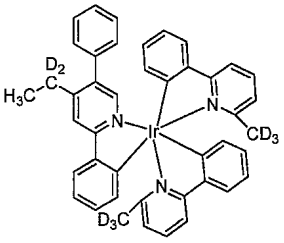
화합물 64



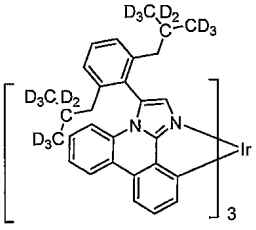
화합물 65



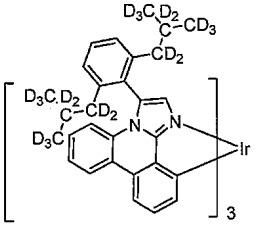
화합물 66



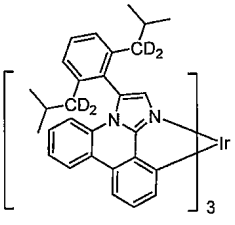
화합물 67



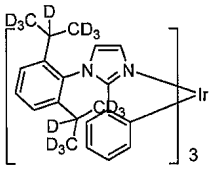
화합물 68



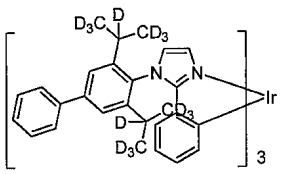
화합물 69



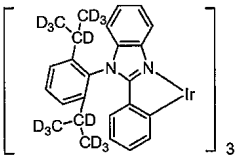
화합물 70



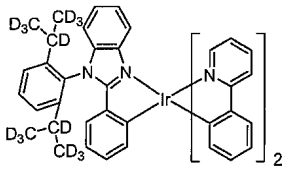
화합물 71



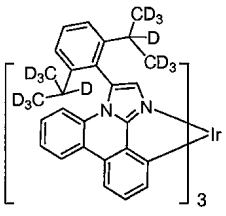
화합물 72



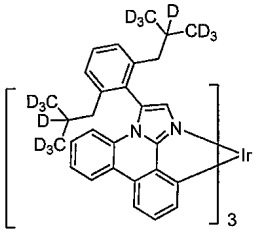
화합물 73



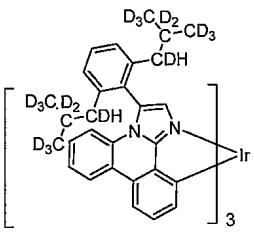
화합물 74



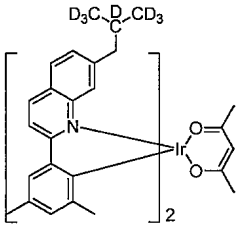
화합물 75



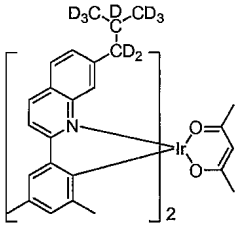
화합물 76



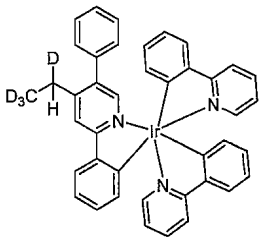
화합물 77



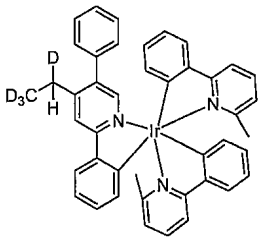
화합물 78



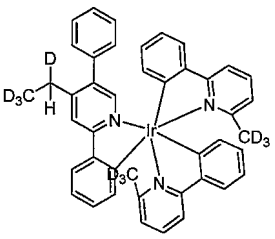
화합물 79



화합물 80



화합물 81



화합물 82

청구항 47

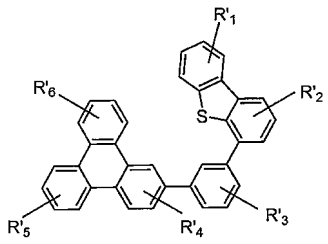
제34항에 있어서, 유기층은 발광층이고, 화합물은 발광 도펀트인 것인 유기 발광 소자.

청구항 48

제47항에 있어서, 유기층은 호스트를 추가로 포함하는 것인 유기 발광 소자.

청구항 49

제48항에 있어서, 호스트는 하기 화학식을 갖는 것인 유기 발광 소자:



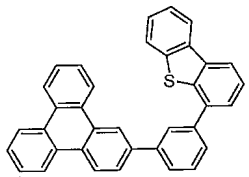
상기 화학식에서,

R'_1, R'_2, R'_3, R'_4, R'_5 및 R'_6은 일, 이, 삼 또는 사 치환기를 나타낼 수 있고;

R'_1, R'_2, R'_3, R'_4, R'_5 및 R'_6 각각은 독립적으로 수소, 알킬 및 아릴로 구성된 군에서 선택된다.

청구항 50

제48항에 있어서, 호스트는 하기 화학식의 것인 유기 발광 소자:



H1

.

청구항 51

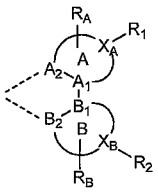
애노드;

캐소드; 및

애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기층

을 추가로 포함하는 소자를 포함하는 소비자 제품(consumer product)으로서, 상기 유기층은 원자량이 40을 초과하는 금속에 배위된, 하기 구조를 갖는 리간드를 추가로 포함하는 화합물을 포함하는 소비자 제품:

화학식 I



상기 화학식에서,

A 및 B는 독립적으로 5원 또는 6원 방향족 또는 헤테로 방향족 고리를 나타낼 수 있고;

A_1, A_2, B_1 및 B_2는 독립적으로 C 또는 N이며;

R_A 및 R_B는 일, 이 또는 삼 치환기를 나타낼 수 있고;

X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 헤테로 원자이며;

R_A, R_B, R_1 및 R_2는 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구

성된 군에서 선택되고;

R_A, R_B, R_1 및 R_2 중 1 이상은 CD, CD_2 또는 CD_3을 포함하며;

R_A, R_B, R_1 및 R_2는 연결될 수 있고;

R_A, R_B, R_1 및 R_2는 융합될 수 있다.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본 출원은 본 명세서에서 그 개시 내용을 그 전체로 명시적으로 참고로 인용하는, 2009년 4월 28일 출원된 미국 가출원 제61/173,346호 및 2010년 4월 27일 출원된 미국 가출원 제12/768,068호의 우선권 주장을 청구한다.

[0002] 청구된 본 발명은 대학-법인 공동 연구 협정에 대해 하기 당사사 중 1 이상에 의해, 이를 대신하여 및/또는 이와 관련하여 수행되었다: 리전츠 오브 더 유니버시티 오브 미시건, 프린스턴 유니버시티, 더 유니버시티 오브 써던 캘리포니아 및 더 유니버설 디스플레이 코포레이션. 본 발명이 수행되고 협정의 범위 내에서 착수된 활동의 결과로 본 발명이 이루어진 일자 당일 및 그 이전에 이 협정은 발효되었다.

[0003] **발명의 분야**

[0004] 본 발명은 유기 발광 소자에 유리하게 사용될 수 있는 신규한 유기 화합물에 관한 것이다. 더욱 특히, 본 발명은 신규한 메틸-d_3 치환된 이리듐 착체 및 이의 OLED에서의 용도에 관한 것이다.

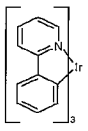
배 경 기 술

[0005] 유기 재료를 사용하는 광전자 소자가 다수의 이유로 점점 요망되고 있다. 이러한 소자의 제조에 사용되는 재료의 다수는 비교적 저렴하여, 유기 광전자 소자는 무기 소자에 대한 비용적 이점에 대한 잠재성이 있다. 또한, 가요성과 같은 유기 재료 고유의 특성으로 인해 이는 플렉서블 기판 상에서의 제작과 같은 특정 용도에 잘 맞는다. 유기 광전자 소자의 예는 유기 발광 소자(OLED), 유기 포토트랜지스터, 유기 광전지 및 유기 광 검출기를 포함한다. OLED에 있어서, 유기 재료는 종래의 재료에 비해 성능 이점을 가질 수 있다. 예컨대, 유기 발광층이 발광하는 파장은 일반적으로 적절한 도펀트를 사용하여 조정될 수 있다.

[0006] OLED는 전압이 소자를 가로질러 인가될 때 발광하는 유기 박막을 사용한다. OLED는 평판 디스플레이, 조명 및 역광 조명과 같은 용도에서 사용하기 위한 점점 인기 있는 기술이 되고 있다. 몇 가지 OLED 재료 및 구성이 본 명세서에서 그 전체를 참고로 인용하는 미국 특허 제5,844,363호, 제6,303,238호 및 제5,707,745호에 기재되어 있다.

[0007] 인광성 발광 분자에 대한 하나의 용도는 풀컬러 디스플레이이다. 이러한 디스플레이에 대한 산업 표준은 "포화" 컬러로 지칭되는 특정 컬러를 방출하도록 된 픽셀을 요구한다. 특히, 이들 표준은 포화 적색, 녹색 및 청색 픽셀을 요구한다. 당업계에 잘 알려진 CIE 좌표를 이용하여 컬러를 측정할 수 있다.

[0008] 녹색 발광 분자의 일례는 하기 구조를 가지며 $Ir(ppy)_3$으로 지칭되는 트리스(2-페닐피리딘)이리듐이다:

[0009] 

[0010] 여기에서 그리고 본 명세서의 나중 도면에서, 본 발명자들은 질소로부터 금속(여기서는 Ir)으로의 배위 결합을 직선으로 표시한다.

[0011] 본 명세서에서 사용되는 바의 용어 "유기"는 유기 광전자 소자를 제작하는 데에 이용될 수 있는 중합체 재료뿐 아니라 소분자 유기 재료를 포함한다. "소분자"는 중합체가 아닌 임의의 유기 재료를 지칭하며, "소분자"는 실제로는 꽤 클 수 있다. 소분자는 일부 환경에서는 반복 단위를 포함할 수 있다. 예컨대, 치환기로서 장쇄 알킬기를 사용한다고 해서 "소분자" 부류로부터 분자를 제거하지는 않는다. 소분자는 또한 예컨대 중합체 주쇄 상의 현수 기로서 또는 주쇄의 일부로서 중합체에 삽입될 수 있다. 소분자는 또한 코어 부분에 확립된 일련의 화학적

쉘로 구성된 덴드리머의 코어 부분으로서 작용할 수 있다. 덴드리머의 코어 부분은 형광성 또는 인광성 소분자 에미터일 수 있다. 덴드리머는 "소분자"일 수 있으며, OLED의 분야에 현재 사용되는 모든 덴드리머가 소분자라고 여겨진다.

[0012] 본 명세서에서 사용되는 바의 "최상부"는 기판으로부터 가장 멀리 떨어짐을 의미하고, "바닥"은 기판에서 가장 가까움을 의미한다. 제1 층이 제2 층 "위에 배치된다"고 기재되는 경우, 제1 층은 기판으로부터 가장 멀리 배치된다. 제1 층이 제2 층"과 접촉되어 있다"고 명시되지 않으면, 제1 층과 제2 층 사이에는 다른 층이 존재할 수 있다. 예컨대, 그 사이에 다양한 유기층이 존재하더라도, 캐소드가 애노드 "위에 배치되어 있다"고 기재될 수 있다.

[0013] 본 명세서에서 사용되는 바의 "용액 가공성(solution processible)"은 용액 또는 현탁액 형태의 액상 매질에 용해되거나, 분산되거나 또는 수송되고 및/또는 이로부터 증착될 수 있음을 의미한다.

[0014] 리간드가 발광 재료의 광활성 특성에 직접 기여한다고 여겨질 경우, 리간드는 "광활성"으로 지칭할 수 있다. 보조(ancillary) 리간드가 광활성 리간드의 특성을 변경할 수는 있지만, 리간드가 발광 재료의 광활성 특성에 기여하지 않는 것으로 여겨질 경우, 리간드를 "보조적"이라고 지칭할 수 있다.

[0015] 본 명세서에서 사용되고 당업자가 일반적으로 이해하는 바와 같이, 제1 에너지 수준이 진공 에너지 수준에 더 가까운 경우, 제1의 "최고 점유 분자 궤도 함수"(HOMO) 또는 "최저 비점유 분자 궤도 함수"(LUMO) 에너지 수준은 제2 HOMO 또는 LUMO 에너지 수준보다 "더 크거나" 또는 "더 높다". 이온화 전위(IP)는 진공 수준에 대한 음의 에너지로서 측정되기 때문에, 더 높은 HOMO 에너지 수준은 더 작은 절대치를 갖는 IP에 상당한다(덜 음인 IP). 유사하게, 더 높은 LUMO 에너지 수준은 더 작은 절대치를 갖는 전자 친화도(EA)에 상당한다(덜 음인 EA). 최상부에 진공 수준을 갖는 통상적인 에너지 수준 도형에서, 재료의 LUMO 에너지 수준은 동일한 재료의 HOMO 에너지 수준보다 높다. "더 높은" HOMO 또는 LUMO 에너지 수준은 "더 낮은" HOMO 또는 LUMO 에너지 수준보다 이러한 도형의 최상부에 가까운 것으로 보인다.

[0016] 본 명세서에서 사용되고 일반적으로 당업자가 이해하는 바와 같이, 제1 일함수가 더 높은 절대치를 가질 경우, 제1 일함수는 제2 일함수보다 "더 크거나" 또는 "더 높다". 일함수는 일반적으로 진공 수준에 대한 음의 수치로서 측정되며, 이는 "더 높은" 일함수는 더 음의 값임을 의미한다. 최상부에 진공 수준을 갖는 통상적인 에너지 수준 도형에서, "더 높은" 일함수는 하향 방향으로 진공 수준에서 더 떨어져 있는 것으로 도시된다. 따라서, HOMO 및 LUMO 에너지 수준의 정의는 일함수보다는 상이한 방식에 따른다.

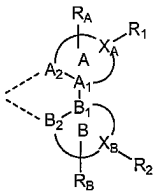
[0017] OLED에 대한 더 많은 상세 및 상기 기재된 정의는 본 명세서에서 그 전체를 참고로 인용하는 미국 특허 제7,279,704호에서 찾을 수 있다.

발명의 내용

과제의 해결 수단

[0018] 본 발명의 리간드를 포함하는 화합물은 하기 구조를 갖는다:

[0019] 화학식 I

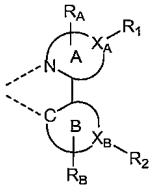
[0020] 

[0021] 상기 화학식에서, A 및 B는 독립적으로 5원 또는 6원 방향족 또는 헤테로 방향족 고리를 나타낼 수 있다. 바람직하게는, A는 이미다졸, 피라졸, 트리아졸, 옥사졸, 옥사디아졸, 피리딘, 피리다진, 피리미딘, 피라진 및 트리아진으로 구성된 군에서 선택된다. 바람직하게는, B는 벤젠, 피리딘, 푸란, 피롤 및 티오펜으로 구성된 군에서 선택된다. A_1, A_2, B_1 및 B_2는 독립적으로 C 또는 N이다. R_A 및 R_B는 일치환기, 이치환기 또는 삼치환기를 나타낼 수 있다. X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 헤테로 원자이다. R_A, R_B, R_1 및 R_2는 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택된다. R_A, R_B, R_1 및 R_2 중 1 이상은

CD, CD_2 또는 CD_3을 포함한다. 바람직하게는, R_A, R_B, R_1 및 R_2 중 1 이상은 CD_3을 포함한다. R_A, R_B, R_1 및 R_2는 연결될 수 있다. R_A, R_B, R_1 및 R_2는 융합될 수 있다. 리간드는 원자량이 40을 초과하는 금속에 배위된다. 바람직하게는, 금속은 Ir이다.

[0022] 일측면에서, 리간드는 하기 구조를 갖는다:

[0023] 화학식 Ia

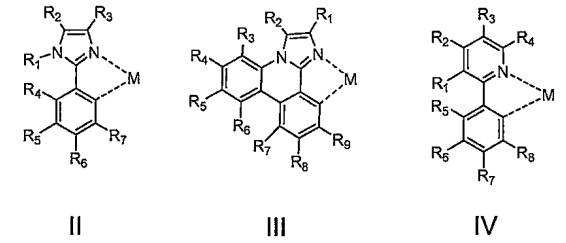


[0024]

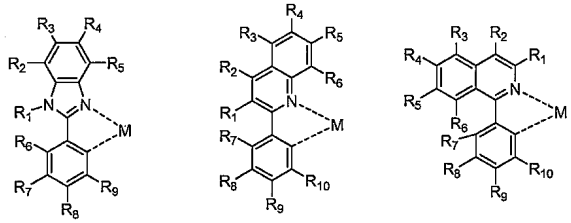
[0025] 일측면에서, X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 N이고, X_A가 N일 경우, R_1은 아릴이다. 다른 측면에서, X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 N이고, X_A가 N일 경우, R_1은 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택되는 기로 추가로 치환된 페닐이며, 상기 기는 CD, CD_2 또는 CD_3 중 1 이상을 포함한다.

[0026] 일측면에서, R_A 및 R_B 중 1 이상의 치환기는 고리 A, 고리 B, 또는 고리 A 또는 고리 B에 공액 또는 융합된 고리에 직접 부착된 CD_3인 화합물이 제공된다.

[0027] 특히, 하기로 구성된 군에서 선택되는 리간드를 포함하는 화합물이 제공된다:



II III IV



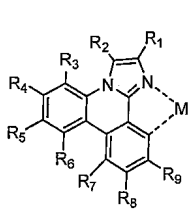
V VI VII

[0028]

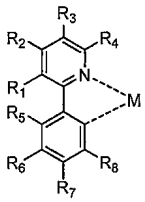
[0029] R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10}은 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택된다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10} 중 1 이상은 CD_3이다.

[0030] 다른 측면에서, 화합물은 화학식 II, III, IV, V, VI 및 VII에서 선택되는 리간드를 포함한다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10}은 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택된다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10} 중 1 이상은 CD_3을 포함한다.

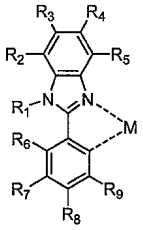
[0031] 또 다른 측면에서, 하기로 구성되는 군에서 선택되는 리간드를 포함하는 화합물이 제공된다:



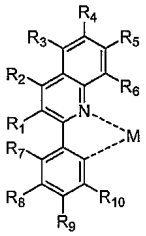
III



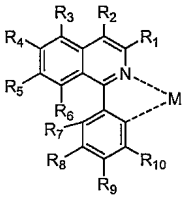
IV



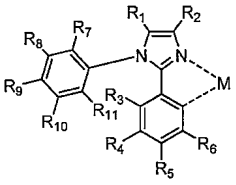
V



VI



VII



VIII

[0032]

[0033] R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11}은 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택된다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11}은 연결될 수 있다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11}은 융합될 수 있다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11} 중 1 이상은 CD, CD_2 또는 CD_3을 포함하는 알킬기를 포함한다.

[0034] 메틸-중수소 치환된(본 명세서에서는 메틸-d_3 또는 CD_3으로도 지칭) 이리듐 착체의 특정 예가 제공되며, 이는 화합물 2-42로 구성된 군에서 선택되는 화합물을 포함한다. 일측면에서, 화학식 II를 갖는 리간드를 포함하는 화합물, 예컨대 화합물 2-4가 제공된다. 다른 측면에서, 화학식 III을 갖는 리간드를 포함하는 화합물, 예컨대 화합물 5-9가 제공된다. 또 다른 측면에서, 화학식 IV를 갖는 리간드를 포함하는 화합물, 예컨대 화합물 10-14 및 27-40이 제공된다. 또 다른 측면에서, 화학식 V를 갖는 리간드를 포함하는 화합물, 예컨대 화합물 15-19가 제공된다. 또 다른 측면에서, 화학식 VI을 갖는 리간드를 포함하는 화합물, 예컨대 화합물 20-23이 제공된다. 또 다른 측면에서, 화학식 VII을 갖는 리간드를 포함하는 화합물, 예컨대 화합물 24-26, 41 및 42가 제공된다.

[0035] 중수소 치환된 화합물의 추가의 특정 예는 화합물 43-82로 구성된 군에서 선택되는 화합물을 포함한다. 일측면에서, 화학식 III을 갖는 리간드를 포함하는 화합물, 예컨대 화합물 58, 59, 68-70 및 75-77이 제공된다. 다른 측면에서, 화학식 IV를 갖는 리간드를 포함하는 화합물, 예컨대 화합물 43-52, 62-67 및 80-82가 제공된다. 또 다른 측면에서, 화학식 V를 갖는 리간드를 포함하는 화합물, 예컨대 화합물 55-57, 73 및 74가 제공된다. 추가의 측면에서, 화학식 VI을 갖는 리간드를 포함하는 화합물, 예컨대 화합물 60, 61, 78 및 79가 제공된다. 또 다른 측면에서, 화학식 VIII을 갖는 리간드를 포함하는 화합물, 예컨대 화합물 53, 54, 71 및 72가 제공된다.

[0036] 일측면에서, 동종 리간드성(homoleptic) 화합물이 제공된다. 특히, 화학식 I을 갖는 리간드가 동종 리간드성 화합물 내 리간드인 화합물이 제공된다. 다른 측면에서, 이종 리간드성(heteroleptic) 화합물이 제공된다. 특히, 화학식 I을 갖는 리간드가 이종 리간드성 화합물 내 리간드인 화합물이 제공된다.

[0037] 유기 발광 소자도 제공된다. 소자는 애노드, 캐소드, 및 애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기 발광층을 포함할 수 있다. 유기층은 상기 설명한 바의 화학식 I의 구조를 갖는 리간드를 추가로 포함한다.

[0038] A 및 B는 독립적으로 5원 또는 6원 방향족 또는 헤테로 방향족 고리를 나타낼 수 있다. A_1, A_2, B_1 및 B_2는 독립적으로 C 또는 N이다. R_A 및 R_B는 일치환기, 이치환기 또는 삼치환기를 나타낼 수 있다. X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 헤테로 원자이다. R_A, R_B, R_1 및 R_2는 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택된다. R_A, R_B, R_1 및 R_2 중 1 이상은 CD, CD_2 또는 CD_3을 포함한다. 바람직하게는, R_A, R_B, R_1 및 R_2 중 1 이상은 CD_3을 포함한다. R_A, R_B, R_1 및 R_2는 연결될 수 있다. R_A, R_B, R_1 및 R_2

는 융합될 수 있다. 리간드는 원자량이 40을 초과하는 금속에 배위된다.

[0039] 일측면에서, X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 N이고, X_A가 N일 경우, R_1은 아릴이다. 다른 측면에서, X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 N이고, X_A가 N일 경우, R_1은 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택되는 기로 추가로 치환된 페닐이며, 상기 기는 CD, CD_2 또는 CD_3 중 1 이상을 포함한다.

[0040] 화학식 I을 갖는 리간드를 포함하는 화합물에 바람직한 것으로 기재된 방향족 고리, 금속 및 치환기의 선택은 또한 화학식 I을 갖는 리간드를 포함하는 화합물을 포함하는 소자에 사용하기에 바람직하다. 이들 선택은 금속 M, 고리 A 및 B, 및 치환기 R_A, R_B, A_1, A_2, B_1, B_2, R_1 및 R_2에 대한 선택을 포함한다.

[0041] 바람직하게는, R_A 및 R_B 중 1 이상의 치환기는 고리 A, 고리 B, 또는 고리 A 또는 고리 B에 공액 또는 융합된 고리에 직접 부착된 CD_3이다.

[0042] 바람직하게는, 금속은 Ir이다.

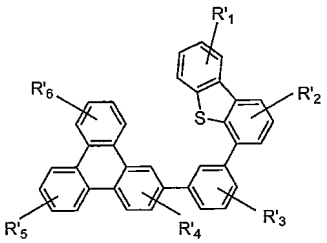
[0043] 바람직하게는, A는 이미다졸, 피라졸, 트리아졸, 옥사졸, 옥사디아졸, 피리딘, 피리다진, 피리미딘, 피라진 및 트리아진으로 구성된 군에서 선택된다. 바람직하게는, B는 벤젠, 피리딘, 푸란, 피롤 및 티오펜으로 구성된 군에서 선택된다.

[0044] 특히, 소자의 유기층은 화학식 II-VII로 구성된 군에서 선택되는 리간드를 갖는 화합물을 포함할 수 있으며, 여기서 R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10}은 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택된다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10} 중 1 이상은 CD_3이다. 바람직하게는, 유기층은 화합물 2-42로 구성된 군에서 선택되는 화합물을 포함한다.

[0045] 추가로, 소자의 유기층은 화학식 II-VII로 구성된 군에서 선택되는 리간드를 갖는 화합물을 포함할 수 있으며, 여기서 R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10}은 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택된다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10} 중 1 이상은 CD_3을 포함한다.

[0046] 또한, 소자의 유기층은 화학식 III-VIII로 구성된 군에서 선택되는 리간드를 갖는 화합물을 포함할 수 있으며, 여기서 R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11}은 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택된다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11}은 연결될 수 있다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11}은 융합될 수 있다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11} 중 1 이상은 CD, CD_2 또는 CD_3을 포함하는 알킬기를 포함한다. 바람직하게는, 유기층은 화합물 43-82로 구성된 군에서 선택되는 화합물을 포함한다.

[0047] 일측면에서, 유기층은 본 명세서에 제공된 화합물을 포함하는 발광층이며, 여기서 화합물은 발광 도펀트이다. 유기층은 호스트를 추가로 포함할 수 있다. 바람직하게는, 호스트는 하기 화학식을 갖는다:

[0048] 

[0049] 상기 화학식에서, R'_1, R'_2, R'_3, R'_4, R'_5 및 R'_6은 일치환기, 이치환기, 삼치환기 또는 사치환기를 나타낼 수 있고; R'_1, R'_2, R'_3, R'_4, R'_5 및 R'_6 각각은 독립적으로 수소, 알킬 및 아릴로 구성된 군에서 선택된다. 더욱 바람직하게는, 호스트는 H1이다.

[0050] 상기 소자를 포함하는 소비자 제품(consumer product)도 제공된다. 소자는 애노드, 캐소드, 및 애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기층을 포함한다. 유기층은 상기 설명한 바의 화학식 I의 구조를 갖는 리간드를 포함하는 화합

물을 포함한다.

[0051] A 및 B는 독립적으로 5원 또는 6원 방향족 또는 헤테로 방향족 고리를 나타낼 수 있다. A_1, A_2, B_1 및 B_2는 독립적으로 C 또는 N이다. R_A 및 R_B는 일치환기, 이치환기 또는 삼치환기를 나타낼 수 있다. X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 헤테로 원자이다. R_A, R_B, R_1 및 R_2는 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택된다. R_A, R_B, R_1 및 R_2 중 1 이상은 CD, CD_2 또는 CD_3을 포함한다. 바람직하게는, R_A, R_B, R_1 및 R_2 중 1 이상은 CD_3을 포함한다. R_A, R_B, R_1 및 R_2는 연결될 수 있다. R_A, R_B, R_1 및 R_2는 융합될 수 있다. 리간드는 원자량이 40을 초과하는 금속에 배위된다.

[0052] 화학식 I을 갖는 리간드를 포함하는 화합물에 바람직한 것으로 기재된 방향족 고리, 금속 및 치환기에 대한 선택은 또한 화학식 I을 갖는 리간드를 포함하는 화합물을 포함하는 소자를 포함하는 소비자 제품에 사용하기에 바람직하다. 이들 선택은 금속 M, 고리 A 및 B, 및 치환기 R_A, R_B, A_1, A_2, B_1, B_2, R_1 및 R_2에 대한 선택을 포함한다.

도면의 간단한 설명

[0053] 도 1은 유기 발광 소자를 도시한다.

도 2는 분리된 전자 수송층을 갖지 않는 반전 유기 발광 소자를 도시한다.

도 3은 중수소 치환을 포함하는 리간드의 일반적인 구조를 도시한다.

도 4는 예시적인 메틸-d_3 치환된 리간드를 도시한다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0054] **상세한 설명**

[0055] 일반적으로, OLED는 애노드와 캐소드 사이에 배치되고 이들에 전기적으로 연결된 1 이상의 유기층을 포함한다. 전류가 인가될 때, 애노드는 유기층(들)에 정공을 주입하고, 캐소드는 유기층(들)에 전자를 주입한다. 주입된 정공 및 전자는 각각 반대로 하전된 전극을 향해 이동한다. 전자 및 정공이 동일한 분자 위에 편재할 경우, 여기된 에너지 상태를 갖는 편재화된 전자-정공 쌍인 "여기자"가 형성된다. 여기자가 광방출 기전을 통해 이완될 때 발광된다. 일부 경우, 여기자는 엑시머 또는 엑시플렉스(exciplex) 위에 편재될 수 있다. 열 이완과 같은 비방사성 기전도 일어날 수 있지만, 일반적으로는 바람직하지 않은 것으로 고려된다.

[0056] 초기 OLED는 예컨대 그 전체를 참고로 인용하는 미국 특허 제4,769,292호에 개시된 바의 단일항 상태("형광")로부터 발광하는 발광성 분자를 사용하였다. 형광성 방출은 일반적으로 10 나노초 미만의 시간 프레임으로 발생한다.

[0057] 더욱 최근에, 삼중항 상태로부터 발광하는("인광") 발광성 재료를 갖는 OLED가 증명되었다. 그 전체를 참고로 인용하는 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")] 참조. 인광은 참고로 인용하는 미국 특허 제7,279,704호 컬럼 5-6에 더욱 상세히 설명되어 있다.

[0058] 도 1은 유기 발광 소자(100)를 도시한다. 도면은 반드시 실제 비율로 그린 것은 아니다. 소자(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 제1 전도층(160) 및 제2 전도층(164)을 갖는 복합 캐소드이다. 소자(100)는 기재된 층을 순서대로 증착시켜 제작할 수 있다. 이들 다양한 층의 특성 및 기능 뿐 아니라 예시적 재료는 참고로 인용하는 미국 특허 제7,279,704호의 컬럼 6-10에 더욱 상세히 설명되어 있다.

[0059] 이들 층 각각에 대한 추가의 예가 입수 가능하다. 예컨대, 가요성 및 투명성 기판-애노드 조합은 그 전체를 참고로 인용하는 미국 특허 제5,844,363호에 개시되어 있다. p-도핑된 정공 수송층의 예는 그 전체를 참고로 인용하는 미국 특허 출원 공개 제2003/0230980호에 개시된 바의, 몰 비 50:1의 F.sub.4-TCNQ로 도핑된 m-MTDATA이

다. 발광성 재료 및 호스트 재료의 예는 그 전체를 참고로 인용하는 Thompson 등에게 허여된 미국 특허 제6,303,238호에 개시되어 있다. n-도핑된 전자 수송층의 예는 그 전체를 참고로 인용하는 미국 특허 출원 공개 제2003/0230980호에 개시된 바의, 몰 비 1:1의 Li로 도핑된 BPhen이다. 그 전체를 참고로 인용하는 미국 특허 제5,703,436호 및 동 제5,707,745호는 투명성, 전기 전도성, 스퍼터 증착된 ITO 층이 중첩된 Mg:Ag와 같은 금속의 박층을 갖는 복합 캐소드를 비롯한 캐소드의 예를 개시한다. 차단층의 이론 및 용도가 그 전체를 참고로 인용하는 미국 특허 제6,097,147호 및 미국 특허 출원 공개 제2003/0203980호에 더욱 상세히 설명되어 있다. 주입층의 예는 그 전체를 참고로 인용하는 미국 특허 출원 공개 제2004/0174116호에 제공되어 있다. 보호층의 설명은 그 전체를 참고로 인용하는 미국 특허 출원 공개 제2004/0174116호에서 찾을 수 있다.

[0060] 도 2는 반전 OLED(200)를 도시한다. 소자는 기판(210), 캐소드(215), 발광층(220), 정공 수송층(225) 및 애노드(230)를 포함한다. 소자(200)는 기재된 층을 순서대로 증착시켜 제작할 수 있다. 가장 흔한 OLED 구성은 애노드 위에 캐소드를 배치하며 소자(200)가 애노드(230) 아래에 배치된 캐소드(215)를 갖기 때문에, 소자(200)를 "반전" OLED로 지칭할 수 있다. 소자(100)에 대해 기재된 것들과 유사한 재료를 소자(200)의 해당 층에 사용할 수 있다. 도 2는 일부 층을 소자(100)의 구조로부터 어떻게 생략되는지의 일례를 제공한다.

[0061] 도 1 및 2에 도시된 간단한 층상 구조는 비제한적인 예로서 제공한 것이고, 매우 다양한 다른 구조와 관련하여 본 발명의 구체예를 이용할 수 있음을 이해해야 한다. 기재된 특정 재료 및 구조는 당연히 예시적인 것이고, 다른 재료 및 구조를 이용할 수 있다. 상이한 방식으로 설명된 다양한 층을 조합하여 기능성 OLED를 달성할 수 있거나, 또는 전체적으로 설계, 성능 및 비용 인자를 기준으로 하여 층을 생략할 수 있다. 특정 기재하지 않은 다른 층도 포함될 수 있다. 이들 특정 기재된 것 외의 재료를 사용할 수 있다. 본 명세서에 제공된 예 중 다수는 다양한 층이 단일 재료를 포함하는 것으로서 기재하였지만, 호스트 및 도펀트의 혼합물 또는 더욱 일반적으로 혼합물과 같은 재료의 조합을 사용할 수 있음을 이해해야 한다. 또한, 층은 다양한 부층(sublayer)을 포함할 수 있다. 본 명세서에서 다양한 층에 제공된 명칭은 엄격하게 한정하려는 것이 아니다. 예컨대, 소자(200)에서, 정공 수송층(225)은 정공을 수송하고 발광층(220)에 정공을 주입하며, 정공 수송층 또는 정공 주입층으로서 기재할 수 있다. 일구체예에서, OLED를 캐소드와 애노드 사이에 배치된 "유기층"을 갖는 것으로 기재할 수 있다. 이 유기층은 단일층을 포함할 수 있거나, 또는 예컨대 도 1 및 도 2에 대해 기재된 바와 같이 상이한 유기 재료의 다중 층을 더 포함할 수 있다.

[0062] 그 전체를 참고로 인용하는 Friend 등에게 허여된 미국 특허 제5,247,190호에 개시된 바의 중합체 재료를 포함하는 OLED(PLED)와 같은 특정 기재되지 않은 구조 및 재료도 사용할 수 있다. 추가의 예로서, 단일 유기층을 갖는 OLED를 사용할 수 있다. OLED는 예컨대 그 전체를 참고로 인용하는 Forrest 등에게 허여된 미국 특허 제5,707,745호에 기재된 바와 같이 적층할 수 있다. OLED 구조는 도 1 및 2에 도시된 간단한 층상 구조로부터 벗어날 수도 있다. 예컨대, 기판은 그 전체를 참고로 인용하는 Forrest 등에게 허여된 미국 특허 제6,091,195호에 기재된 바와 같은 메사 구조, 및/또는 Bulovic 등에게 허여된 미국 특허 제5,834,893호에 기재된 바와 같은 피트 구조와 같은 아웃커플링(out-coupling)을 개선시키기 위한 각진 반사 표면을 포함할 수 있다.

[0063] 달리 명시하지 않는 한, 다양한 구체예의 층 중 임의의 것은 임의의 적절한 방법에 의해 증착시킬 수 있다. 유기층에 대해, 바람직한 방법은 열 증발, 그 전체를 참고로 인용하는 미국 특허 제6,013,982호 및 제6,087,196호에 기재된 바와 같은 잉크젯, 그 전체를 참고로 인용하는 Forrest 등에게 허여된 미국 특허 제6,337,102호에 기재된 바와 같은 유기 증기 상 증착(OVPD), 및 그 전체를 참고로 인용하는 미국 특허 출원 제10/233,470호에 기재된 바와 같은 유기 증기 제트 인쇄에 의한 증착(OVJP)을 포함한다. 다른 적절한 증착 방법은 스핀 코팅 및 다른 용액 기초 공정을 포함한다. 용액 기초 공정은 바람직하게는 질소 또는 불활성 분위기에서 실시한다. 다른 층에 대해, 바람직한 방법은 열 증발을 포함한다. 바람직한 패턴화 방법은 마스크를 통한 증착, 그 전체를 참고로 인용하는 미국 특허 제6,294,398호 및 제6,468,819호에 기재된 바와 같은 냉간 용접, 및 잉크젯 및 OVJD와 같은 증착 방법의 일부와 관련된 패턴화를 포함한다. 다른 방법도 이용할 수 있다. 증착될 재료는 특정 증착 방법과 상용성이 있도록 변경할 수 있다. 예컨대, 분지쇄형 또는 비분지쇄형이고 바람직하게는 3개 이하의 탄소 원자를 포함하는 알킬 및 아릴 기와 같은 치환기를 소분자에 사용하여 이들의 용액 가공을 거치는 능력을 강화시킬 수 있다. 20개 이상의 탄소를 갖는 치환기를 사용할 수 있으며, 3 내지 20 개의 탄소가 바람직한 범위이다. 비대칭 구조를 갖는 재료는 대칭 구조를 갖는 것들보다 용액 가공성이 양호할 수 있는데, 비대칭 재료는 재결정화되는 경향이 더 낮을 수 있기 때문이다. 덴드리머 치환기를 사용하여 소분자의 용액 가공을 거치는 능력을 강화시킬 수 있다.

[0064] 본 발명의 구체예에 따라 제작된 소자를 평판 디스플레이, 컴퓨터 모니터, 텔레비젼, 광고 게시판, 내부 또는 외부 조명용 광 및/또는 신호, 헤드업 디스플레이(heads up display), 완전 투명 디스플레이, 플렉서블 디스플

레이, 레이저 프린터, 전화, 휴대 전화, 개인 휴대 정보 단말기(PDA), 랩탑 컴퓨터, 디지털 카메라, 캠코더, 뷰파인더, 마이크로 디스플레이, 운송 수단, 대면적 벽, 영화관 또는 스튜디오 스크린 또는 싸인을 비롯한 매우 다양한 소비자 제품에 삽입할 수 있다. 수동 매트릭스 및 능동 매트릭스를 비롯한 다양한 제어 기전을 이용하여 본 발명에 따라 제작된 소자를 제어할 수 있다. 다수의 소자는 18 내지 30℃, 더욱 바람직하게는 실온(20 내지 25℃)과 같은 인간에게 편안한 온도 범위에서 사용하도록 의도된다.

[0065] 본 명세서에 기재된 재료 및 구조는 OLED 이외의 소자에 응용될 수 있다. 예컨대, 유기 태양 전지 및 유기 광검출기와 같은 다른 광전자 소자가 재료 및 구조를 이용할 수 있다. 더욱 일반적으로, 유기 트랜지스터와 같은 유기 소자가 재료 및 구조를 이용할 수 있다.

[0066] 용어 할로, 할로겐, 알킬, 시클로알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 복소환 기, 아릴, 방향족 기 및 헤테로아릴은 당업계에 공지되어 있으며, 본 명세서에서 참고로 인용하는 미국 특허 제7,279,704호 컬럼 31-32에 정의되어 있다.

[0067] 본 명세서에 사용된 바의 용어 알킬, 아릴 및 헤테로아릴은 또한 수소 대신에 중수소를 포함한다. 예컨대, 알킬은 CH_3 또는 CD_3, 및 CH_2CH_3 또는 CH_2CD_3을 포함할 수 있다. 유사하게, 아릴 및 헤테로아릴은 수소가 아닌 중수소로 치환된 방향족 기를 포함할 수 있다.

[0068] 이리듐 착체 내 수소를 이의 동위 원소인 중수소로 대체하는 것은 문헌에 보고되어 있다(예컨대 미국 공개 제2008/0194853호 및 미국 특허 제6,699,599호 참조). 특히, 고리 상에 직접적인 중수소 원자 치환은 색상 조정을 제공하지 않는 것으로 보인다. 특히, 본 발명자들은 중수소 원자로 치환된 화합물의 발광 프로필에서 어떠한 변화의 보고도 인지하지 않았다.

[0069] 호스트 재료 내 CD_3 치환도 보고되어 있다(WO2008029670 참조). 그러나, 발광 도펀트의 발광 프로필은 화합물의 중요한 특성이며, 호스트 재료의 치환은 색상 조정에 관한 어떠한 정보도 제공할 수 없다. 특히, 변경되는 화합물이 본 명세서에 제공된 바의 발광성 재료가 아닌 호스트 재료일 경우에는, 광 발광 스펙트럼의 중수소 치환의 효과(예컨대 색상 조정 특성)은 평가할 수 없다. 따라서, 메틸 치환의 유리한 특성(예컨대 색상 조정, 개선된 양자 수율 및 개선된 수명) 뿐 아니라 중수소와 관련된 개선된 안정성을 갖는 발광성 화합물이 바람직할 수 있다.

[0070] 금속 착체의 메틸 치환은 화합물의 광물리학적 및 전기 발광 특성의 조정에 유용한 것으로 밝혀졌다. 예컨대, 특정 위치에서의 메틸 치환은 양자 수율, 선 형상 및 OLED의 수명을 개선시키는 이의 능력에 유리할 수 있다.

[0071] 메틸-d_3 치환기를 갖는 리간드를 포함하는 신규한 화합물이 본 명세서에 제공된다(도 3에 도시됨). 또한, 메틸-d_3 치환을 갖는 특정 리간드도 제공된다(도 4에 도시됨). 특히, 개시된 화합물로 광 발광 및 소자 효율 모두의 개선이 제공될 수 있다.

[0072] 본 명세서에 제공된 화합물은 메틸-d_3 치환을 갖는 리간드를 포함한다. 이들 화합물은 유리하게는 개선된 효율, 긴 수명 및 개선된 색상(예컨대 색상 조정)을 갖는 소자를 제공하기 위해 OLED에 사용될 수 있다. 이론에 의해 구속시키려는 것은 아니지만, CD_3 치환기는 강한 C-D 결합으로 인해 안정성을 개선시킬 수 있는 것으로 여겨진다. C-D 결합의 강도는 상기 논의된 바의 C-H 결합보다 크다. 추가로, 중수소의 더 작은 반데르 발스 반경이 입체 장애가 더 적은 치환기[예컨대, CH_3 치환기가 아닌 오르토 위치에 있는 CD_3 치환기를 포함하는 방향족 고리 상의 꼬임(twist)이 더 적음]로 바뀔 수 있어서, CD_3 치환을 갖는 계에서 공액을 개선시킬 수 있다. 또한, 메틸-d_3에 존재하는 C-D 결합을 수반하는 화학적 공정의 반응 속도는 역학적 동위 원소 효과로 인해 더 느릴 수 있다. 발광성 화합물의 화학적 분해가 메틸 C-H 결합의 파괴를 수반하는 경우, 더 강한 C-D 결합이 화합물의 안정성을 개선할 수 있다.

[0073] 메틸은 화합물에 대한 변경체로서 첨가되는 가장 간단한 알킬 치환이다. 이는 OLED 내 호스트 및 에미터 모두의 특성을 변경하기 위한 가장 중요한 치환기일 수 있다. 메틸은 고체 상태에서의 포장 특성(즉 승화 특성 및 전하 수송 특성)에 영향을 미치고, 광물리학적 특성을 변경시키고, 소자 안정성에 영향을 미칠 수 있다. 트리스(2-페닐피리딘)이리듐(III) 부류의 특성을 변경시키기 위해 메틸기를 도입하였다. 예컨대 에미터로서 트리스(3-메틸-2-페닐피리딘)이리듐(III)을 갖는 소자는 에미터로서 트리스(2-페닐피리딘)이리듐(III)을 갖는 소자보다 양호한 안정성을 갖는다. 또한, 트리스(3-메틸-2-페닐피리딘)이리듐(III)의 방출 피크는 약 10 nm 적색 이동한다. 트리

스(3-메틸-2-페닐피리딘)이리듐(III)의 증발 온도도 트리스(2-페닐피리딘)이리듐(III)보다 20℃ 낮다.

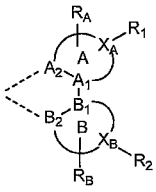
[0074] 다른 한편, 메틸은 또한 벤질성 양성자로 인해 반응성이 있는 것으로 고려된다. 이론에 의해 구속시키려는 것은 아니지만, 메틸기에 존재하는 수소 원자는 특히 반응성이 있을 수 있어서, 발광성 화합물에서 화학적 분해 위치일 수 있다. 또한, 업계에서는 OLED 작동 동안 도펀트 화합물이 산화되는 것은 잘 알려져 있다. 산화된 상태에서, 벤질 위치는 가장 약한 위치가 되어 추가의 화학적 분해를 거칠 수 있다. 제안된 기전은 발광 도펀트를 트리페닐렌/DBT 혼성 재료와 같은 특정 호스트와 함께 사용시 더욱 관련될 수 있으며, Balq와 같은 다른 호스트와 덜 관련될 수 있다. 따라서, 메틸기 내 수소 원자를 중수소 원자(메틸-d_3)로 대체하면 발광성 화합물을 안정화시킬 수 있다.

[0075] 중수소 치환은 효율 및 안정성을 개선시킬 수 있는 것으로 여겨지는데, 왜냐하면 중수소의 원자 질량이 수소보다 2배 커서 더 낮은 영점 에너지 및 더 낮은 진동 에너지 수준을 가져오기 때문이다. 추가로, 중수소와 관련된 화학적 결합 길이 및 결합 각은 수소와 관련된 것과는 상이하다. 특히, C-H 결합에 비해 C-D 결합의 신장 진폭이 더 작아서, 중수소의 반데르발스 반경은 수소보다 작다. 일반적으로, C-D 결합이 C-H 결합보다 더 짧고 더 강하다. 따라서, CD_3 치환은 동일한 색상 조정 및 증가된 결합 강도와 관련된 모든 이점(즉, 개선된 효율 및 수명)을 제공할 수 있다.

[0076] 상기 논의된 바와 같이, 중수소 치환은 이점, 예컨대 증가된 효율 및 수명을 제공한다. 따라서, 중수소 치환을 갖는 리간드를 포함하는 화합물을 유기 발광 소자에 유리하게 사용할 수 있다. 이러한 화합물은 예컨대 알킬쇄 내의 중수소, 예컨대 $C(D)(H)CH_3$, CD_2CH_3 및 $CH_2CD_2CH_3$ 뿐 아니라, 알킬쇄의 말단에서의 중수소, 예컨대 CD_3을 갖는 리간드를 포함하는 화합물을 포함한다.

[0077] 본 명세서에는 하기 구조를 갖는 리간드를 포함하는 신규한 화합물이 제공된다:

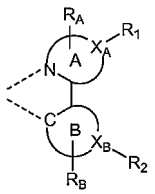
[0078] 화학식 I

[0079] 

[0080] 상기 화학식에서, A 및 B는 독립적으로 5 원 또는 6원 방향족 또는 헤테로 방향족 고리를 나타낼 수 있다. 바람직하게는, A는 이미다졸, 피라졸, 트리아졸, 옥사졸, 옥사디아졸, 피리딘, 피리다진, 피리미딘, 피라진 및 트리아진으로 구성된 군에서 선택된다. 바람직하게는, B는 벤젠, 피리딘, 푸란, 피롤 및 티오펜으로 구성된 군에서 선택된다. A_1, A_2, B_1 및 B_2는 독립적으로 C 또는 N이다. R_A 및 R_B는 일치환기, 이치환기 또는 삼치환기를 나타낸다. X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 헤테로 원자이다. R_A, R_B, R_1 및 R_2는 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택된다. R_A, R_B, R_1 및 R_2 중 1 이상은 CD, CD_2 또는 CD_3을 포함한다. 바람직하게는, R_A, R_B, R_1 및 R_2 중 1 이상은 CD_3을 포함한다. R_A, R_B, R_1 및 R_2는 연결될 수 있다. R_A, R_B, R_1 및 R_2는 융합될 수 있다. 리간드는 원자량이 40을 초과하는 금속에 배위된다. 바람직하게는, 금속은 Ir이다.

[0081] 일측면에서, 리간드는 하기 구조를 갖는다:

[0082] 화학식 Ia

[0083] 

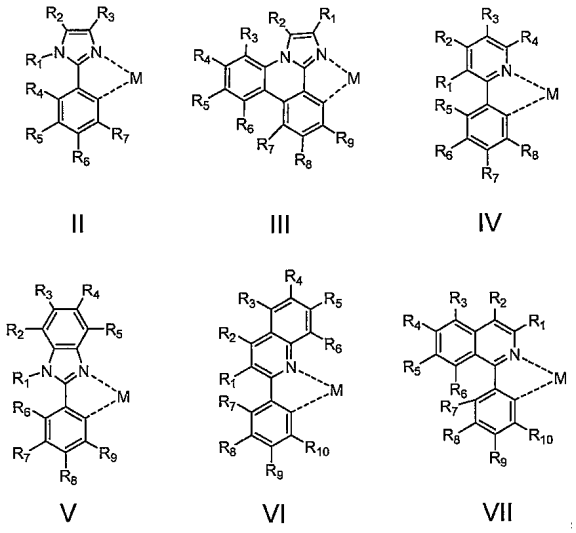
[0084] 일측면에서, X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 N이고, X_A가 N일 경우, R_1은 아릴이다. 다른 측면에서, X_A 및 X_B는 독

립적으로 C 또는 N이고, X_A가 N일 경우, R_1은 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택되는 기로 추가로 치환된 페닐이며, 상기 기는 CD, CD_2 또는 CD_3 중 1 이상을 포함한다.

[0085] 일측면에서, R_A 및 R_B 중 1 이상의 치환기가 고리 A, 고리 B, 또는 고리 A 또는 고리 B에 공액 또는 융합된 고리에 직접 부착된 CD_3인 화합물이 제공된다.

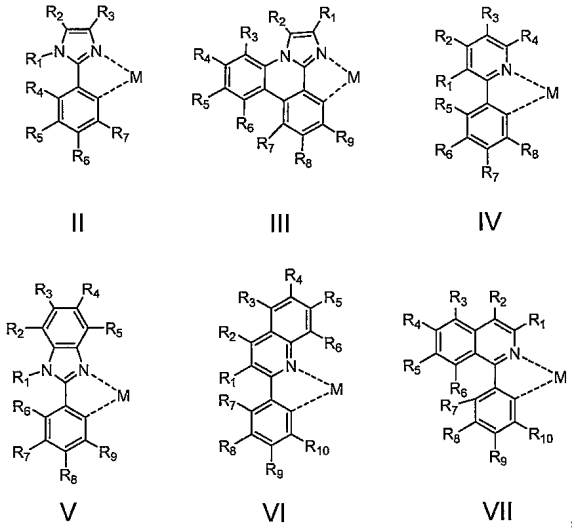
[0086] 상기 논의된 바와 같이, 치환기 R_A 및 R_B는 고리 A 및/또는 고리 B에 융합될 수 있다. 치환기 R_A 및 R_B는 고리 A 및/또는 고리 B에 연결되거나, 융합되거나, 또는 고리 A 및/또는 고리 B에 융합되지 않은 치환기를 비롯한 임의의 치환기일 수 있다.

[0087] 특히, 하기로 구성된 군에서 선택되는 리간드를 포함하는 화합물이 제공된다:

[0088] 

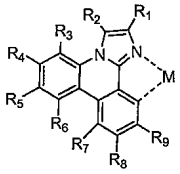
[0089] R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10}은 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택되고; R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10} 중 1 이상은 CD_3이다.

[0090] 추가로, 하기로 구성된 군에서 선택되는 리간드를 포함하는 화합물이 제공된다:

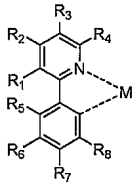
[0091] 

[0092] R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10}은 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택되고; R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10} 중 1 이상은 CD_3을 포함한다.

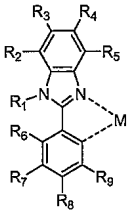
[0093] 리간드를 포함하는 화합물은 하기로 구성된 군에서 선택된다:



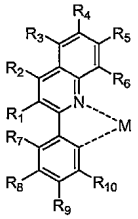
III



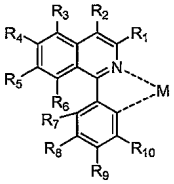
IV



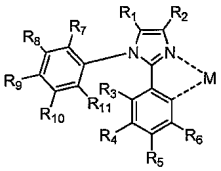
V



VI



VII

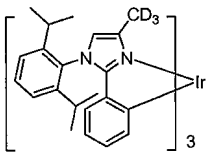


VIII

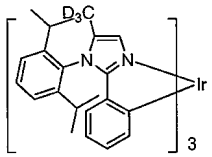
[0094]

[0095] R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11}은 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택되고; R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11}은 연결될 수 있다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11}은 융합될 수 있다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11} 중 1 이상은 CD, CD_2 또는 CD_3을 포함하는 알킬기를 포함한다.

[0096] 하기로 구성된 군에서 선택되는 화합물을 비롯한 메틸-d_3 치환된 이리듐 착체의 특정 예가 제공된다:

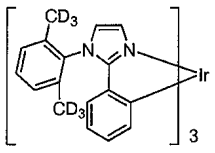


화합물 2

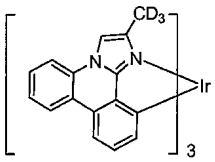


화합물 3

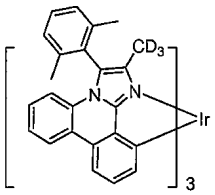
[0097]



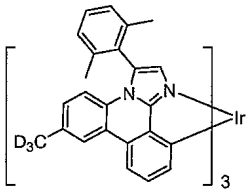
화합물 4



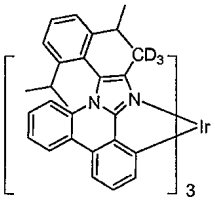
화합물 5



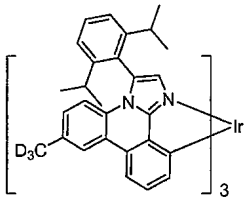
화합물 6



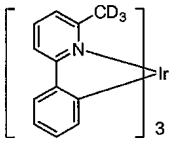
화합물 7



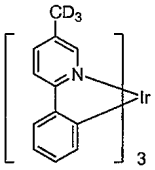
화합물 8



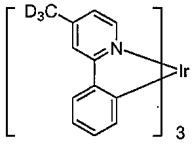
화합물 9



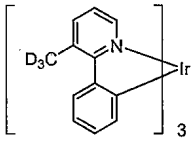
화합물 10



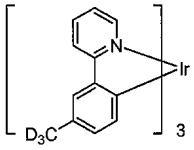
화합물 11



화합물 12



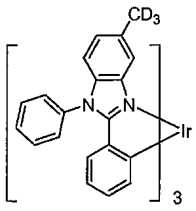
화합물 13



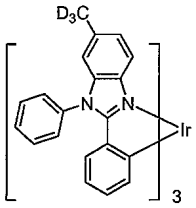
화합물 14

화합물 15

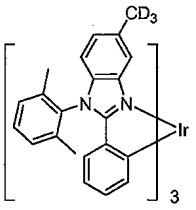
[0098]



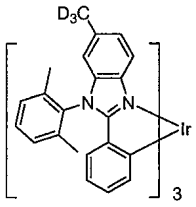
화합물 16



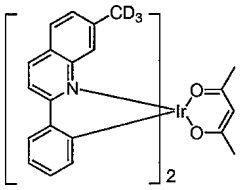
화합물 17



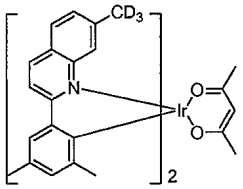
화합물 18



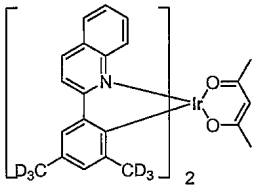
화합물 19



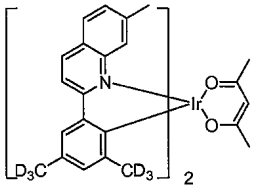
화합물 20



화합물 21

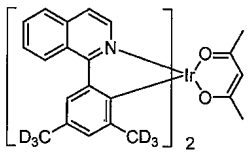


화합물 22

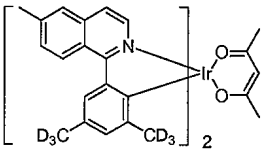


화합물 23

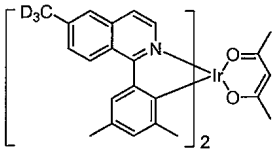
[0099]



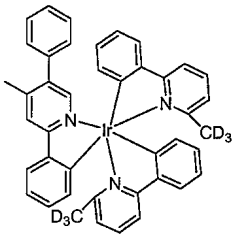
화합물 24



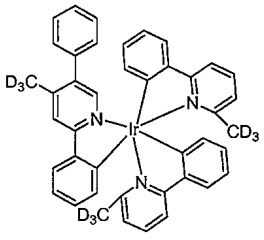
화합물 25



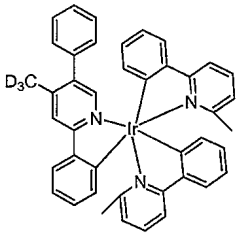
화합물 26



화합물 27

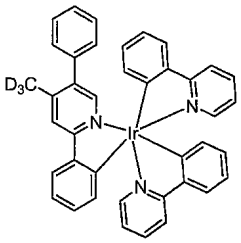


화합물 28

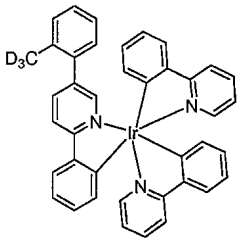


화합물 29

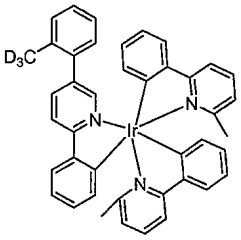
[0100]



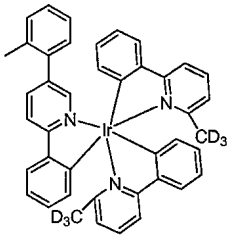
화합물 30



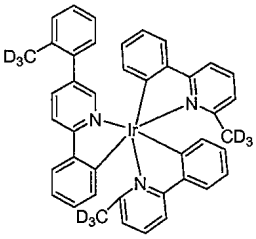
화합물 31



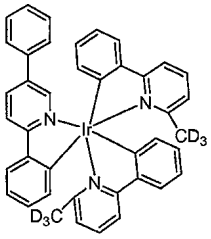
화합물 32



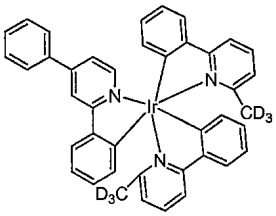
화합물 33



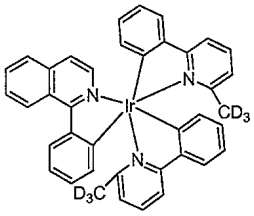
화합물 34



화합물 35

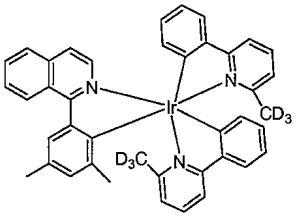


화합물 36

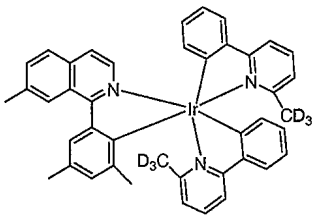


화합물 37

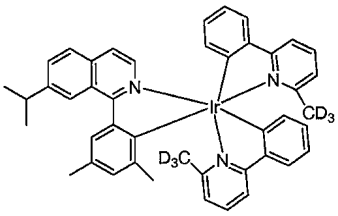
[0101]



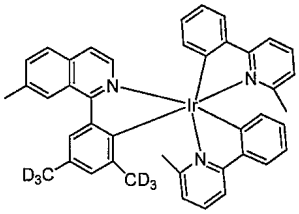
화합물 38



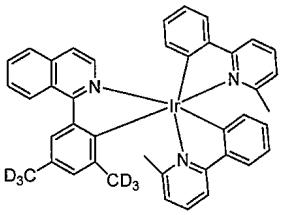
화합물 39



화합물 40



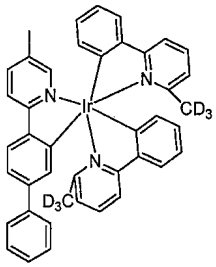
화합물 41



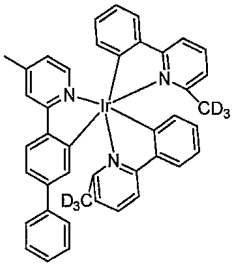
화합물 42

[0102]

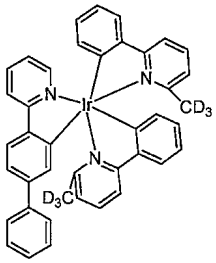
[0103] 하기로 구성된 군에서 선택되는 화합물을 비롯한 중수소 치환된 이리듐 착체의 추가의 특정 예가 제공된다:



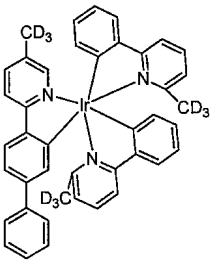
화합물 43



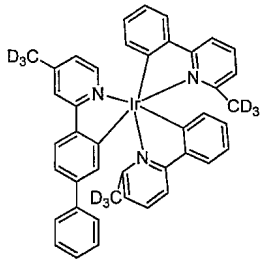
화합물 44



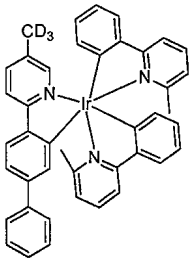
화합물 45



화합물 46

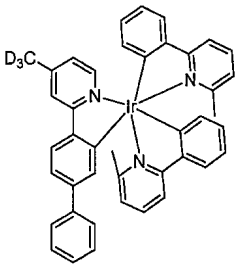


화합물 47

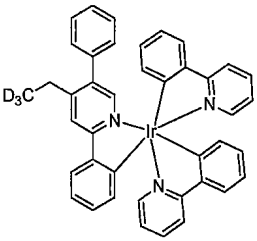


화합물 48

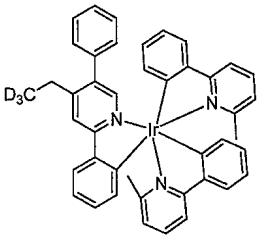
[0104]



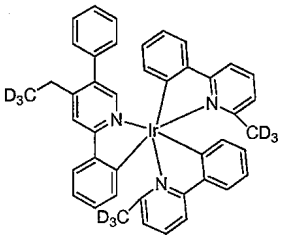
화합물 49



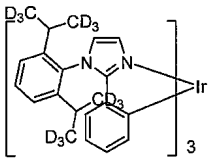
화합물 50



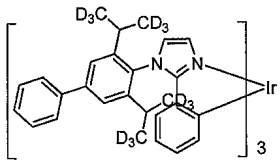
화합물 51



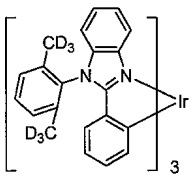
화합물 52



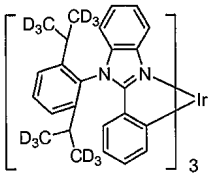
화합물 53



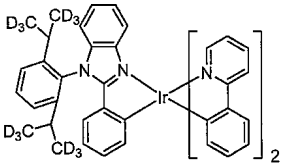
화합물 54



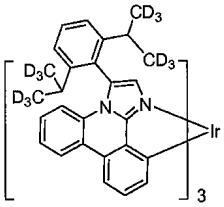
화합물 55



화합물 56

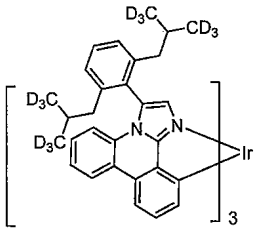


화합물 57

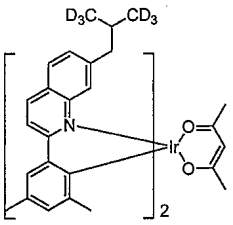


화합물 58

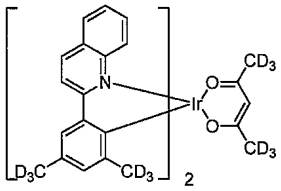
[0105]



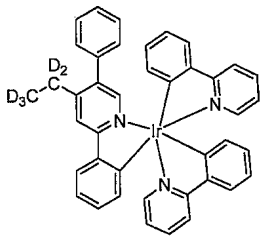
화합물 59



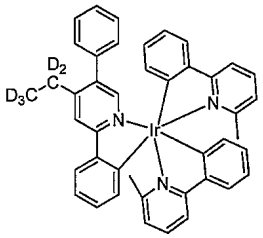
화합물 60



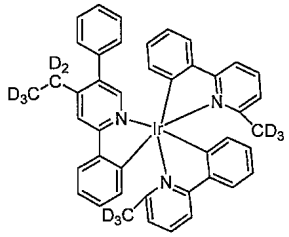
화합물 61



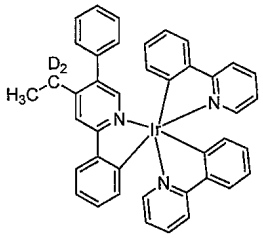
화합물 62



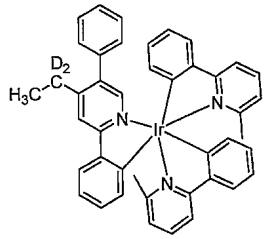
화합물 63



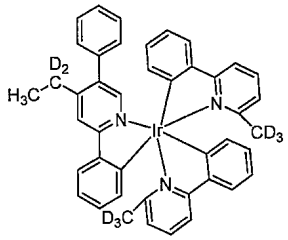
화합물 64



화합물 65

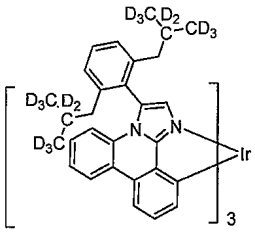


화합물 66

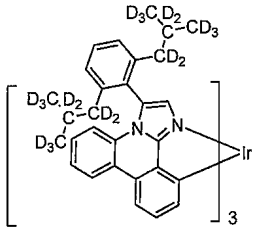


화합물 67

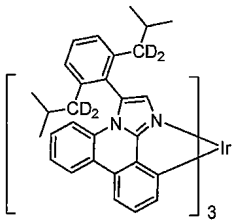
[0106]



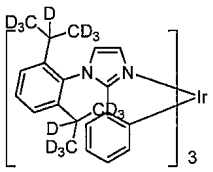
화합물 68



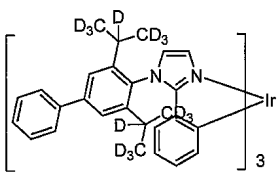
화합물 69



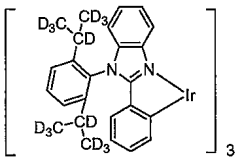
화합물 70



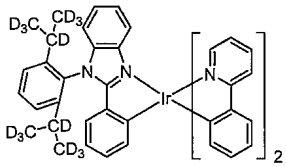
화합물 71



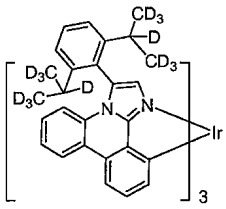
화합물 72



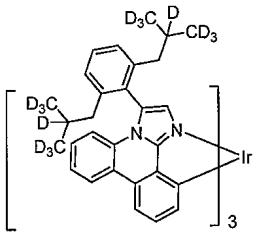
화합물 73



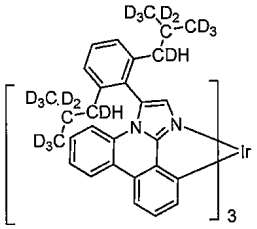
화합물 74



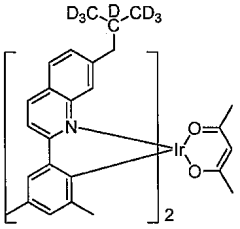
화합물 75



화합물 76

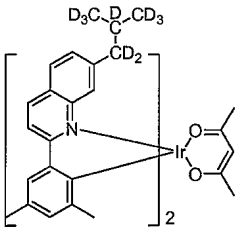


화합물 77

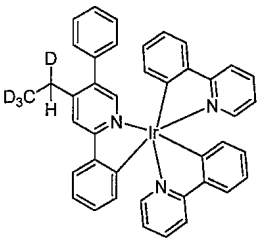


화합물 78

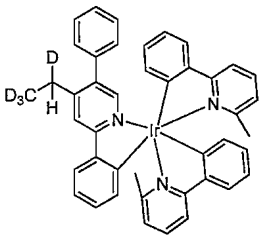
[0107]



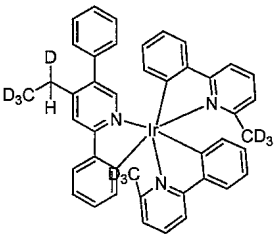
화합물 79



화합물 80



화합물 81



화합물 82

[0108]

[0109] 일측면에서, 화학식 II를 갖는 리간드를 포함하는 화합물, 예컨대 화합물 2-4가 제공된다.

[0110] 다른 측면에서, 화학식 III을 갖는 리간드를 포함하는 화합물, 예컨대 화합물 5-9가 제공된다.

[0111] 다른 측면에서, 화합물 58, 59, 68-70 및 75-77을 비롯한, 화학식 III을 갖는 리간드를 포함하는 추가의 화합물이 제공된다.

[0112] 또 다른 측면에서, 화학식 IV를 갖는 리간드를 포함하는 화합물, 예컨대 화합물 10-14 및 27-40이 제공된다.

[0113] 다른 측면에서, 화합물 43-52, 62-67 및 80-82를 비롯한, 화학식 IV를 갖는 리간드를 포함하는 추가의 화합물이 제공된다.

[0114] 또 다른 측면에서, 화학식 V를 갖는 리간드를 포함하는 화합물, 예컨대 화합물 15-19가 제공된다.

[0115] 다른 측면에서, 화합물 55-57, 73 및 74를 비롯한, 화학식 V를 갖는 리간드를 포함하는 추가의 화합물이 제공된다.

[0116] 또 다른 측면에서, 화학식 VI을 갖는 리간드를 포함하는 화합물, 예컨대 화합물 20-23이 제공된다.

[0117] 다른 측면에서, 화합물 60, 61, 78 및 79를 비롯한, 화학식 VI을 갖는 리간드를 포함하는 추가의 화합물이 제공된다.

[0118] 또 다른 측면에서, 화학식 VII을 갖는 리간드를 포함하는 화합물, 예컨대 화합물 24-26, 41 및 42가 제공된다.

[0119] 추가의 측면에서, 화합물 53, 54, 71 및 72를 비롯한, 화학식 III을 갖는 리간드를 포함하는 추가의 화합물이 제공된다.

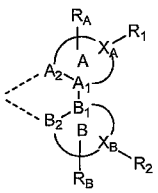
[0120] 화학식 II, 화학식 III, 화학식 IV, 화학식 V, 화학식 VI 및 화학식 VII에서 선택되는 화학식을 갖는 리간드를 포함하는 화합물은 특히 안정한 도펀트 화합물일 수 있다.

[0121] 추가로, 화학식 VIII을 갖는 리간드를 포함하는 화합물도 특히 안정한 화합물일 수 있다.

[0122] 일측면에서, CD_3을 함유하는 동종 리간드성 화합물이 제공된다. 특히, 화학식 I을 갖는 리간드가 동종 리간드성 화합물 내 리간드인 화합물이 제공된다. 본 명세서에 제공된 동종 리간드성 화합물은 예컨대 화합물 2-19를 포함한다. 다른 측면에서, CD_3을 함유하는 이종 리간드성 화합물이 제공된다. 특히, 화학식 I을 갖는 리간드는 이종 리간드성 화합물 내 리간드인 화합물이 제공된다. 본 명세서에 제공된 이종 리간드성 화합물은 예컨대 화합물 20-42를 포함한다. CD_3을 함유하는 이종 리간드성 화합물은 발광성 리간드, 및 2개의 발광성 리간드 및 acac 리간드를 함유하는 화합물 20-26과 같은 비발광성 리간드를 갖는 화합물을 포함할 수 있다. 또한, CD_3을 함유하는 이종 리간드성 화합물은 모든 리간드가 발광성 리간드이며 발광성 리간드가 상이한 구조를 갖는 화합물을 포함할 수 있다. 일측면에서, CD_3을 함유하는 이종 리간드성 화합물은 CD_3을 포함하는 2개의 발광성 리간드 및 CD_3을 함유하지 않는 1개의 발광성 리간드를 가질 수 있다(예컨대 화합물 27, 33, 35-40). 다른 측면에서, CD_3을 함유하는 이종 리간드성 화합물은 CD_3을 포함하는 1개의 발광성 리간드 및 CD_3을 함유하지 않는 2개의 발광성 리간드를 가질 수 있다(예컨대 화합물 29-32, 41 및 42). CD_3을 포함하는 발광성 리간드는 1개의 CD_3 기를 포함할 수 있거나(예컨대 화합물 29-32) 또는 리간드는 몇 개의 CD_3 기를 포함할 수 있다(예컨대 화합물 41 및 42는 2개의 CD_3 치환기를 갖는 1개의 발광성 리간드를 함유함). 또 다른 측면에서, CD_3을 함유하는 이종 리간드성 화합물은 모든 리간드가 CD_3을 함유하는 2 이상의 상이한 유형의 발광성 리간드를 함유할 수 있다(예컨대 화합물 28 및 34).

[0123] 추가로, 유기 발광 소자가 제공된다. 소자는 애노드, 캐소드, 및 애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기 발광층을 포함한다. 유기층은 상기 설명한 바의 하기 구조를 갖는 리간드를 함유하는 화합물을 포함한다:

[0124] 화학식 I



[0125]

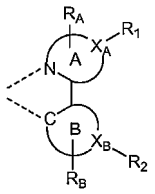
[0126] 화학식 I을 갖는 리간드를 포함하는 화합물에 바람직한 것으로 기재된 방향족 고리, 금속 및 치환기의 선택은

또한 화학식 I을 갖는 리간드를 포함하는 화합물을 포함하는 소자에 사용하기에 적절하다. 이들 선택은 금속 M, 고리 A 및 B, 및 치환기 R_A, R_B, A_1, A_2, B_1, B_2, R_1 및 R_2에 대한 선택을 포함한다.

[0127] A 및 B는 독립적으로 5원 또는 6원 방향족 또는 헤테로 방향족 고리를 나타낼 수 있다. 바람직하게는, A는 이미다졸, 피라졸, 트리아졸, 옥사졸, 옥사디아졸, 피리딘, 피리다진, 피리미딘, 피라진 및 트리아진으로 구성된 군에서 선택된다. 바람직하게는, B는 벤젠, 피리딘, 푸란, 피롤 및 티오펜으로 구성된 군에서 선택된다. A_1, A_2, B_1 및 B_2는 독립적으로 C 또는 N이다. R_A 및 R_B는 일치환기, 이치환기 또는 삼치환기를 나타낸다. X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 헤테로 원자이다. R_A, R_B, R_1 및 R_2는 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택된다. R_A, R_B, R_1 및 R_2 중 1 이상은 CD, CD_2 또는 CD_3을 포함한다. 바람직하게는, R_A, R_B, R_1 및 R_2 중 1 이상은 CD_3을 포함한다. R_A, R_B, R_1 및 R_2는 연결될 수 있다. R_A, R_B, R_1 및 R_2는 융합될 수 있다. 리간드는 원자량이 40을 초과하는 금속에 배위된다. 바람직하게는, 금속은 Ir이다.

[0128] 일측면에서, 리간드는 하기 구조를 갖는다:

[0129] 화학식 Ia

[0130] 

[0131] 일측면에서, X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 N이고, X_A가 N일 경우, R_1은 아릴이다. 다른 측면에서, X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 N이고, X_A가 N일 경우, R_1은 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택되는 기로 추가로 치환된 페닐이며, 상기 기는 CD, CD_2 또는 CD_3 중 1 이상을 포함한다.

[0132] 일측면에서, R_A 및 R_B 중 1 이상의 치환기는 고리 A, 고리 B, 또는 고리 A 또는 고리 B에 공액 또는 융합된 고리에 직접 부착된 CD_3인 화합물이 제공된다.

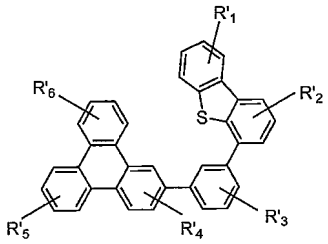
[0133] 상기 논의된 바와 같이, 치환기 R_A 및 R_B는 고리 A 및/또는 고리 B에 융합될 수 있다. 치환기 R_A 및 R_B는 고리 A 및/또는 고리 B에 연결되거나, 융합되거나, 또는 고리 A 및/또는 고리 B에 융합되지 않은 치환기를 비롯한 임의의 치환기일 수 있다.

[0134] 특히, 소자의 유기층은 화학식 II-VII로 구성된 군에서 선택되는 리간드를 갖는 화합물을 포함한다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10}은 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택된다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10} 중 1 이상은 CD_3이다. 바람직하게는, 유기층은 화합물 2-42로 구성된 군에서 선택되는 화합물을 포함한다.

[0135] 추가로, 소자의 유기층은 화학식 II-VII로 구성된 군에서 선택되는 리간드를 갖는 화합물을 포함한다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10}은 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택된다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9 및 R_{10} 중 1 이상은 CD_3을 포함한다.

[0136] 또한, 소자의 유기층은 화학식 III-VIII로 구성된 군에서 선택되는 리간드를 갖는 화합물을 포함할 수 있다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11}은 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택된다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11}은 연결될 수 있다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11}은 융합될 수 있다. R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10} 및 R_{11} 중 1 이상은 CD, CD_2 또는 CD_3을 포함하는 알킬기를 포함한다. 바람직하게는, 유기층은 화합물 43-82로 구성된 군에서 선택되는 화합물을 포함한다.

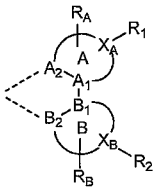
[0137] 일측면에서, 유기층은 화학식 I의 리간드를 갖는 본 명세서에 제공된 화합물을 포함하는 발광층이며, 여기서 화합물은 발광 도펀트이다. 유기층은 호스트를 추가로 포함할 수 있다. 바람직하게는 호스트는 하기 화학식을 갖는다:

[0138] 

[0139] 상기 화학식에서, R'_1, R'_2, R'_3, R'_4, R'_5 및 R'_6은 일치환기, 이치환기, 삼치환기 또는 사치환기를 나타낼 수 있고; R'_1, R'_2, R'_3, R'_4, R'_5 및 R'_6 각각은 독립적으로 수소, 알킬 및 아릴로 구성된 군에서 선택된다. 더욱 바람직하게는, 호스트는 H1이다.

[0140] 상기 소자를 포함하는 소비자 제품도 제공된다. 소자는 애노드, 캐소드, 및 애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기층을 포함한다. 유기층은 상기 설명한 바의 하기 구조를 갖는 리간드를 함유하는 화합물을 포함한다:

[0141] 화학식 I

[0142] 

[0143] 화학식 I을 갖는 리간드를 포함하는 화합물에 바람직한 것으로 기재된 방향족 고리, 금속 및 치환기의 선택은 또한 화학식 I을 갖는 리간드를 포함하는 화합물을 포함하는 소자에 사용하기에 바람직하다. 이들 선택은 금속 M, 고리 A 및 B, 및 치환기 R_A, R_B, A_1, A_2, B_1, B_2, R_1 및 R_2에 대한 선택을 포함한다.

[0144] A 및 B는 독립적으로 5원 또는 6원 방향족 또는 헤테로 방향족 고리를 나타낼 수 있다. 바람직하게는, A는 이미다졸, 피라졸, 트리아졸, 옥사졸, 옥사디아졸, 피리딘, 피리다진, 피리미딘, 피라진 및 트리아진으로 구성된 군에서 선택된다. 바람직하게는, B는 벤젠, 피리딘, 푸란, 피롤 및 티오펜으로 구성된 군에서 선택된다. A_1, A_2, B_1 및 B_2는 독립적으로 C 또는 N이다. R_A 및 R_B는 일치환기, 이치환기 또는 삼치환기를 나타낼 수 있다. X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 헤테로 원자이다. R_A, R_B, R_1 및 R_2는 독립적으로 수소, 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택된다. R_A, R_B, R_1 및 R_2 중 1 이상은 CD, CD_2 또는 CD_3을 포함한다. 바람직하게는, R_A, R_B, R_1 및 R_2 중 1 이상은 CD_3을 포함한다. R_A, R_B, R_1 및 R_2는 연결될 수 있다. R_A, R_B, R_1 및 R_2는 융합될 수 있다. 리간드는 원자량이 40을 초과하는 금속에 배위된다. 바람직하게는, 금속은 Ir이다.

[0145] 일측면에서, X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 N이고, X_A가 N일 경우, R_1은 아릴이다. 다른 측면에서, X_A 및 X_B는 독립적으로 C 또는 N이고, X_A가 N일 경우, R_1은 알킬, 알콕시, 아미노, 알케닐, 알키닐, 아릴킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군에서 선택되는 기로 추가로 치환된 페닐이며, 상기 기는 CD, CD_2 또는 CD_3 중 1 이상을 포함한다.

[0146] 소비자 제품은 화학식 II-VII로 구성된 군에서 선택되는 구조를 갖는 리간드를 포함하는 화합물을 함유하는 유기층을 추가로 포함하는 소자를 포함할 수 있다. 특히, 화합물은 화합물 2-42로 구성된 군에서 선택될 수 있다.

[0147] 또한, 소자의 유기층은 화학식 III-VIII로 구성된 군에서 선택되는 리간드를 갖는 화합물을 포함할 수 있다. 바람직하게는, 유기층은 화합물 43-82로 구성된 군에서 선택되는 화합물을 포함한다.

[0148] 일측면에서, 상기 소자를 포함하는 특정 소비자 제품이 제공된다. 바람직하게는, 소자는 R_A 및 R_B 중 1 이상의 치환기가 고리 A, 고리 B, 또는 고리 A 또는 고리 B에 공액 또는 융합된 고리에 직접 부착된 CD_3인 화합물을 포

함한다.

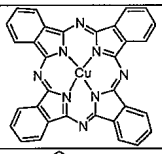
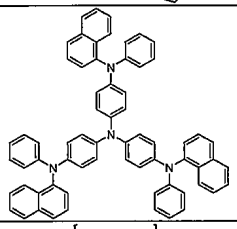
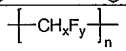
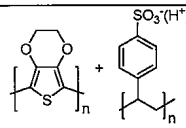
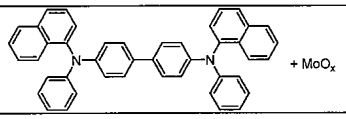
[0149] 상기 논의된 바와 같이, 치환기 R_A 및 R_B는 고리 A 및/또는 고리 B에 융합될 수 있다. 치환기 R_A 및 R_B는 고리 A 및/또는 고리 B에 연결되거나, 융합되거나, 또는 고리 A 및/또는 고리 B에 융합되지 않은 치환기를 비롯한 임의의 치환기일 수 있다.

[0150] 유기 발광 소자 내 특정 층에 유용한 것으로 본 명세서에 기재된 재료는 소자에 존재하는 매우 다양한 다른 재료와 함께 사용할 수 있다. 예컨대, 본 명세서에 개시된 발광성 도펀트는 매우 다양한 호스트, 수송층, 차단층, 주입층, 전극 및 존재할 수 있는 다른 층과 함께 사용할 수 있다. 하기에 언급 또는 기재된 재료는 본 명세서에 개시된 화합물과 조합시 유용할 수 있는 재료의 비한정적인 예이며, 당업자는 조합시 유용할 수 있는 다른 재료를 확인하기 위해 문헌을 용이하게 참고할 수 있다.

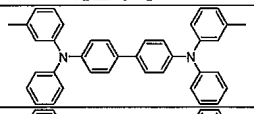
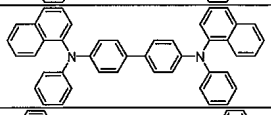
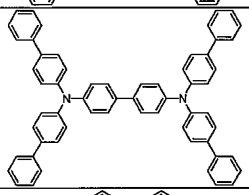
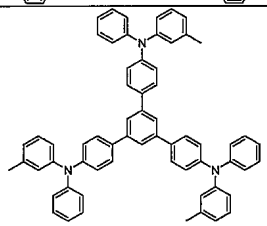
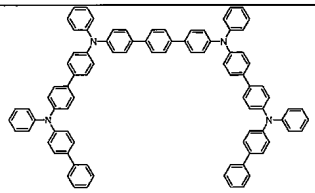
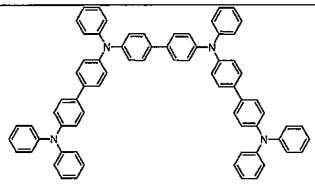
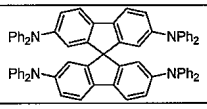
[0151] 본 명세서에 개시된 재료 외에 및/또는 이와 함께, 다수의 정공 주입 재료, 정공 수송 재료, 호스트 재료, 도펀트 재료, 여기자/정공 차단층 재료, 전자 수송 및 전자 주입 재료를 OLED에 사용할 수 있다. 본 명세서에 개시된 재료와 함께 OLED에 사용할 수 있는 재료의 비제한적인 예를 하기 표 1에 기재한다. 표 1은 재료의 비제한적인 부류 및 각각의 부류에 대한 화합물의 비제한적인 예, 및 재료를 개시하는 참고 문헌을 기재한다.

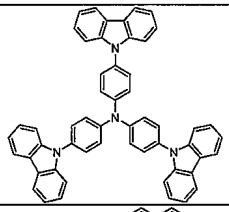
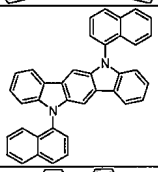
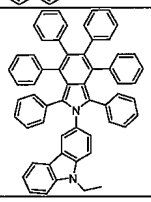
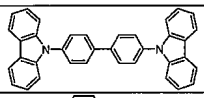
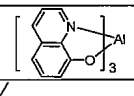
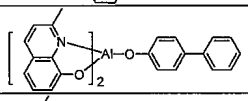
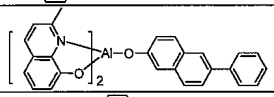
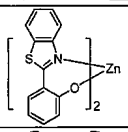
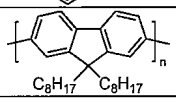
표 1

[0152]

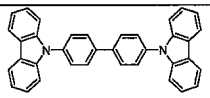
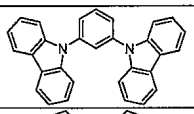
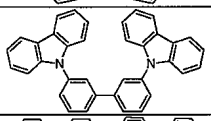
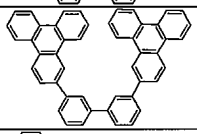
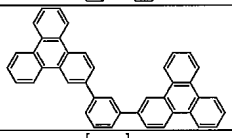
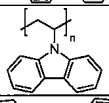
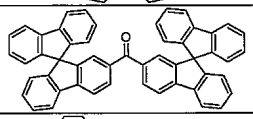
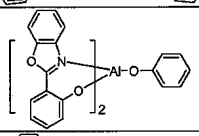
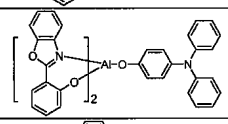
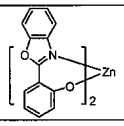
재료	재료의 예	공개 문헌
정공 주입 재료		
프탈로시아닌 및 포르피린 화합물		Appl. Phys. Lett. 69, 2160 (1996)
성화 트리아릴아민		J. Lumin. 72-74, 985 (1997)
CFx 플루오르화 탄화수소 중합체		Appl. Phys. Lett. 78, 673 (2001)
전도성 중합체 (예, PEDOT: PSS, 폴리아닐린, 폴리티오펜)		Synth. Met. 87, 171 (1997)
산화몰리브덴 및 산화텅스텐과 같은 금속 산화물로 착화된 아릴아민		SID Symposium Digest, 37, 923 (2006)
정공 수송 재료		

[0153]

재료	재료의 예	공개 문헌
트리아릴아민 (예, TPD, α-NPD)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987)
		US5061569
		EP650955
		J. Mater. Chem. 3, 319 (1993)
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)
스피로플루오렌 코어 상의 트리아릴아민		Synth. Met. 91, 209 (1997)

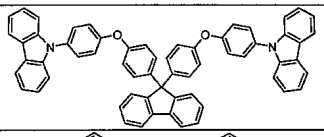
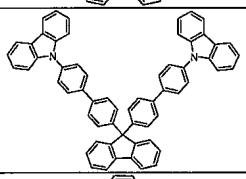
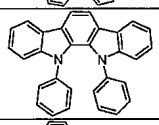
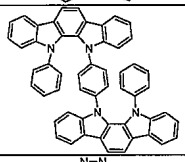
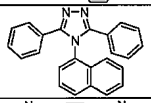
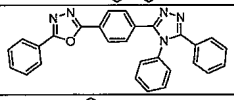
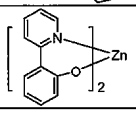
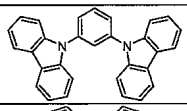
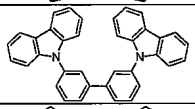
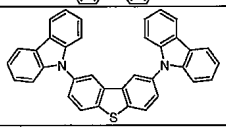
재료	재료의 예	공개 문헌
아릴아민 카르바졸 화합물		Adv. Mater. 6, 677 (1994)
인돌로카르바졸		Synth. Met. 111, 421 (2000)
이소인돌 화합물		Chem. Mater. 15, 3148 (2003)
인광성 OLED 호스트 재료		
적색 호스트		
아릴카르바졸		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
금속 8-히드록시퀴놀레이트 (예, Alq_3, BAlq)		Nature 395, 151 (1998)
		US20060202194
		WO2005014551
금속 페녹시벤조티아졸 화합물		Appl. Phys. Lett. 90, 123509 (2007)
공액 올리고머 및 중합체 (예, 폴리플루오렌)		Org. Electron. 1, 15 (2000)
녹색 호스트		

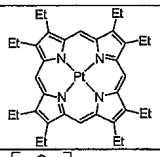
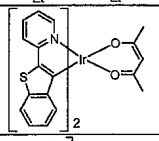
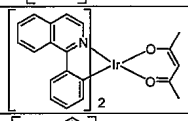
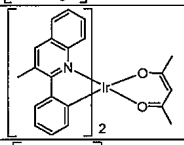
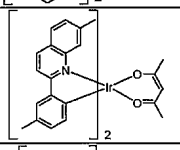
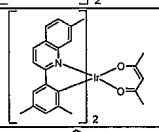
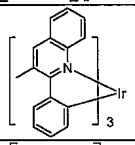
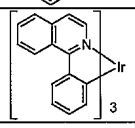
[0154]

재료	재료의 예	공개 문헌
아릴카르바졸		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US2003175553
		WO2001039234
아릴트리페닐렌 화합물		US20060280965
		US20060280965
중합체(예, PVK)		Appl. Phys. Lett. 77, 2280 (2000)
스피로플루오렌 화합물		WO2004093207
금속 페녹시벤조옥사졸 화합물		WO05089025
		WO06132173
		JP200511610

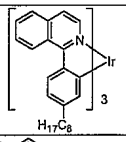
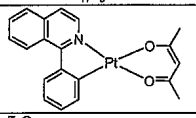
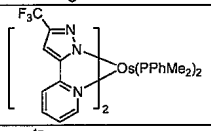
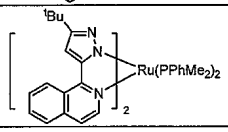
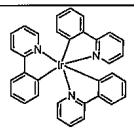
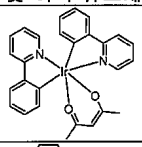
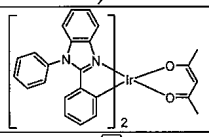
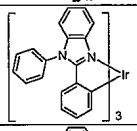
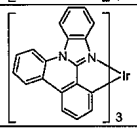
[0155]

[0156]

재료	재료의 예	공개 문헌
스피로플루오렌-카르바졸 화합물		JP2007254297
		JP2007254297
인돌로카르바졸		WO07063796
		WO07063754
5원 고리 전자 부족 복소환(예, 트리아졸, 옥사디아졸)		J. Appl. Phys. 90, 5048 (2001)
		WO04107822
금속 페녹시피리딘 화합물		WO05030900
청색 호스트		
아릴카르바졸		Appl. Phys. Lett, 82, 2422 (2003)
		US20070190359
디벤조티오펜-카르바졸 화합물		WO2006114966

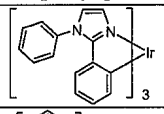
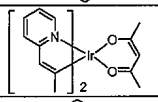
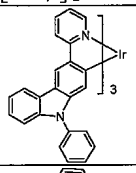
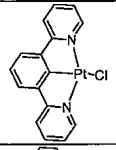
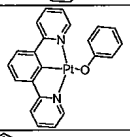
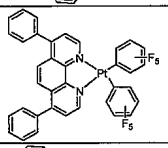
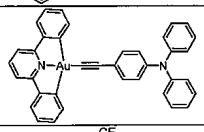
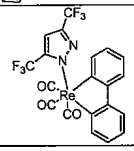
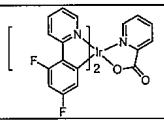
재료	재료의 예	공개 문헌
인광성 도펀트		
적색 도펀트		
중금속 포르피린 (예, PtOEP)		Nature 395, 151 (1998)
이리듐(III) 유기 금속 착체		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US06835469
		US06835469
		US20060202194
		US20060202194
		US07087321
		US07087321

[0157]

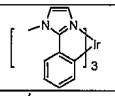
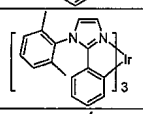
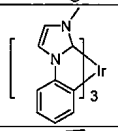
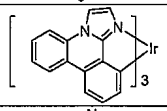
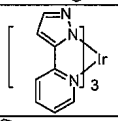
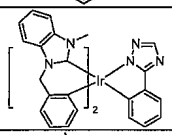
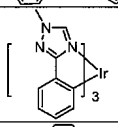
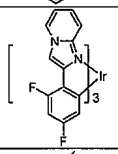
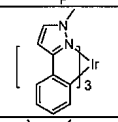
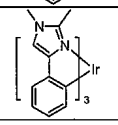
재료	재료의 예	공개 문헌
		Adv. Mater. 19, 739 (2007)
백금(II) 유기 금속 착체		WO2003040257
오스뮴(III) 착체		Chem. Mater. 17, 3532 (2005)
루테늄(II) 착체		Adv. Mater. 17, 1059 (2005)
녹색 도펀트		
이리듐(III) 유기 금속 착체	 및 이의 유도체	Inorg. Chem. 40, 1704 (2001)
		US2002034656
		US06687266
		Chem. Mater. 16, 2480 (2004)
		US2007190359

[0158]

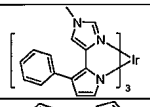
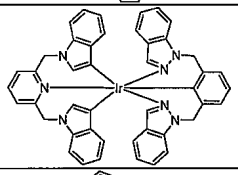
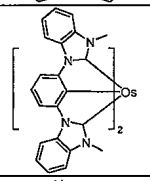
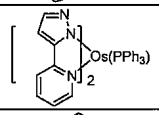
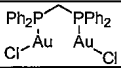
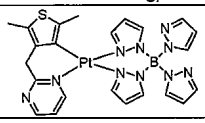
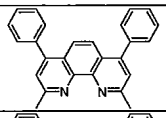
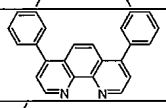
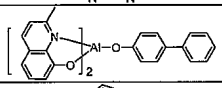
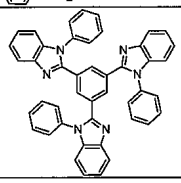
[0159]

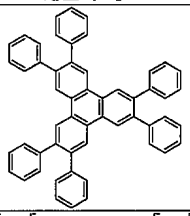
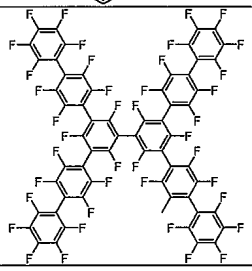
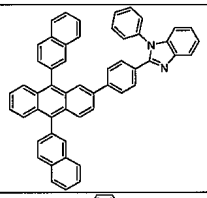
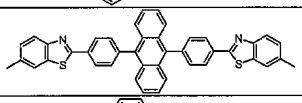
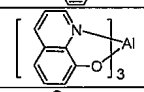
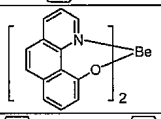
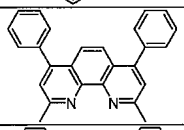
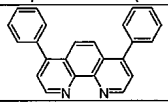
재료	재료의 예	공개 문헌
		US 2006008670 JP2007123392
		Adv. Mater. 16, 2003 (2004)
		Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7800
백금(II) 유기 금속 착체		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Chem. Lett. 34, 592 (2005)
금 착체		Chem. Commun. 2906 (2005)
레늄(III) 착체		Inorg. Chem. 42, 1248 (2003)
청색 도펀트		
이리듐(III) 유기 금속 착체		WO2002002714

[0160]

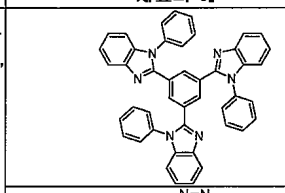
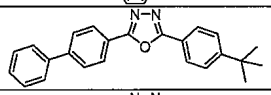
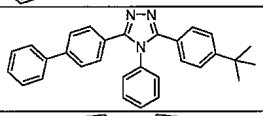
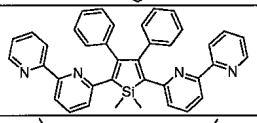
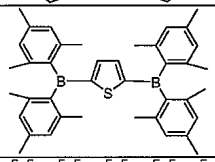
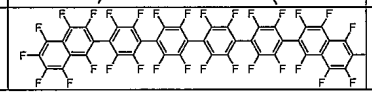
재료	재료의 예	공개 문헌
		WO2006009024
		US2006251923
		WO2006056418, US2005260441
		US2007190359
		US2002134984
		Angew. Chem. Int. Ed. 47, 1 (2008)
		Chem. Mater. 18, 5119 (2006)
		Inorg. Chem. 46, 4308 (2007)
		WO05123873
		WO05123873

[0161]

재료	재료의 예	공개 문헌
		WO07004380
		WO06082742
오스뮴(II) 착체		US2005260449
		Organometallics 23, 3745 (2004)
금 착체		Appl. Phys. Lett.74,1361 (1999)
백금(II) 착체		WO06098120, WO06103874
여기자/정공 차단 층 재료		
바소쿠프린(bathocuprine) 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)
트리아졸, 옥사디아졸, 이미다졸, 벤조이미다졸과 같은 5원 고리 전자 부족 복소환		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)

재료	재료의 예	공개 문헌
트리페닐렌 화합물		US20050025993
플루오르화 방향족 화합물		Appl. Phys. Lett. 79, 156 (2001)
전자 수송 재료		
안트라센-벤조이미다졸 화합물		WO03060956
안트라센-벤조티아졸 화합물		Appl. Phys. Lett. 89, 063504 (2006)
금속 8-히드록시퀴놀레이트(예, Alq3)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987)
금속 히드록시벤조퀴놀레이트		Chem. Lett. 5, 905 (1993)
BCP, BPhen 등과 같은 바소쿠프린 화합물		Appl. Phys. Lett. 91, 263503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)

[0162]

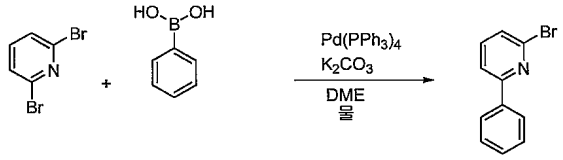
재료	재료의 예	공개 문헌
5원 고리 전자 부족 복소환(예, 트리아졸, 옥사디아졸, 이미다졸, 벤조이미다졸)		Appl. Phys. Lett. 74, 865 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 55, 1489 (1989)
		Jpn. J. Apply. Phys. 32, L917 (1993)
실롤 화합물		Org. Electron. 4, 113 (2003)
아릴보란 화합물		J. Am. Chem. Soc. 120, 9714 (1998)
플루오르화 방향족 화합물		J. Am. Chem. Soc. 122, 1832 (2000)

[0163]

[0164] 실험

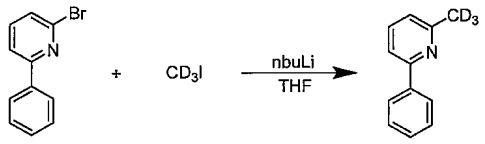
[0165] 화합물 실시예

[0166] **실시예 1. 화합물 10의 합성**



[0167]

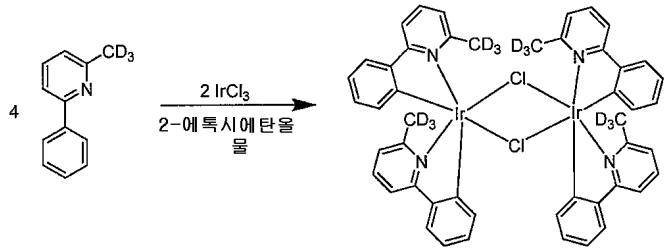
[0168] **2-브로모-6-페닐피리딘의 합성.** 응축기, 질소 입구 및 2개의 스토퍼가 장착된 1ℓ 짜리 3구 둥근 바닥 플라스크에, 228 mℓ의 디메톡시에탄 및 150 mℓ의 물 중 2,6-디브로모피리딘(15.3 g, 64.58 mmol), 페닐보론산(7.87 g, 64.58 mmol) 및 탄산칼륨(17.85 g, 129.16 mmol)을 첨가하였다. 15 분 동안 질소를 혼합물에 직접 기포 발생시켰다. 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)을 첨가하고(1.85 g, 1.60 mmol), 반응 혼합물을 가열 환류시켰다. 가열 3 시간 후 반응이 완료되었다. 이를 실온으로 냉각시키고, 물 및 아세트산에틸로 희석하였다. 층을 분리하고, 수상을 아세트산에틸로 추출하였다. 유기층을 황산마그네슘 상에서 건조시키고, 여과하고, 증발시켰다. 2% 아세트산에틸/헥산으로 용리하는 컬럼 크로마토그래피 후 150℃에서의 쿠겔로(Kugelrohr)를 이용하는 진공 증류에 의해 재료를 정제하여 생성물을 수집하였다. 5.2 g의 생성물을 얻었다(34%)



[0169]

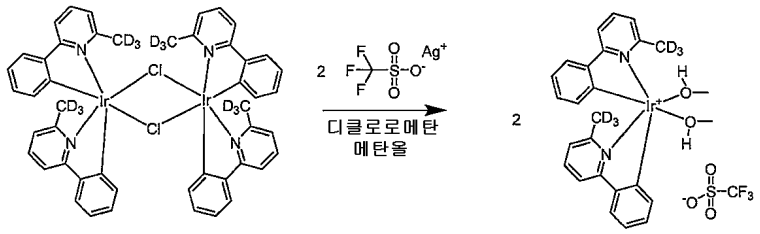
[0170] **2-페닐-6-메틸-d_3-페닐피리딘.** 적하 깔때기, 질소 입구 및 스토퍼가 장착된 500 mℓ짜리 3구 둥근 바닥 플라스크를 진공 하에서 힛건(heat gun)으로 가열하여 건조시켰다. 냉각된 건조 플라스크에 2-브로모-6-페닐피리딘(11.3 g, 48.27 mmol) 및 100 mℓ의 무수 THF를 첨가하였다. 용액을 질소 분위기 하에서 건조 얼음/아세톤 조에서 냉각시키고, 요오도메탄-d_3을 적가하였다(6 mℓ, 96.54 mmol). 용액을 1 시간 동안 냉각 교반한 후, 실온으로 밤새 승온시켰다. 이를 물로 희석하고, 아세트산에틸로 2 회 추출하였다. 유기층을 황산마그네슘 상에서 건조시키고, 여과하고, 증발시켰다. 미정제 생성물을 2% 아세트산에틸/헥산으로 2 회 용리하는 컬럼 크로마토그래피에 의해

정제하였다. 5.8 g의 2-페닐-6-메틸-d_3-피리딘을 얻었다(70%).



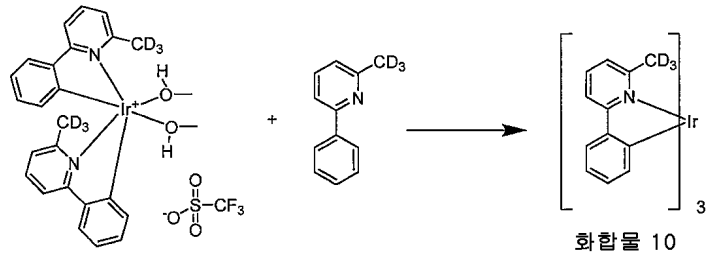
[0171]

[0172] **이량체의 합성.** 2-페닐-6-메틸(d_3)피리딘(1.65 g, 9.58 mmol), 염화이리듐(1.6 g, 4.35 mmol) 및 30 ㎖의 2-에톡시에탄올의 혼합물을 질소 분위기 하에서 밤새 가열 환류시켰다. 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 적색 고체를 여과하였다. 고체를 메탄올 및 헥산으로 세정하고, 연기 후드에서 공기 건조시켰다. 1.09 g의 이량체의 생성물을 얻었고(44%), 이를 다음 단계에서 그대로 사용하였다.



[0173]

[0174] **트리플레이트 중간체의 합성.** 250 ㎖의 둥근 바닥 플라스크에 이량체(1.09 g, 0.956 mmol)와 125 ㎖의 디클로로메탄의 혼합물을 제조하였다. 10 ㎖의 메탄올 중 은 트리플레이트(0.51 g, 2.00 mmol)를 적색 혼합물에 첨가하자, 이는 녹색으로 변하였다. 플라스크의 내용물을 질소 분위기 하에서 실온에서 밤새 교반하였다. 혼합물을 셀라이트 패드를 통해 여과하고, 셀라이트를 디클로로메탄으로 세정하였다. 여액을 증발시켜 녹색이 나는 황색 고체를 얻었다. 고체를 고진공 하에서 건조시켰다. 1 g의 고체를 얻었고(71%), 이를 다음 반응에서 그대로 사용하였다.

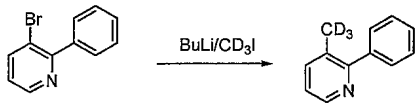


화합물 10

[0175]

[0176] **화합물 10의 합성.** 50 ㎖ 유리 관에 트리플레이트 착체(1 g, 1.3 mmol) 및 2-페닐-6-메틸(d_3)피리딘(0.7 g, 4.0 mmol)을 첨가하고, 관을 배기시키고, 질소로 대체하였다. 이 절차를 반복하고, 관을 이어서 질소 분위기 하에서 밤새 200℃로 가열하였다. 관을 냉각시키고, 디클로로메탄을 첨가하여 재료를 용해시키고 플라스크에 옮겼다. 미정제 생성물을 20, 40 및 50% 디클로로메탄/헥산으로 용리하는 컬럼 크로마토그래피 후 250℃에서의 승화에 의해 정제하였다. 승화 후 0.58 g의 생성물을 얻었다(63%)

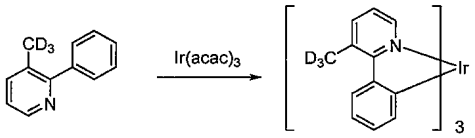
[0177] **실시예 2. 화합물 13의 합성**



[0178]

[0179] **3-메틸-d_3-2-페닐피리딘의 합성.** 3-브로모-2-페닐피리딘(9.9 g, 42 mmol)을 100 ㎖의 테트라히드로푸란에 용해시키고, -78℃로 냉각시켰다. 용액에 BuLi(26.4 ㎖, 헥산 중 1.6 M)를 적가하였다. 첨가가 완료된 후, 반응 혼합물을 1 시간 동안 -78℃에서 교반하였다. 요오드화메틸-d_3(9.3 g, 63 mmol)을 첨가하고, 2 시간 동안 실온으

로 승온시켰다. 그 다음, 반응물을 물로 급냉시키고, 아세트산에틸로 추출하였다. 미정제 생성물을 용리액으로서 헥산 및 아세트산에틸을 사용하는 컬럼에 의해 정제하였다. 2.3 g의 순수한 생성물을 정제 후 얻었다.

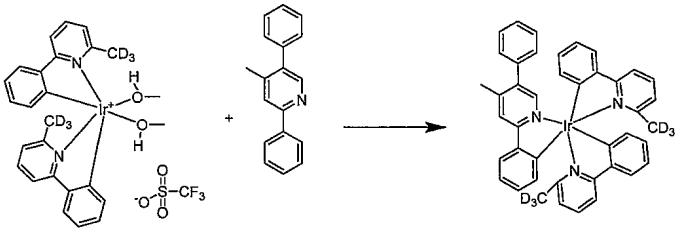


화합물 13

[0180]

[0181] **화합물 13의 합성.** 3-메틸-d_3-2-페닐피리딘(1.8 g, 10.4 mmol) 및 $Ir(acac)_3$(0.64 g, 1.3 mmol)을 질소 분위기 하에서 48 시간 동안 260℃로 가열하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 디클로로메탄을 첨가하여 생성물을 용해시켰다. 그 다음, 디클로로메탄 용액을 헥산에 부었다. 침전을 수집하고, 실리카겔 마개를 통해 흘렸다. 0.6 g의 생성물을 얻었다. 생성물을 1,2-디클로로벤젠으로부터의 재결정화에 의해 추가로 정제하였다.

[0182] **실시예 3. 화합물 27의 합성**

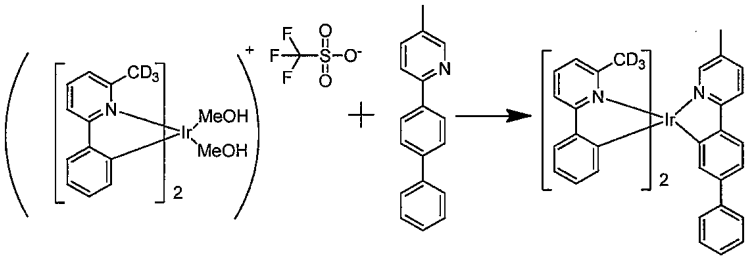


화합물 27

[0183]

[0184] **화합물 27의 합성.** 트리플레이트 착체(1.4 g), 4-메틸-2,5-디페닐피리딘(1.5 g) 및 50 ㎖의 에탄올을 혼합하고, 질소 분위기 하에서 밤새 가열 환류시켰다. 침전을 여과하였다. 미정제 재료를 50% 디클로로메탄/헥산으로 용리하는 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하였다. 1.1 g의 소정 생성물을 얻었다.

[0185] **실시예 4. 화합물 43의 합성**

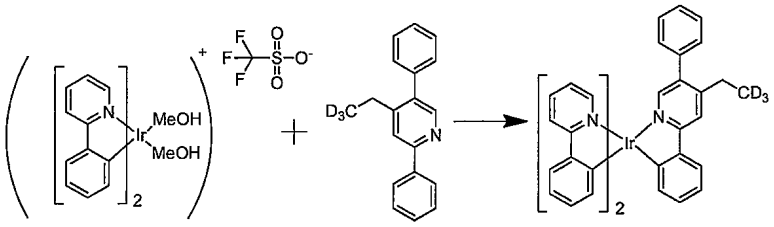


화합물 43

[0186]

[0187] **화합물 43의 합성.** 이리듐 트리플레이트 착체(1.0 g, 1.3 mmol) 및 2-비페닐-4-메틸피리딘(1.0 g, 4 mmol)을 100 ㎖ 둥근 바닥 플라스크에 넣었다. 20 ㎖의 에탄올 및 메탄올의 50:50 용액을 플라스크에 첨가하였다. 반응 혼합물을 8 시간 동안 환류시켰다. 그 다음, 반응 혼합물을 실온으로 냉각시켰다. 반응 혼합물을 실리카 마개에 붓고, 에탄올로 세정한 후, 헥산으로 세정하였다. 여액을 버렸다. 그 다음, 마개를 디클로로메탄으로 세정하여 생성물을 용리하였다. 여액으로부터의 용매를 회전 증발기 상에서 제거하였다. 생성물을 용리액으로서 50:50 디클로로메탄 및 헥산으로의 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 추가로 정제하여 0.5 g(50% 수율)의 생성물을 얻었다.

[0188] **실시예 5. 화합물 50의 합성**



화합물 50

[0189]

[0190] **화합물 50의 합성.** 이리듐 트리플레이트 착체(6.58 g, 9.2 mmol) 및 4-(에틸,d_3)-2,5-디페닐피리딘(6.58 g, 25.0 mmol)을 100 ㎖ 둥근 바닥 플라스크에 넣었다. 140 ㎖의 에탄올 및 메탄올의 50:50 용액을 플라스크에 첨가하였다. 반응 혼합물을 8 시간 동안 환류시켰다. 그 다음, 반응 혼합물을 실온으로 냉각시켰다. 반응 혼합물을 실리카 마개에 붓고, 에탄올로 세정한 후, 헥산으로 세정하였다. 여액을 버렸다. 그 다음, 마개를 디클로로메탄으로 세정하여 생성물을 용리하였다. 여액으로부터의 용매를 회전 증발기 상에서 제거하였다. 생성물을 용리액으로서의 50:50 디클로로메탄 및 헥산으로의 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 추가로 정제하여 3.8 g(54% 수율)의 생성물을 얻었다.

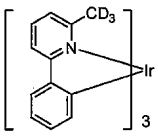
[0191] 소자 실시예

[0192] 모든 소자는 고진공(<10^{-7} Torr) 열 증발에 의해 제작하였다. 애노드 전극은 1200Å의 산화인듐주석(ITO)이었다. 캐소드는 10Å의 LiF 다음에 1000Å의 Al로 구성되었다. 모든 소자를 제작 직후 질소 글러브 박스(<1 ppm의 H_2O 및 O_2) 내에 에폭시 수지로 밀봉된 유리 뚜껑으로 캡슐화하고, 습기 게터(getter)를 패키지 내부에 삽입하였다.

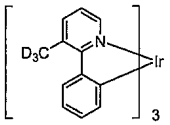
[0193] 본 발명의 화합물인 화합물 10, 화합물 13 및 화합물 27이 발광 도펀트이고 H1이 호스트인 특정 소자를 제공하였다. 모든 소자 실시예는 ITO 표면으로부터 순차로 정공 주입층(HIL)으로서의 100Å의 E1, 정공 수송층(HTL)으로서의 300Å의 4,4'-비스-[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(α-NPD), 300Å의 H1, 발광층(EML)로서의 7% 또는 10%의 본 발명의 화합물로 도핑된 호스트 재료, 차단층(BL)으로서의 50Å의 H1, 및 ETL로서의 400Å의 Alq_3(트리스-8-히드록시퀴놀린 알루미늄)으로 구성된 유기 적층물을 가졌다.

[0194] EML 및 BL에 사용한 재료가 상이한 것 외에는, 비교예 1-5는 소자 실시예와 유사하게 제작하였다. 특히, E1, E2 또는 E3을 비교예 1, 2, 3, 4 및 5의 EML에 사용된 발광 도펀트로서 사용하였다. 또한, HPT가 비교예 3의 BL 재료였다.

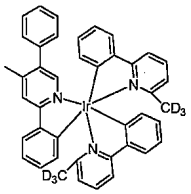
[0195] 본 명세서에서 사용되는 바의 하기 화합물은 하기 구조를 가졌다:



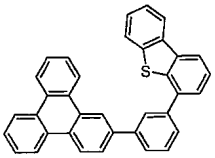
화합물 10



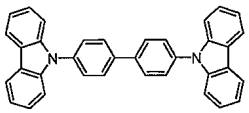
화합물 13



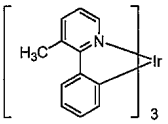
화합물 27



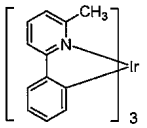
H1



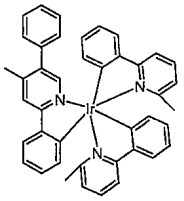
H2



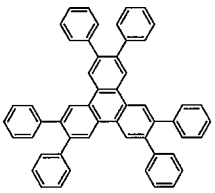
E1



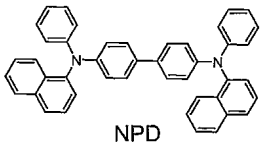
E2



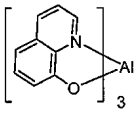
E3



HPT



NPD



Alq

[0196]

[0197] OLED에 사용하기 위한 특정 재료를 제공한다. 특히, 이러한 소자의 발광층(EML)에서의 발광 도펀트로서 재료를 사용할 수 있다. 본 명세서에 제공된 화합물을 사용하여 소자의 색상, 효율 및 수명을 개선시킬 수 있다. Cmpd는 화합물의 약자이다. Ex는 실시예의 약자이다. Comp.는 비교의 약자이다.

표 2

[0198]

실시예	HIL	HTL	호스트	A %	BL	ETL
실시예1	E1 100Å	NPD 300Å	H1	Cmpd 10 7%	H1 50Å	Alq 400Å
실시예2	E1 100Å	NPD 300Å	H1	Cmpd 10 10%	H1 50Å	Alq 400Å
실시예3	E1 100Å	NPD 300Å	H1	Cmpd 13 7%	H1 50Å	Alq 400Å
실시예4	E1100Å	NPD 300Å	H1	Cmpd 13 10%	H1 50Å	Alq 400Å
실시예5	E1 100Å	NPD 300Å	H1	Cmpd 27 7%	H1 50Å	Alq 400Å
실시예6	E1 100Å	NPD 300Å	H1	Cmpd 27 10%	H1 50Å	Alq 400Å
비교예1	E1 100Å	NPD 300Å	H1	E1 7%	H1 50Å	Alq 400Å
비교예2	E1 100Å	NPD 300Å	H1	E1 10%	H1 50Å	Alq 400Å
비교예3	E1 100Å	NPD 300Å	H2	E2 10%	HPT 50Å	Alq 400Å
비교예4	E1 100Å	NPD 300Å	H1	E3 7%	H1 50Å	Alq 400Å
비교예5	E1 100Å	NPD 300Å	H1	E3 10%	H150Å	Alq 400Å

표 3

[0199]

실시예	λ_{max}, nm	FWHM nm	CIE X	CIE Y	1000 nit 에서 V (V)	LE (cd/A)	EQE (%)	PE (lm/W)	40mA/cm²에서 Lo, nits	40mA/cm²에서 $RT_{80\%}$ (h)
실시예 1	510	70	0.290	0.622	5.7	48.7	14.2	26.7	14,486	76
실시예 2	512	68	0.282	0.629	5.2	51.6	14.9	31.2	16,186	67
실시예 3	527	76	0.349	0.610	6.1	54.1	14.9	28.1	15,179	204
실시예 4	527	75	0.350	0.611	5.6	54.3	15	30.2	15,810	220
실시예 5	522	68	0.329	0.623	5.4	66.6	18.2	38.6	18,557	174
실시예 6	526	72	0.342	0.616	4.9	66.5	18.1	42.7	19,885	184
비교예 1	527	72	0.341	0.617	6	55.6	15.2	29.1	16,066	165
비교예 2	527	79	0.344	0.614	6.4	56.7	15.6	27.6	15,436	155
비교예 3	507	68	0.294	0.615	5.8	44.2	13.1	23.9	13,930	14
비교예 4	522	66	0.328	0.624	5.5	65	17.8	37.3	18,170	116
비교예 5	526	72	0.340	0.616	5.1	65.3	17.9	40.4	19,740	128

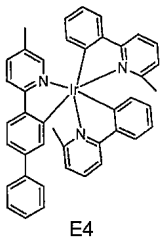
[0200] 소자 실시예 1-6으로부터, 발광 도펀트로서 본 명세서에 제공된 CD_3 화합물은 긴 수명을 제공함을 알 수 있다. 특히, 제공된 화합물을 포함하는 소자 실시예의 수명, $RT_{80\%}$(실온에서 40 mA/㎠의 일정한 전류 밀도에서 이의 값의 80%로 붕괴되기까지의 초기 휘도 L_0에 대해 필요한 시간으로 정의됨)는 상응하는 CH_3 치환된 화합물을 포함하는 비교예보다 특히 높았다. 특정하게는, 상응하는 CH_3 치환된 화합물(E1)을 사용한 비교예 1 및 3에 대한 165 시간 및 155 시간의 $RT_{80\%}$에 비해, 소자 실시예 3 및 4에서 사용된 화합물 13은 각각 240 시간 및 220 시간의 $RT_{80\%}$를 제공하였다.

[0201] 본 명세서에 제공된 화합물을 포함하는 이종 리간드성 CD_3은 개선된 수명 및 효율을 갖는 소자를 제공할 수 있음을 상기 데이터는 또한 증명한다. 특히, 화합물 27을 포함하는 소자 실시예 5 및 6은 상응하는 CH_3 치환된 화합물(E3)을 포함하는 비교예 4 및 5보다 양호한 수명 및 효율을 제공하였다. 특정하게는, 상응하는 메틸 치환된 화합물 E3에 대한 116 시간 및 128 시간의 $RT_{80\%}$에 비해, 화합물 27은 174 시간 및 184 시간의 $RT_{80\%}$를 제공하였다.

[0202] 추가로, 메틸-d_3 치환된 화합물은 개선된 효율을 갖는 소자를 제공하였다. 특히, 화합물 10, 13 및 27은 상응하는 CH_3 치환된 화합물을 사용하는 비교예보다 낮은 작동 전압을 달성하였다. 특정하게는, 화합물 10, 13 및 27은 각각 6.4 V, 5.8 V 및 5.1 V에 비해, 5.2 V, 5.6 V 및 4.9 V의 작동 전압(V)을 제공하였다.

[0203] 본 명세서에 제공된 메틸-d_3 치환된 화합물은 인광성 OLED에 대한 우수한 발광 도펀트일 수 있음을 상기 데이터는 시사한다. 이들 화합물은 개선된 색상, 효율 및 수명을 갖는 소자를 제공한다.

[0204] 본 명세서에서 사용되는 바의 하기 화합물은 하기 구조를 가졌다:

[0205] 
E4

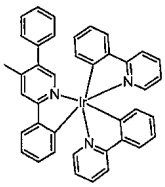

E5

표 4

[0206]

실시예	HIL	HTL	호스트	A %	BL	ETL
실시예 7	E5 100Å	NPD 300Å	H1	Cmpd 43 7%	H1 100Å	Alq 400Å
실시예 8	E5 100Å	NPD 300Å	H1	Cmpd 43 10%	H1 100Å	Alq 400Å
비교예 6	E1100Å	NPD 300Å	H1	E4 7%	H1 100Å	Alq 400Å
비교예 7	E1 100Å	NPD 300Å	H1	E4 10%	H1 100Å	Alq 400Å

표 5

[0207]

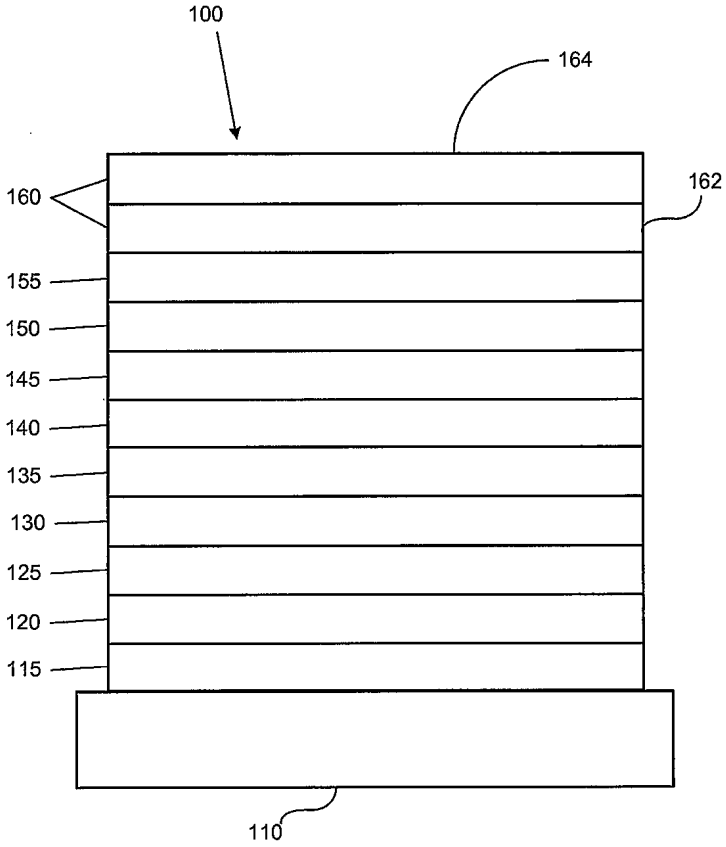
실시예	λ_{max}, nm	FWHM nm	CIE X	CIE Y	1000 nit 에서 V (V)	LE (cd/A)	EQE (%)	PE (lm/W)	40mA/cm²에서 Lo, nits	40mA/cm²에서 RT 80% (h)
실시예 7	534	62	0.368	0.604	6.1	63.3	17.2	32.7	14,037	374
실시예 8	534	64	0.380	0.597	5.3	69	18.8	40.7	18,702	365
비교예 6	534	64	0.380	0.596	5.7	68	18.6	37.3	17,776	212
비교예 7	534	64	0.380	0.597	5.3	68.8	18.8	40.5	19,306	283

[0208] 소자 실시예 7 및 8에서 알 수 있는 바와 같이, 화합물 43은 E4와 유사한 효율 및 색상을 가졌고, 소자 수명은 훨씬 길었다. 소자 실시예 7은 374 시간의 LT_{80}을 나타냈고, 비교예 6은 212 시간의 수명을 나타냈다. 소자 실시예 8은 365 시간의 LT_{80}을 나타냈고, 비교예 7은 283 시간의 수명을 나타냈다. 제공된 메틸-d_3 치환된 화합물이 소자 수명을 개선시킬 수 있음을 소자 데이터는 증명한다.

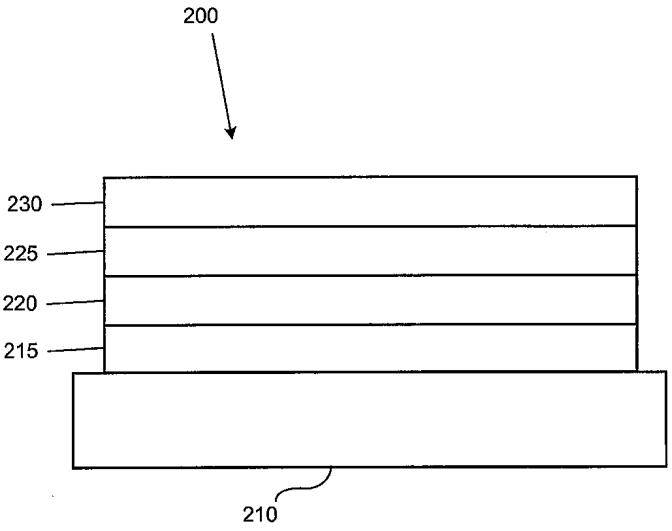
[0209] 본 명세서에 기재된 다양한 구체예는 단지 예이며, 본 발명의 범위를 한정하려 하는 것이 아님을 이해해야 한다. 예컨대, 본 명세서에 기재된 재료 및 구조 중 다수를 본 발명의 사상에서 벗어나지 않는 다른 재료 및 구조로 대체할 수 있다. 따라서, 청구된 바의 본 발명은 당업자에게 명백한 바와 같이 본 명세서에 기재된 특정 예 및 바람직한 구체예로부터의 변경을 포함할 수 있다. 본 발명이 작용하는 다양한 이론은 한정하려는 것이 아님을 이해해야 한다.

도면

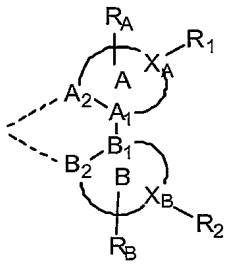
도면1


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

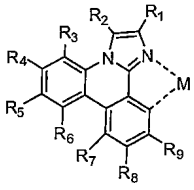
도면2


200
230
225
220
215
210

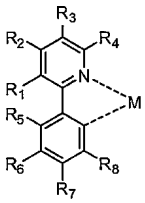
도면3



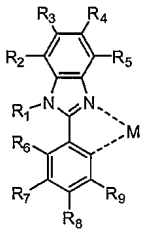
도면4



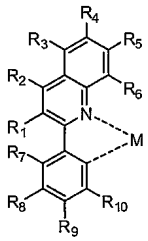
III



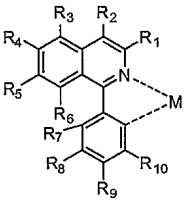
IV



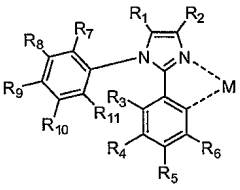
V



VI



VII



VIII