



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2019년09월26일
 (11) 등록번호 10-2025997
 (24) 등록일자 2019년09월20일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 495/04 (2006.01) *C07D 209/82* (2006.01)
C07D 491/048 (2006.01) *C07D 519/00* (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
- (52) CPC특허분류
C07D 495/04 (2013.01)
C07D 209/82 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2017-7014657(분할)
 (22) 출원일자(국제) 2010년01월15일
 심사청구일자 2017년05월29일
 (85) 번역문제출일자 2017년05월29일
 (65) 공개번호 10-2017-0062553
 (43) 공개일자 2017년06월07일
 (62) 원출원 특허 10-2016-7000714
 원출원일자(국제) 2010년01월15일
 심사청구일자 2016년01월11일
 (86) 국제출원번호 PCT/US2010/021111
 (87) 국제공개번호 WO 2010/083359
 국제공개일자 2010년07월22일
- (30) 우선권주장
 61/145,370 2009년01월16일 미국(US)
 12/647,927 2009년12월28일 미국(US)
- (56) 선행기술조사문헌
 JP2008074939 A*
 *는 심사관에 의하여 인용된 문헌
- (73) 특허권자
유니버설 디스플레이 코퍼레이션
 미국, 뉴저지 08618, 유잉, 필립스 불바르 375
- (72) 발명자
린 춘
 미국 19047 펜실베이니아주 랑혼 하퍼스 크로싱 1210
마 빈
 미국 08550 뉴저지주 웨스트 윈저 테일러 코트 9232
 (뒷면에 계속)
- (74) 대리인
김진희, 김태홍

전체 청구항 수 : 총 15 항

심사관 : 정현아

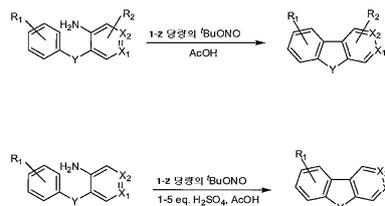
(54) 발명의 명칭 **아자-디벤조티오펜 또는 아자-디벤조푸란 코어를 갖는 PHOLED용 신규 물질**

(57) 요약

아자-디벤조티오펜 또는 아자-디벤조푸란을 함유하는 새로운 부류의 화합물이 제공된다. 상기 화합물은 향상된 안정성, 향상된 효율, 긴 수명 및 낮은 작동 전압을 제공하는 유기 발광 디바이스에 사용될 수 있다. 특히, 상기 화합물은 호스트 및 발광성 도판트를 갖는 발광층의 호스트 물질로서, 또는 강화층에서의 물질로서 사용될 수 있다

(뒷면에 계속)

대표도 - 도4



다.

(52) CPC특허분류

C07D 491/048 (2013.01)
C09K 11/06 (2013.01)
H01L 51/0071 (2013.01)
H01L 51/5012 (2013.01)
C09K 2211/1011 (2013.01)
C09K 2211/1029 (2013.01)
C09K 2211/1033 (2013.01)
C09K 2211/1037 (2013.01)
H01L 2924/12044 (2013.01)

(72) 발명자

광 레이먼드

미국 08536 뉴저지주 플레인스보로 버 코트 1

다트킨 보리소비치

미국 19002 펜실베이니아주 앰블러 도그우드 드라이브 504

용강 우

미국 08618 뉴저지주 유잉 필립스 블러바드 375

엘세나위 제인엡 엠

미국 18966 펜실베이니아주 홀란드 아담스 코트 583

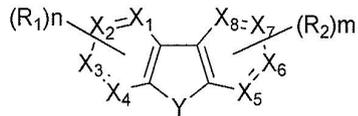
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 (I)을 갖는 화합물:

화학식 (I)



상기 식 중,

m 및 n은 0, 1, 2, 3 또는 4이며;

m+n은 1 이상이고;

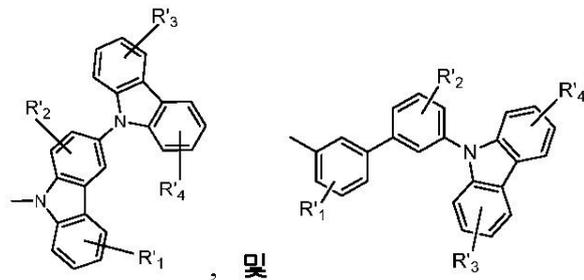
X1, X2, X3, X4, X5, X6, X7 및 X8은 독립적으로 탄소 원자 및 질소 원자로 구성된 군으로부터 선택되고;

X1, X2, X3, X4, X5, X6, X7 및 X8 중 2개는 질소 원자이며;

Y는 S 또는 O이고;

R1 및 R2는 독립적으로 수소, 알킬, 아릴 및 할라이드로 구성된 군으로부터 선택되고;

R1 및 R2 중 1 이상은



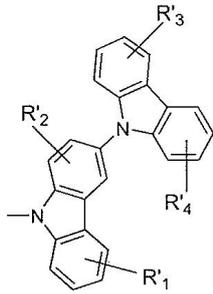
로 구성된 군으로부터 선택되며; 여기서

R'1, R'2, R'3 및 R'4는 1개, 2개, 3개, 또는 4개의 치환 또는 비치환을 나타내고,

R'1, R'2, R'3 및 R'4는 독립적으로 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군으로부터 선택된다.

청구항 2

제1항에 있어서, R₁ 및 R₂ 중 1 이상은



인 화합물.

청구항 3

제2항에 있어서, m 및 n은 0, 1, 2, 3 또는 4이며, m+n은 2 이상이고 m+n은 6 이하인 것인 화합물.

청구항 4

유기 발광 디바이스를 포함하는 제1 디바이스로서,

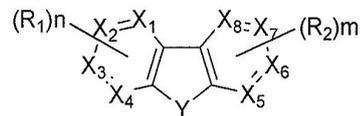
애노드;

캐소드; 및

상기 애노드와 캐소드 사이에 위치하는 유기층으로서, 하기 화학식 (I)을 갖는 화합물을 추가로 포함하는 유기층

을 추가로 포함하는 제1 디바이스:

화학식 (I)



상기 식 중,

m 및 n은 0, 1, 2, 3 또는 4이며;

m+n은 1 이상이고;

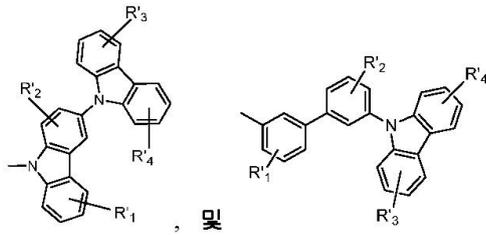
X₁, X₂, X₃, X₄, X₅, X₆, X₇ 및 X₈은 독립적으로 탄소 원자 및 질소 원자로 구성된 군으로부터 선택되고;

X₁, X₂, X₃, X₄, X₅, X₆, X₇ 및 X₈ 중 2개는 질소 원자이며;

Y는 S 또는 O이고;

R₁ 및 R₂는 독립적으로 수소, 알킬, 아릴 및 할라이드로 구성된 군으로부터 선택되고;

R₁ 및 R₂ 중 1 이상은



로 구성된 군으로부터 선택되며; 여기서

R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 1개, 2개, 3개, 또는 4개의 치환 또는 비치환을 나타내고,

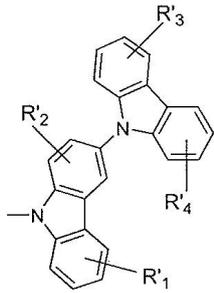
R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 독립적으로 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군으로부터 선택된다.

청구항 5

제4항에 있어서, 상기 제1 디바이스가 소비 제품인 제1 디바이스.

청구항 6

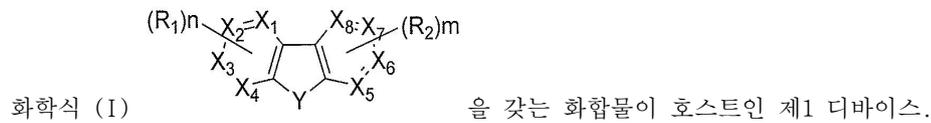
제4항에 있어서, R₁ 및 R₂ 중 1 이상은



인 제1 디바이스.

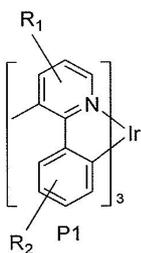
청구항 7

제4항에 있어서, 상기 유기층이 발광층이고,



청구항 8

제4항에 있어서, 상기 유기층은 발광성 도판트를 추가로 포함하고, 상기 발광성 도판트는 하기 화학식을 갖는 것인 제1 디바이스:

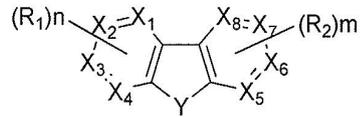


상기 식 중, 발광성 도판트의 R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 수소, 알킬 및 아릴로 구성된 군으로부터 선택된다.

청구항 9

하기 화학식 (I)을 갖는 화합물:

화학식 (I)



상기 식 중,

m 및 n은 0, 1, 2, 3 또는 4이며;

m+n은 1 이상이고;

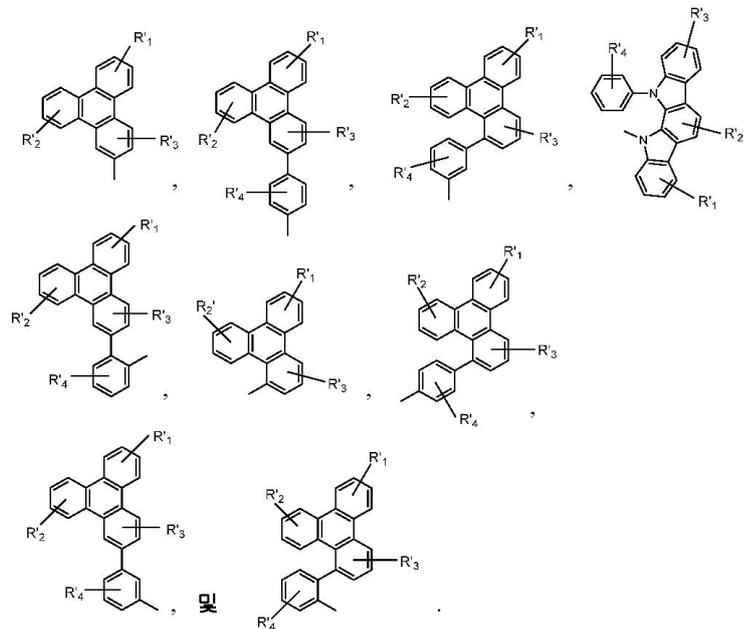
X₁, X₂, X₃, X₄, X₅, X₆, X₇ 및 X₈은 독립적으로 탄소 원자 및 질소 원자로 구성된 군으로부터 선택되고;

X₁, X₂, X₃, X₄, X₅, X₆, X₇ 및 X₈ 중 2개는 질소 원자이며;

Y는 S 또는 O이고;

R₁ 및 R₂는 독립적으로 수소, 알킬, 아릴 및 할라이드로 구성된 군으로부터 선택되고;

R₁ 및 R₂ 중 1 이상은



로 구성된 군으로부터 선택되며; 여기서

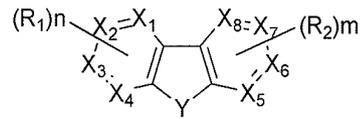
R'₁, R'₂, R'₃ 및 R'₄는 1개, 2개, 3개, 또는 4개의 치환 또는 비치환을 나타내고,

R'₁, R'₂, R'₃ 및 R'₄는 독립적으로 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군으로부터 선택된다.

청구항 10

하기 화학식 (I)을 갖는 화합물:

화학식 (I)



상기 식 중,

m 및 n은 0, 1, 2, 3 또는 4이며;

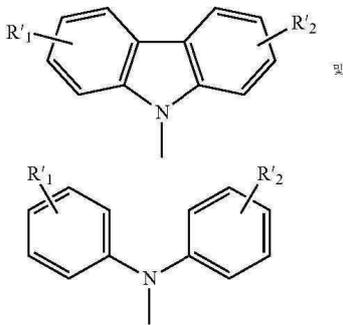
m+n은 1 이상이고;

X₁, X₂, X₃, X₄, X₅, X₆, X₇ 및 X₈은 독립적으로 탄소 원자 및 질소 원자로 구성된 군으로부터 선택되고;

X₁, X₂, X₃, X₄, X₅, X₆, X₇ 및 X₈ 중 2개는 질소 원자이며;

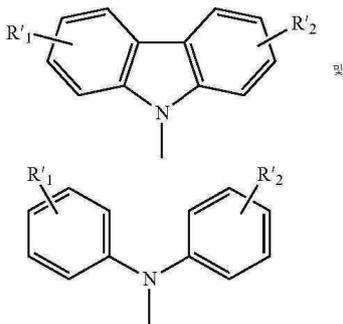
Y는 S 또는 O이고;

R₁ 및 R₂는 독립적으로 수소, 알킬, 아릴, 할라이드,



로 구성된 군으로부터 선택되고;

상기 화합물에 존재하는 R₁ 및 R₂ 중 1 이상은



로 구성된 군으로부터 선택되며; 여기서

R'₁ 및 R'₂는 1개, 2개, 3개, 또는 4개의 치환 또는 비치환을 나타내고,

R'₁ 및 R'₂는 독립적으로 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군으로부터 선택된다.

청구항 11

제10항에 있어서, m+n은 2 이상이고 m+n은 6 이하인 것인 화합물.

청구항 12

제1 유기 발광 디바이스를 포함하는 제1 디바이스로서,

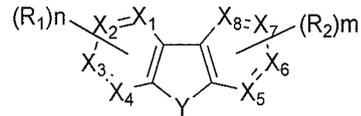
애노드;

캐소드; 및

상기 애노드와 캐소드 사이에 위치하는 유기층으로서, 하기 화학식 (I)을 갖는 화합물을 추가로 포함하는 유기층

을 추가로 포함하는 제1 디바이스:

화학식 (I)



상기 식 중,

m 및 n은 0, 1, 2, 3 또는 4이며;

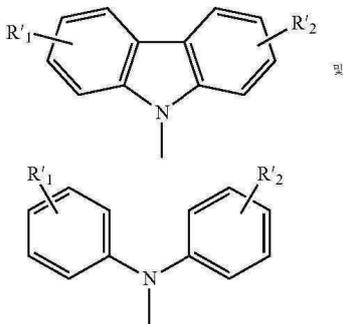
m+n은 1 이상이고;

X1, X2, X3, X4, X5, X6, X7 및 X8은 독립적으로 탄소 원자 및 질소 원자로 구성된 군으로부터 선택되고;

X1, X2, X3, X4, X5, X6, X7 및 X8 중 2개는 질소 원자이며;

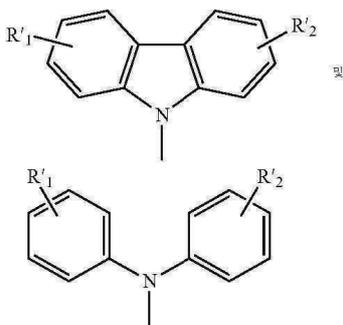
Y는 S 또는 O이고;

R1 및 R2는 독립적으로 수소, 알킬, 아릴, 할라이드,



로 구성된 군으로부터 선택되고;

상기 화합물에 존재하는 R1 및 R2 중 1 이상은



로 구성된 군으로부터 선택되며; 여기서

R'₁ 및 R'₂는 1개, 2개, 3개, 또는 4개의 치환 또는 비치환을 나타내고,

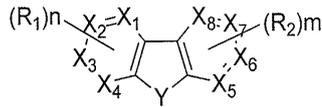
R'₁ 및 R'₂는 독립적으로 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군으로부터 선택된다.

청구항 13

제12항에 있어서, 상기 제1 디바이스가 소비 제품인 제1 디바이스.

청구항 14

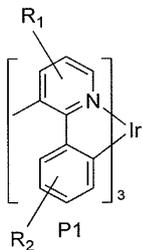
제12항에 있어서, 상기 유기층이 발광층이고,



화학식 (I) 을 갖는 화합물이 호스트인 제1 디바이스.

청구항 15

제12항에 있어서, 상기 유기층은 발광성 도판트를 추가로 포함하며, 상기 발광성 도판트는 하기 화학식을 갖는 것인 제1 디바이스:



상기 식 중, 발광성 도판트의 R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 수소, 알킬 및 아릴로 구성된 군으로부터 선택된다.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 원은 2009년 1월 16일자로 출원된 미국 가출원 61/145,370호를 우선권으로 주장하며, 이의 개시는 그 전체로 본 원에서 참조 인용된다. 본 원은 2008년 9월 12일자로 출원된 미국 가출원 12/209,928호, 및 2006년 5월 31일자로 출원된 미국 가출원 11/443,586호와 관련이 있다.

[0002] 상기 청구된 발명은 연합 산학 연구 합의로의 하기 부분들 중 1 이상에 의한, 이의 대리 및/또는 이와 연관하여 형성되었다: 레전즈 오브 더 유니버시티 오브 미시간, 프린스턴 유니버시티, 더 유니버시티 오브 서던 캘리포니아 및 유니버설 디스플레이 코포레이션. 상기 협의는 상기 청구된 발명이 형성될 때 및 전에 실시되었으며, 상기 청구된 발명은 상기 합의 범위 내에 실시된 활동의 결과로서 형성되었다.

[0003] 기술 분야

[0004] 본 발명은 아자-디벤조티오펜 또는 아자-디벤조푸란을 함유하는 신규한 유기 착물에 관한 것이다. 상기 물질은 유기 발광 다이오드(OLED)에 유용할 수 있다.

배경 기술

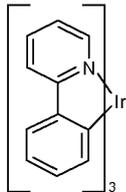
[0005] 유기 물질들을 사용하는 광전자 디바이스가 많은 이유에서 더욱 선호되고 있다. 이러한 디바이스를 제조하는 데 사용되는 많은 물질들은 상대적으로 저렴하며, 따라서 유기 광전자 디바이스는 무기 디바이스보다 비용 상 유리할 수 있다. 또한, 유기 물질의 고유 특성, 예컨대 이의 가요성이 그 물질을 연성 기판 상의 제조와 같은 특정 용도에 적합하게 할 수 있다. 유기 광전자 디바이스의 예로는 유기 발광 디바이스(OLED), 유기 광트랜지스터, 유기 광전지 및 유기 광검출기를 들 수 있다. OLED에 있어서, 유기 물질은 통상의 물질에 비해 성능 상 이점을 보유할 수 있다. 예를 들어, 유기 발광층이 발산하는 파장은 일반적으로 적절한 도판트에 의해 용이하게 변경될

수 있다.

[0006] OLED는 디바이스에 걸쳐 전압이 인가될 시 발광하는 얇은 유기 필름 사용한다. OLED는 평판 디스플레이, 조명 및 백라이트와 같은 용도에서 사용하기 위한 더욱 관심을 끄는 기술이 되고 있다. 몇몇 OLED 물질 및 배치가 미국 특허 5,844,363호, 6,303,238호 및 5,707,745호에 기술되어 있으며, 이는 본 원에 그 전체로 참조 인용된다.

[0007] 인광성 발광 분자에 대한 한 용도는 풀 칼러 디스플레이이다. 이러한 디스플레이에 대한 공업 규격은 '포화' 칼러라 언급되는 특정 칼러를 발광하도록 적용된 픽셀을 요한다. 특히, 상기 표준은 포화 적색, 녹색 및 청색 픽셀을 요한다. 당업계에 공지된 1931 CIE 좌표를 이용하여 색을 측정할 수 있다.

[0008] 녹색 발광 분자의 한 예로는 트리스(2-페닐피리딘) 이리듐이 있으며, 하기 구조를 갖는 Ir(ppy)₃를 의미한다:



[0009]

[0010] 본 원에서의 본 및 이후 도에서, 본 발명자는 직쇄로서 질소에서 금속(여기서는 Ir)까지의 배위 결합을 도시한다.

[0011] 본 원에서 사용된 바와 같이, 용어 '유기'는 중합체 물질뿐만 아니라 유기 광전자 디바이스 제조에 사용될 수 있는 소분자 유기 물질을 포함한다. '소분자'는 중합체가 아닌 임의의 유기 물질을 의미하며, '소분자들'은 실질적으로 상당히 클 수 있다. 소분자는 일부 환경에서 반복 단위를 포함할 수 있다. 예를 들어, 치환기로서 장쇄 알킬기를 사용하는 것은 상기 '소분자' 부류로부터의 분자를 제거하지 않는다. 소분자는 또한, 예를 들어 중합체 주쇄 상의 펜던트기로서 또는 그 주쇄의 일부로서 중합체에 포함될 수 있다. 소분자는 또한 덴드리머의 중심 부분으로서 작용할 수 있으며, 이는 그 중심 부분 상에 형성된 일련의 화학적 셸(shell)로 구성되어 있다. 덴드리머의 중심 부분은 형광성 또는 인광성 소분자 발광체일 수 있다. 덴드리머는 '소분자'일 수 있으며, OLED 분야에서 현재 사용되는 모든 덴드리머는 소분자인 것으로 생각된다.

[0012] 본 원에서 사용되는 바와 같이, '정상부'는 기체로부터 가장 먼 것을 의미하는 반면에, '바닥부'는 기체에 가장 가까운 것을 의미한다. 제1층이 제2층 '상에 배치된' 것으로 기술된 경우, 제1 층은 기체로부터 더 멀리 배치되어 있다. 제1 층이 제2 층 '과 접촉하는 것'으로 명시되지 않는 한, 제1 및 제2 층 사이에 다른 층이 존재할 수 있다. 예를 들어, 다양한 유기층이 사이에 존재할 수 있지만, 캐소드가 애노드 '상에 배치되는' 것으로 기술될 수 있다.

[0013] 본 원에서 사용되는 바와 같이, '용액 가공가능한'이란 용액 또는 현탁액 형태로 액체 매질에 및/또는 이로부터 이송되거나, 분산되거나 또는 용해될 수 있다는 것을 의미한다.

[0014] 리간드는 그 리간드가 발광성 물질의 광활성 특성에 직접적으로 기여하는 것으로 고려되는 경우 '광활성'이라 언급된다. 보조 리간드가 광활성 리간드의 특성을 변경할 수 있더라도, 그 리간드가 발광 물질의 광활성 특성에 기여하지 않는 경우, 리간드는 '보조적'이라 일컬을 수 있다.

[0015] 본 명세서에 사용되는 바와 같이, 그리고 당업자에 의해 일반적으로 이해되는 바와 같이, 제1 에너지 준위가 진공 에너지 준위에 보다 가깝다면, 제1 "최고 점유 분자 궤도"(HOMO) 또는 "최저 비점유 분자 궤도"(LUMO) 에너지 준위가 제2 HOMO 또는 LUMO 에너지 준위보다 더 크거나 또는 "보다 더 높다". 이온화 포텐셜(IP)은 진공 준위에 대하여 음의 에너지로서 측정되기 때문에, 더 높은 HOMO 에너지 준위는 더 작은 절대값을 갖는 IP(음의 값이 더 작은 IP)에 상응한다. 유사하게, 더 높은 LUMO 에너지 준위는 더 작은 절대값을 갖는 전자 친화력(EA) (음의 값이 더 작은 EA)에 상응한다. 진공 준위가 맨 위에 있는 종래의 에너지 준위 다이어그램에서, 물질의 LUMO 에너지 준위는 동일한 물질의 HOMO 에너지 준위보다 더 높다. "더 높은" HOMO 또는 LUMO 에너지 준위는 "더 낮은" HOMO 또는 LUMO 에너지 준위보다 그러한 다이어그램의 맨 위에 더 가깝게 나타난다.

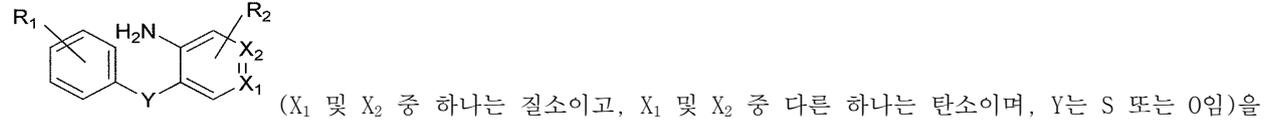
[0016] 본 원에서 사용되고, 당업자에게 일반적으로 이해되게 되는 바와 같이, 제1 일함수가 보다 높은 절대값을 갖는 경우 제1 일함수는 제2 일함수에 대해 '보다 크다' 또는 '보다 높다'. 일함수는 일반적으로 진공 수준에 대한 음수로서 특정하기 때문에, 이는 '더욱 높은' 일함수가 더욱 음성이라는 것을 의미한다. 진공 수준이 정상부에 있는 통상의 에너지 준위도에서, '보다 높은' 일함수는 상기 진공 수준으로부터 하향으로 더 멀리 예시된다. 따

라서, HOMO 및 LUMO 에너지 수준의 정의는 일함수 이외의 상이한 통상예를 따른다.

[0017] OLED에 대한 추가 세부 사항, 및 전술한 정의는 미국 특허 7,279,704호에서 확인할 수 있으며, 이는 그 전체로 본 원에서 참조 인용된다.

발명의 내용

[0018] *아자-디벤조티오펜 화합물 또는 아자-디벤조푸란 화합물의 제조 방법이 제공된다. 상기 방법은 화학식

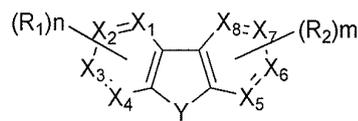


갖는 아미노-아릴티오 피리딘 중간체의 아세트산 용액을 ^tBuONO로 처리하여 화학식 을 갖는 아자 착물을 생성하는 것을 포함한다. R₁ 및 R₂는 1개, 2개, 3개 또는 4개의 치환을 나타낼 수 있다. R₁은 수소, 알킬, 아릴, 헤테로아릴 및 할라이드로 구성된 군으로부터 선택된다. 바람직하게는, R₁은 할라이드이다. R₂는 수소, 알킬, 아릴 및 할라이드로 구성된 군으로부터 선택된다. 바람직하게는, X₁ 및 X₂ 중 하나는 탄소일 수 있고, 다른 하나는 질소일 수 있다. 더욱 바람직하게는, X₁이 질소이고 X₂가 탄소이거나, X₁이 탄소이고 X₂가 질소이다. 바람직하게는, Y는 S이다. 대안적으로, Y는 바람직하게는 O일 수 있다. R₂는 1 이상의 할라이드를 포함할 수 있고, R₂는 할라이드 치환기만을 포함할 수 있다. 상기 방법을 이용하여 R₂가 할라이드가 아닌 화합물을 제조할 수

있고, 상기 아미노-아릴티오 피리딘 중간체는 ^tBuONO에 의한 처리 전에 H₂SO₄로 처리한다.

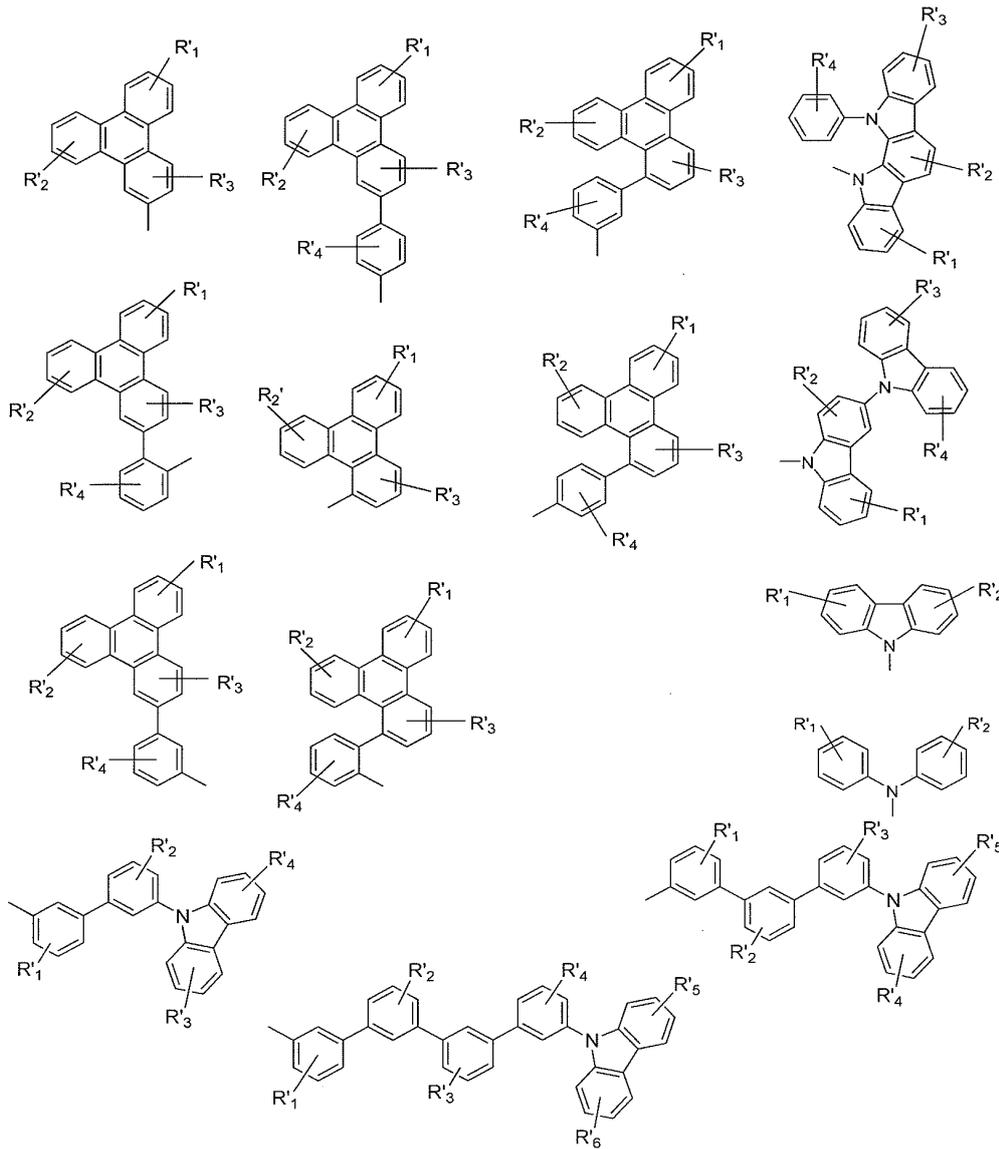
의 수율은 50% 이상일 수 있다.

[0019] 신규한 부류의 아자-디벤조티오펜 및 아자-디벤조푸란 화합물이 제공된다. 상기 화합물은 하기 화학식을 가진다:



화학식 (I)

[0020] X₁, X₂, X₃, X₄, X₅, X₆, X₇ 및 X₈은 독립적으로 탄소 원자 및 질소 원자로 구성된 군으로부터 선택되고, X₁, X₂, X₃, X₄, X₅, X₆, X₇ 및 X₈ 중 1 이상은 질소 원자이다. Y는 S 또는 O이다. R₁ 및 R₂는 1개, 2개, 3개 또는 4개의 치환을 나타낼 수 있다. R₁ 및 R₂는 독립적으로 수소, 알킬, 아릴 및 할라이드로 구성된 군으로부터 선택되고, R₁ 및 R₂ 중 1 이상은 하기로 구성된 군으로부터 선택된다:



[0022]

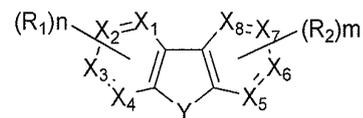
[0023]

R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 1개, 2개, 3개, 4개 또는 5개의 치환을 나타낼 수 있고, R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 독립적으로 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군으로부터 선택된다. 바람직하게는, m 및 n은 0, 1, 2, 3 또는 4이고; m+n은 2 이상이고, m+n은 6 이하이다. 바람직하게는, R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 각각 독립적으로 수소 또는 메틸이다.

[0024]

대안적으로, 신규한 부류의 아자-디벤조티오펜 및 아자-디벤조푸란 화합물이 제공된다. 상기 화합물은 하기 화학식을 가진다:

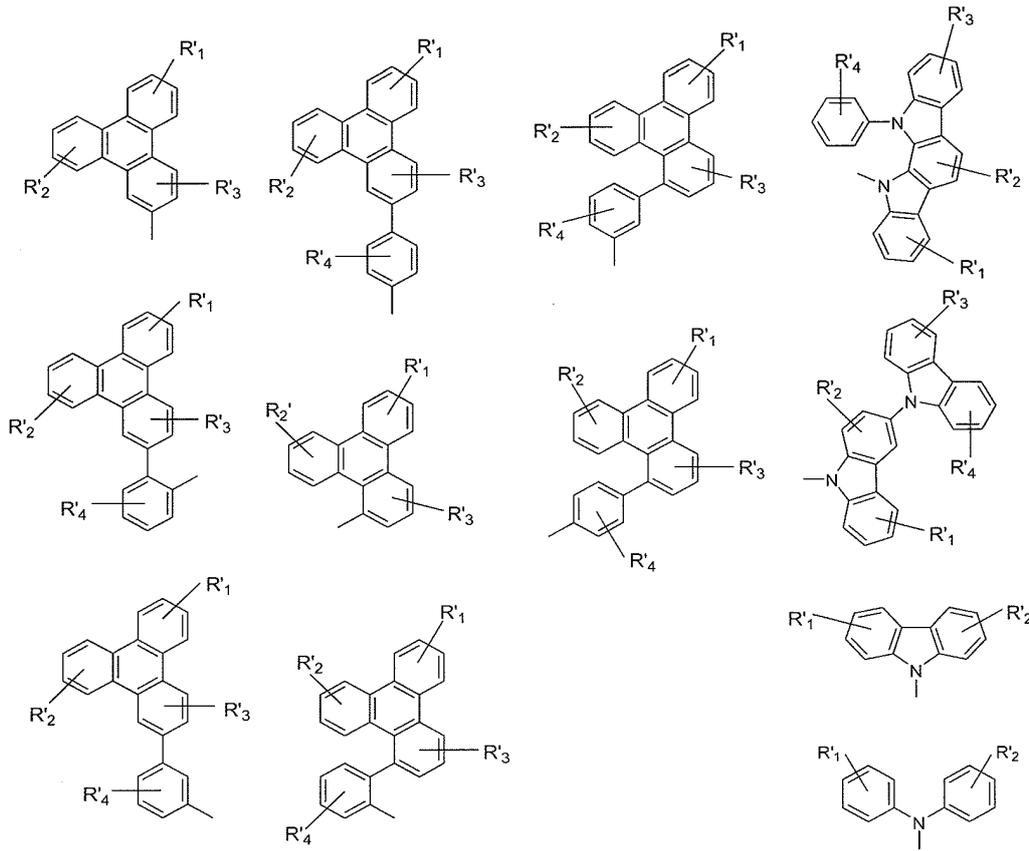
[0025]



화학식 (I)

[0026]

X₁, X₂, X₃, X₄, X₅, X₆, X₇ 및 X₈은 독립적으로 탄소 원자 및 질소 원자로 구성된 군으로부터 선택되고, X₁, X₂, X₃, X₄, X₅, X₆, X₇ 및 X₈ 중 1 이상은 질소 원자이다. Y는 S 또는 O이다. R₁ 및 R₂는 1개, 2개, 3개 또는 4개의 치환을 나타낼 수 있다. R₁ 및 R₂는 독립적으로 수소, 알킬, 아릴 및 할라이드로 구성된 군으로부터 선택되고, R₁ 및 R₂ 중 1 이상은 하기로 구성된 군으로부터 선택된다:



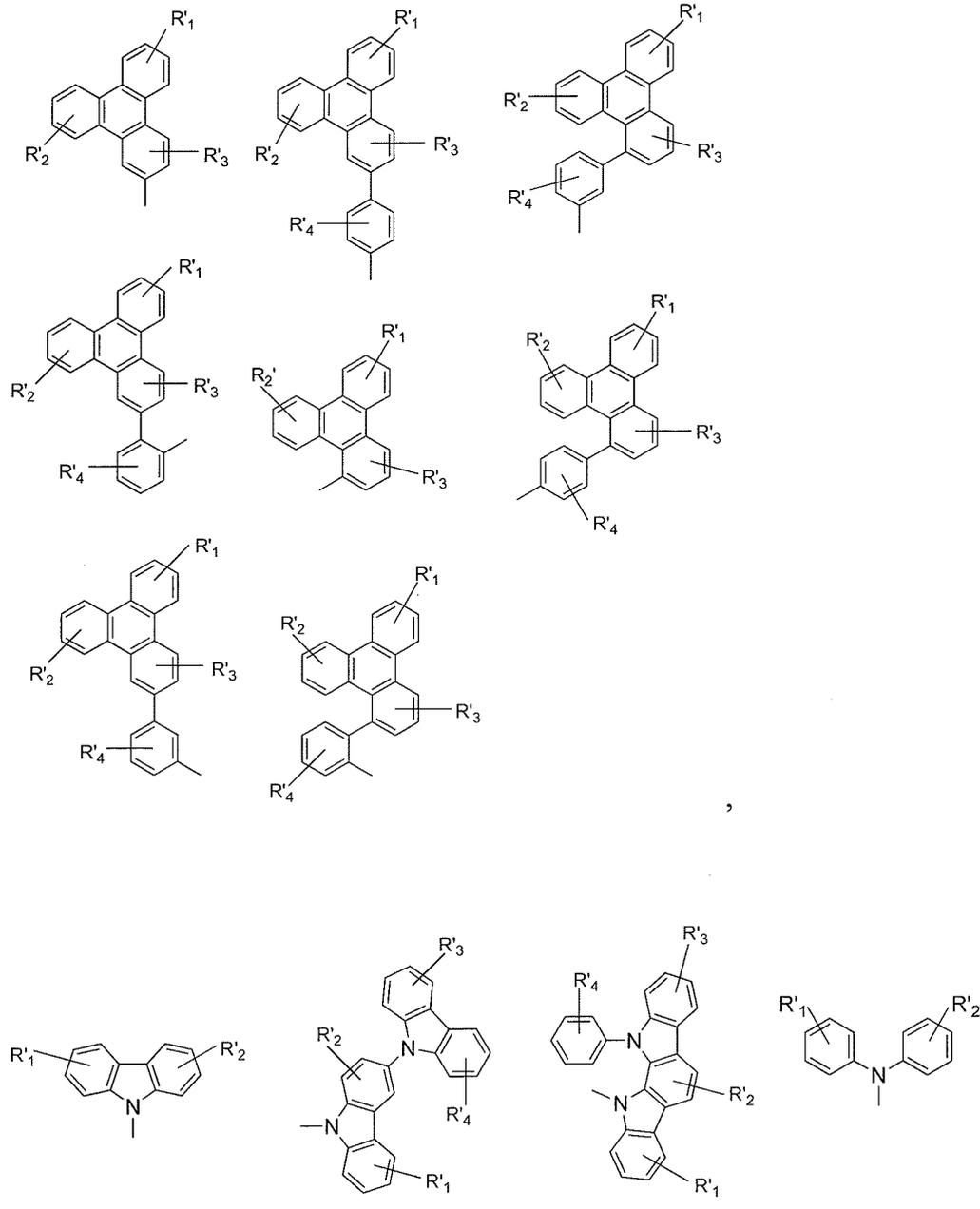
[0027]

[0028]

R'_3 및 R'_4 는 1개, 2개, 3개, 4개 또는 5개의 치환을 나타낼 수 있고, R'_1 , R'_2 , R'_3 및 R'_4 는 독립적으로 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군으로부터 선택된다. 바람직하게는, m 및 n 은 0, 1, 2, 3 또는 4이고; $m+n$ 은 2 이상이고, $m+n$ 은 6 이하이다. 바람직하게는, R'_1 , R'_2 , R'_3 및 R'_4 는 각각 독립적으로 수소 또는 메틸이다.

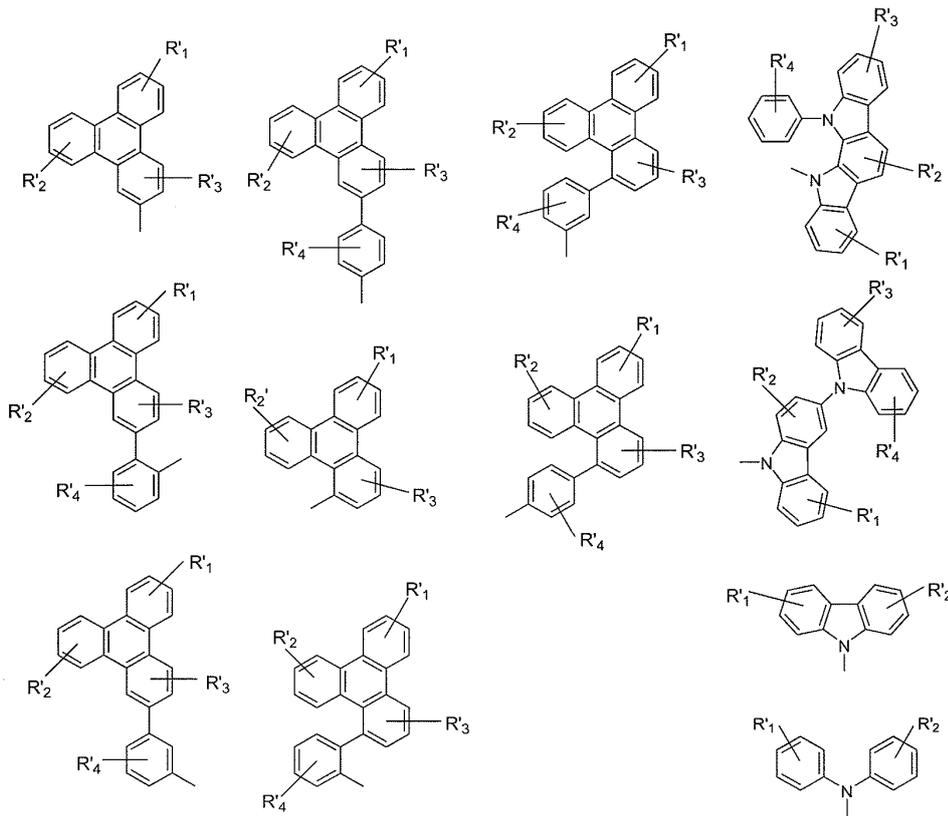
[0029]

R_1 및 R_2 중 하나가 수소이고, R_1 및 R_2 중 다른 하나가 하기로 구성된 군으로부터 선택되는 화합물이 또한 제공된다:



[0030]

[0031] 또는



[0032]

[0033] 또한, R₁ 및 R₂ 둘 모두가 본 원에서 제공된 군으로부터 선택되는 화합물이 제공된다. 더욱이, R₁이 본 원에서 제공된 군으로부터 선택된 화합물이 제공된다.

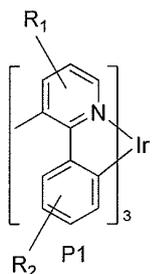
[0034] 화합물 1~93을 포함하는 아자-디벤조티오펜 화합물 및 아자-디벤조푸란의 특징예가 제공된다.

[0035] 화합물 1~79를 포함하는 아자-디벤조티오펜 화합물 및 아자-디벤조푸란 화합물이 제공된다.

[0036] 유기 발광 디바이스를 포함하는 제1 디바이스가 제공된다. 상기 디바이스는 또한 애노드, 캐소드, 및 그 애노드와 캐소드 사이에 위치하는 유기층을 포함한다. 상기 유기층은 화학식 (I)을 갖는 화합물을 포함한다. 특히, 상기 디바이스의 유기층은 화합물 1~93으로부터 선택되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0037] 한 양태에서, 상기 제1 디바이스는 소비 제품이다.

[0038] 유기 발광 디바이스가 또한 제공된다. 상기 디바이스는 애노드, 캐소드, 및 그 애노드와 캐소드 사이에 위치하는 유기층을 포함한다. 상기 유기층은 화학식 (I)을 갖는 화합물을 포함한다. 특히, 상기 디바이스의 유기층은 화합물 1~79로부터 선택되는 화합물을 포함할 수 있다. 바람직하게는, 상기 유기층은 발광층이고, 화학식 (I)을 갖는 화합물은 호스트이다. 상기 발광층은 발광성 도판트를 추가로 포함할 수 있다. 바람직하게는, 상기 발광성 도판트는 하기 식을 가진다:



[0039] 여기서, R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 수소, 알킬 및 아릴로 구성된 군으로부터 선택된다.

[0040] 추가로, 소비 제품이 또한 제공된다. 상기 생성물은 애노드, 캐소드, 및 그 애노드와 캐소드 사이에 유기층을 가지며, 그 유기층이 화학식 (I)의 화합물을 포함하는 디바이스를 함유한다.

도면의 간단한 설명

- [0041] 도 1은 유기 발광 디바이스를 나타낸다.
- 도 2는 개별 전자 이송층을 갖지 않는 역전 유기 발광 디바이스(inverted organic light emitting device)를 나타낸다.
- 도 3은 아자-디벤조티오펜 화합물 및 아자-디벤조푸란 화합물을 나타낸다.
- 도 4는 합성 경로 중 반응을 나타낸다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0042] 일반적으로, OLED는 애노드와 캐소드 사이에 배치되고 이에 전기적으로 연결되어 있는 1 이상의 유기층을 포함할 수 있다. 전류가 인가되는 경우, 상기 유기층(들)에 상기 애노드는 정공을 주입할 수 있고, 상기 캐소드는 전자를 주입한다. 주입된 정공 및 전자는 각각 반대로 충전된 전극으로 이동한다. 전자 및 정공이 동일한 분자에서 로컬화하는 경우, 여기된 에너지 상태를 갖는 로컬화된 전자-정공쌍인 '엑시톤'이 형성된다. 엑시톤이 광 발광 메커니즘을 통해 이완되는 경우에 발광된다. 일부 경우에서, 상기 엑시톤은 엑시머 또는 엑시플렉스 상에서 로컬화될 수 있다. 비방사성 메커니즘, 예컨대 열이완(thermal relaxation)이 또한 발생할 수 있으나, 일반적으로 바람직하지 않은 것으로 고려된다.
- [0043] 예를 들어, 미국 특허 4,769,292호(이는 그 전체로 참조 인용됨)에 개시된 바와 같이 초기 OLED는 싱글렛 상태로부터 발광하는('형광성') 발광 분자를 이용하였다. 형광성 발광은 일반적으로 약 10 나노초 미만의 시간 프레임으로 발생한다.
- [0044] 더욱 최근에 트리플렛 상태로부터 발광하는('인광성') 발광 물질을 갖는 OLED가 증명되었다. 문헌[Baldo ET AL., "Highly Efficient Phosphorescent Emission from Organic Electroluminescent Devices," NATURE, 395권, 151~154, 1998;('Baldo-I')] 및 [Baldo ET AL., "Very high-efficiency green organic light-emitting devices based on electrophosphorescence," APPL. PHYS. LETT., vol. 75, No. 3, 4-6 (1999) ("Baldo-II")]을 참조할 수 있으며, 이는 이의 전체로 참조 인용된다. 인광성은 US 특허 7,279,704호의 칼럼 5~6에서 더욱 상세히 설명되며, 이는 참조 인용된다.
- [0045] 도 1은 유기 발광 디바이스(100)을 도시한다. 상기 도는 실질적으로 일정 비율로 도시되어 있지 않다. 디바이스(100)는 기재(110), 애노드(115), 정공 주입층(120), 정공 이송층(125), 전자 차단층(130), 발광층(135), 정공 차단층(140), 전자 이송층(145), 전자 주입층(150), 보호층(155) 및 캐소드(160)를 포함할 수 있다. 캐소드(160)는 제1 전도층(162) 및 제2 전도층(164)을 갖는 화합물 캐소드이다. 디바이스(100)는 기술된 층들을 순서대로 침착시켜 제조할 수 있다. 상기 다양한 층들뿐만 아니라 실시예 물질의 특성 및 기능이 US 7,279,704호의 칼럼 6~10에 더욱 상세히 기술되어 있으며, 이는 참조 인용된다.
- [0046] 상기 층들 각각에 대한 추가 예가 있을 수 있다. 예를 들어, 가용성 및 투명 기재-애노드 조합이 미국 특허 5,844,363호에 개시되어 있으며, 이는 그 전체로 참조 인용된다. P 도핑된 정공 이송층의 예로는 미국 특허 출원 공개 2003/0230980호에 개시된 바와 같은 약 50:1의 몰비로 F₄TCNQ로 도핑된 m-MTDATA가 있으며, 상기 특허는 그 전체로 참조 인용된다. 발광 및 호스트 물질의 예가 Thompson 등의 미국 특허 6,303,238호에 개시되어 있으며, 이는 그 전체로 참조 인용된다. n-도핑된 전자 이송층의 예로는 약 1:1의 몰비로 Li에 의해 도핑된 BPhen이 있으며, 이는 그 전체로 참조 인용되는 미국 특허 출원 공개 2003/0230980호에 개시되어 있다. 그 전체로 참조 인용되는 미국 특허 5,703,436호 및 5,707,745호는 중첩하는 투명, 전기 전도성의 스퍼터 침착된(sputter-deposited) ITO 층을 갖는 Mg:Ag와 같은 금속의 얇은 층을 갖는 화합물 캐소드를 포함하는 캐소드의 예를 개시한다. 차단층의 이론 및 용도가 미국 특허 6,097,147호 및 미국 특허 출원 공개 2003/0230980호에 더욱 상세히 기술되어 있으며, 이는 그 전체로 참조 인용된다. 주입 층의 예가 미국 특허 출원 공개 2004/0174116호에 제공되며, 이는 그 전체로 참조 인용된다. 보호층의 설명은 미국 특허 출원 공개 2004/0174116호에서 확인할 수 있으며, 이는 그 전체로 참조 인용된다.
- [0047] 도 2는 역전 OLED(200)를 도시한다. 상기 디바이스는 기재(210), 캐소드(215), 발광층(220), 정공 이송층(225) 및 애노드(230)를 포함한다. 디바이스(200)는 기술된 층들을 순서대로 침착시켜 제조할 수 있다. 가장 일반적인 OLED 배치는 캐소드를 애노드 상에 배치시키나, 상기 디바이스(200)가 캐소드(215)를 애노드(230) 하에 배치시키기 때문에, 상기 디바이스(200)는 '역전' OLED라 언급될 수 있다. 디바이스(100)와 관련하여 설명된 것과 유

사한 물질이 디바이스(200)의 상응하는 층에 사용될 수 있다. 도 2는 일부 층들이 디바이스(100) 구조로부터 어떻게 생략될 수 있는지에 대한 한 예를 제공한다.

[0048] 도 1 및 2에 예시된 단순한 층상 구조가 비한정적인 예로서 제공되며, 본 발명의 실시양태가 광범위한 다른 구조와 관련하여 사용될 수 있다. 설명되는 특정 물질 및 구조는 실질적으로 예시적이며, 다른 물질 및 구조가 사용될 수 있다. 기능성 OLED는 상이한 방법으로 기술된 다양한 층들을 조합하여 달성할 수 있거나, 디자인, 성능 및 비용 인자를 기준으로 층들은 완전히 생략할 수 있다. 구체적으로 설명되지 않은 다른 층들이 또한 포함될 수 있다. 구체적으로 설명된 것 이외의 물질을 사용할 수 있다. 본 원에서 제공된 많은 예가 싱글렛 물질을 포함하는 다양한 층들을 설명하지만, 호스트 및 도판트의 혼합물과 같은 물질의 조합, 또는 더욱 일반적으로는 혼합물이 사용될 수 있음이 이해된다. 또한, 상기 층들은 다양한 하위층들을 가질 수 있다. 본 원에서 다양한 층에 제시되는 명칭은 엄밀히 한정하려는 의도는 아니다. 예를 들어, 디바이스(200)에서, 정공 이송층(225)은 정공을 이송하고 정공을 발광층(220)에 주입하며, 정공 이송층 또는 정공 주입층으로서 기술될 수 있다. 한 실시양태에서, OLED는 캐소드와 애노드 사이에 배치된 '유기층'을 갖는 것으로 기술될 수 있다. 상기 유기층은 단일 층을 포함할 수 있거나, 예를 들어 도 1 및 2와 관련하여 기술된 바와 같이 상이한 유기 물질의 다중층을 추가로 포함할 수 있다.

[0049] 구체적으로 기재되지 않은 구조 및 재료가 또한 사용될 수 있는데, 예를 들어, 전체적으로 참고로 포함되는 미국 특허 제5,247,190호(Friend et al.)에 개시된 것과 같은 중합체 재료로 구성된 OLED(PLED)와 같은 것이다. 추가의 예로서, 단일 유기층을 갖는 OLED가 사용될 수 있다. OLED는, 예를 들어 전체적으로 참고로 포함되는 미국 특허 제5,707,745호(Forrest et al.)에 기재된 바와 같이 적층될 수 있다. OLED 구조는 도 1 및 도 2에 예시된 단순 층상 구조로부터 벗어날 수 있다. 예를 들어, 기관은 아웃-커플링(out-coupling)을 개선하기 위해서 각을 이루는 반사성 표면을 포함할 수 있으며, 예를 들어 전체적으로 참고로 포함되는 미국 특허 제6,091,195호(Forrest et al.)에 기재된 메사(mesa) 구조 및/또는 미국 특허 제5,834,893호(Bulovic et al.)에 기재된 피트(pit) 구조와 같은 것이다.

[0050] 달리 명시되지 않는다면, 다양한 실시 형태의 임의의 층은 임의의 적합한 방법에 의해 피착될 수 있다. 유기층의 경우, 바람직한 방법에는 열 증발, 전체적으로 참고로 포함되는 미국 특허 제6,013,982호 및 제6,087,196호에 기재된 것과 같은 잉크젯, 전체적으로 참고로 포함되는 미국 특허 제6,337,102호(Forrest et al.)에 기재된 것과 같은 유기 기상 증착(OVPD) 및 전체적으로 참고로 포함되는 미국 특허 출원 제10/233,470호에 기재된 것과 같은 유기 증기 제트 인쇄(OVJP)에 의한 피착이 포함된다. 다른 적합한 피착 방법에는 스핀 코팅 및 다른 용액 기반 공정이 포함된다. 용액 기반 공정은 바람직하게는 질소 또는 불활성 분위기 내에서 수행된다. 나머지 다른 층들의 경우, 바람직한 방법에는 열 증발이 포함된다. 바람직한 패터닝 방법에는 마스크를 통한 증착, 전체적으로 참고로 포함되는 미국 특허 제6,294,398호 및 제6,468,819호에 기재된 것과 같은 저온 용접 및 몇몇 피착 방법, 예를 들어 잉크젯 및 OVJP와 관련된 패터닝이 포함된다. 다른 방법도 또한 사용될 수 있다. 피착시킬 재료는 이것이 특정 피착 방법과 양립될 수 있게 하기 위해 개질될 수 있다. 예를 들어, 분지형 또는 비분지형이고 바람직하게는 3개 이상의 탄소를 함유하는, 알킬 및 아릴 기와 같은 치환기를 소분자에 사용하여, 소분자가 용액 가공될 수 있는 능력을 향상시킬 수 있다. 20개의 탄소 또는 그 이상을 갖는 치환기가 사용될 수 있으며, 3 내지 20개의 탄소가 바람직한 범위이다. 비대칭 구조를 갖는 재료는 대칭 구조를 갖는 것들보다 더 우수한 용액 가공성을 가질 수 있는데, 그 이유는 비대칭 재료가 재결정화 경향이 더 적을 수 있기 때문이다. 소분자가 용액 가공될 수 있는 능력을 향상시키기 위해서, 덴드리머 치환기가 사용될 수 있다.

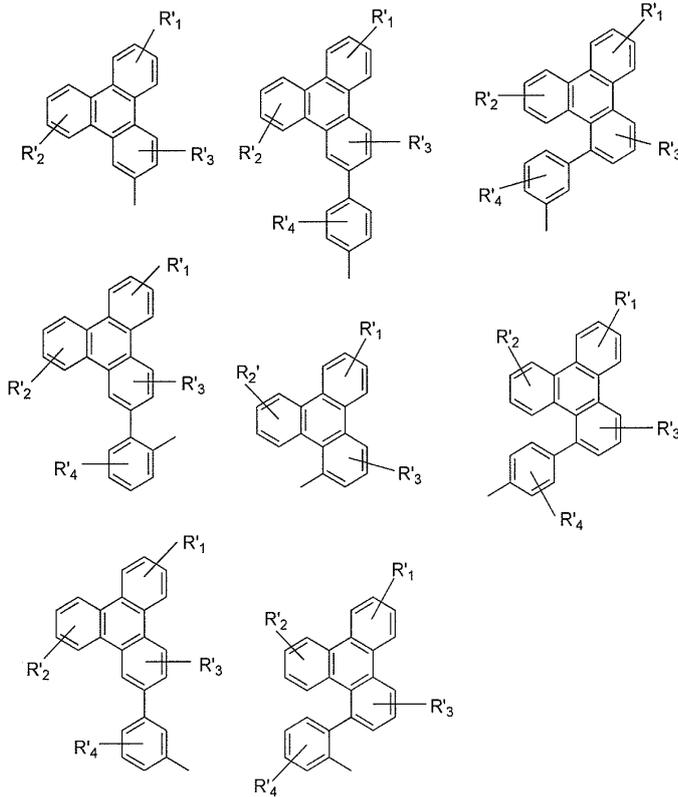
[0051] 본 발명의 실시 형태에 따라 제작된 디바이스는 평판 디스플레이, 컴퓨터 모니터, 텔레비전, 광고게시판, 실내 또는 실외 조명 및/또는 시그널링을 위한 라이트, 헤드 업 디스플레이, 완전 투명 디스플레이, 연성 디스플레이, 레이저 프린터, 전화기, 휴대폰, 개인 휴대 단말기(PDA), 랩탑 컴퓨터, 디지털 카메라, 캠코더, 뷰파인더, 마이크로디스플레이, 차량, 대면적 벽, 극장 또는 스타디움 스크린, 또는 간판을 포함한 매우 다양한 소비 제품 내로 도입될 수 있다. 수동 매트릭스 및 능동 매트릭스를 포함한, 본 발명에 따라 제작되는 디바이스를 제어하기 위해 다양한 제어 메커니즘이 사용될 수 있다. 디바이스의 다수는 사람에게 안락한 온도 범위, 예를 들어 18°C 내지 30°C에서, 그리고 더 바람직하게는 실온(20 내지 25°C)에서 사용하기 위한 것으로 의도된다.

[0052] 본 명세서에 기재된 재료 및 구조는 OLED 이외의 디바이스에 적용될 수 있다. 예를 들어, 유기 태양 전지 및 유기 광검출기와 같은 다른 광전자 디바이스가 이들 재료 및 구조를 이용할 수 있다. 더 일반적으로는, 유기 트랜지스터와 같은 유기 디바이스가 이들 재료 및 구조를 이용할 수 있다.

[0053] 용어 할로, 할로젠, 알킬, 시클로알킬, 알케닐, 알킬닐, 아릴킬, 이중환 기, 아릴, 방향족 기 및 헤테로아릴이

당업계에 공지되어 있으며, US 7,279,704의 칼럼 31~32에 정의되어 있으며, 이는 본 원에서 참조 인용된다.

- [0054] 아자-디벤조티오펜 또는 아자-디벤조푸란 코어를 함유하는 새로운 부류의 화합물이 제공된다(도 3에 예시됨). 특히, 트리페닐렌 및/또는 질소 함유 치환기로 추가로 치환된 아자-디벤조티오펜 화합물 또는 아자-디벤조푸란 화합물이 제공된다. 이러한 화합물은 인광성 유기 발광 디바이스에서 이롭게 사용될 수 있다. 바람직하게는, 이러한 화합물은 발광층 중 호스트 물질로서, 또는 강화층 중 물질로서 사용될 수 있다.
- [0055] 아자-디벤조티오펜 화합물 및 아자-디벤조푸란 화합물에 대한 기존의 합성이 존재하지만, 이러한 합성 경로는 제한된 실현성을 보유할 수 있다. 예를 들어, 아자-디벤조티오펜 및 아자-디벤조푸란의 기체는 우선 디아조늄 염의 형성 후, 촉매, 예컨대 Cu, CuCl가 존재 또는 부재하는 수성 매질에서의 고리화를 포함하는 공지된 Pschorr 고리화에 의해 합성되었다. 그러나, 상기 Pschorr 고리화의 일반적인 수율은 일정하지 않으며, 10% 미만일 수 있다. 따라서, 아자-디벤조티오펜 화합물 및 아자-디벤조푸란 화합물을 향상된 수율로 제조하는 방법을 제공하는 것이 매우 바람직하다. 아자-디벤조티오펜 화합물의 새로운 제조 방법이 본 원에서 제공된다(도 4에 예시됨). 본 원에서 기술된 상기 방법은 적어도, 수성 매질인 아닌, 아세트산을 사용하고, 어떠한 금속 촉매도 이용하지 않는다는 점에서 기존 합성과 다르다. 바람직하게는, 상기 아세트산은 순수한 아세트산(또는 빙초산)이다. 본 원에서 제공되는 방법은 50% 이상의 수율 또는 70% 이상의 수율을 제공할 수 있다.
- [0056] 디벤조티오펜 함유 및 디벤조푸란 함유 물질은 전형적으로 트리플렛 에너지가 상대적으로 높은 정공 이송 물질이다. 디벤조티오펜 및 디벤조푸란의 이로울 특성으로 인해, 이러한 화합물은 OLED 분야에 사용되어 왔으며, 이러한 화합물의 일부는 우수한 디바이스 성능을 산출하였다. 문헌[Lin et al., Dibenzo-thiophene-containing Materials in Phosphorescent Light Emitting Diodes, 2008], 미국 출원 12/208,907호 및 문헌[Ma et al., Benzo-fused Thiophene/Triphenylene Hybrid Materials, 2008, PCT/US2008/072499]을 참조할 수 있다. 이론에 얽매임 없이, 음이온 주입 및 음이온 안정성은 디바이스 안정성에 중요한 역할을 할 수 있는 것을 생각된다. 높은 음이온 안정성, 및 발광층으로의 음이온 주입의 낮은 에너지 배리어를 얻기 위해서, LUMO 수준이 낮은 화합물이 바람직하다. 특히, LUMO 수치가 낮은, 디벤조티오펜 및 디벤조푸란 함유 화합물(즉, 더욱 용이하게 환원되는 화합물)이 이로울 수 있다.
- [0057] 본 원에서 제공되는 화합물은, 바람직한 특성을 갖는 특정 화학기로 추가로 치환된 아자-디벤조티오펜 또는 아자-디벤조푸란 코어를 함유한다. 특히, 이러한 아자 유형의 화합물은 트리페닐렌기 및/또는 질소 함유 기(예를 들어, 카르바졸)로 치환되어 높은 트리플렛 에너지를 유지하고 향상된 전하 이송 특성을 제공한다. 따라서, 이러한 아자-디벤조티오펜 화합물 및 아자-디벤조푸란 화합물은 향상된 안정성, 향상된 효율 및 보다 긴 수명을 보유하는 디바이스를 제공할 수 있다. 추가로, 이러한 아자 유형 화합물은 이의 디벤조티오펜 또는 디벤조푸란 반대 부분보다도 더욱 용이하게 환원되어 작동 전압이 낮은 디바이스를 제공할 수 있는 것이 확인되었다.
- [0058] 트리페닐렌은 높은 트리플렛 에너지를 가지나, 높은 π -컨쥬게이션 및 제1 싱글렛과 제1 트리플렛 수준 간의 상대적으로 작은 에너지 차를 갖는 다방향족 탄화수소이다. 이는 트리페닐렌이, 유사한 트리플렛 에너지를 갖는 다른 방향족 화합물(예를 들어, 비페닐)에 비해 상대적으로 용이하게 접근가능한 HOMO 및 LUMO 수준을 보유한다는 것을 명시한다. 트리페닐렌의 이러한 특성은 OLED 호스트에 우수한 분자 형성 블록을 제공하여 전하(정공 또는 전자)를 안정화시킨다. 호스트로서 트리페닐렌 및 이의 유도체를 사용하는 것의 한 이점은 이것이 적색, 녹색 및 심지어 청색 인광성 도판트를 수용하여 에너지 켄칭 없이 높은 효율을 제공할 수 있다는 점이다. 트리페닐렌 호스트를 사용하여 높은 효율 및 안정성의 PHOLED를 제공할 수 있다. 문헌[Kwong and Alleyne, Triphenylene Hosts in Phosphorescent Light Emitting Diodes, 2006, 60 pp, U.S. 2006/0280965 A1]을 참조할 수 있다. 아자-디벤조티오펜 또는 아자-디벤조푸란 코어 및 트리페닐렌 부분을 함유하는 화합물은 PHOLED 중 호스트로서 유용할 수 있다. 더욱 구체적으로, 상기 화합물 부분 둘 모두의 트리플렛 에너지는 상대적으로 높으며, 따라서 전체적으로 높은 트리플렛 에너지를 유지한다. 추가로, 한 화합물 중 이러한 2개의 거의 조합은 또한 향상된 전하 밸런스를 제공하여 디바이스 효율 및 수명을 향상시킬 수 있다. 이러한 화합물의 트리페닐렌 부분일 수 있는 트리페닐렌기의 비한적인 예로를 하기를 들 수 있다;



[0059]

[0060]

질소 함유 기가 또한 아자-디벤조티오펜 화합물 및 아자-디벤조푸란 화합물의 치환기로서 사용될 수 있다. 이러한 질소 함유 기는 카르바졸, 올리고카르바졸, 인돌로카르바졸 및 디페닐아민을 포함할 수 있다. 카르바졸은 트리플렛 에너지가 높은 질소 함유 헤테로방향족이며, 정공 이송 및 전자 이송 특성을 보유한다. 호스트 물질로서 카르바졸 함유 화합물(즉, 카르바졸, 올리고카르바졸 및 인돌로카르바졸)을 이용하는 한 장점은 이들인 동시에 충분히 큰 트리플렛 에너지 및 캐리어 이송 특성을 보유한다는 점이다. 예를 들어, 상기 인돌로카르바졸 및 3-(9-카르바졸릴)카르바졸은 상대적으로 낮은 전기화학 산화 전위를 가진다. 이와 같이, 이러한 화합물은 산화, 및 이러한 산화의 역전이 보다 쉬우며, 이로써 전체적인 호스트 안정성을 향상시킨다. 또다른 이점은 이러한 카르바졸 형성 블록이 공여체로서 작용할 수 있는 동시에, 수용체인 아자-디벤조티오펜 또는 아자-디벤조푸란과 커플링하여 공여체-수용체 유형의 분자를 형성한다는 점이다. 공여체-수용체 분자 배치를 갖는 이러한 분자는 적어도 부분적으로 상기 디바이스의 저전압 특성에 기여하는 것으로 생각된다.

[0061]

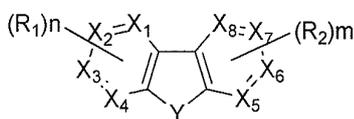
본 원에서 제공되는 화합물은 청색, 녹색 및 적색 PHOLED에서 호스트 물질로서 사용될 수 있다. 특히 트리페닐렌으로 치환된 아자-디벤조티오펜 또는 아자-디벤조푸란 화합물은, 이러한 화합물인 청색, 녹색 및 적색 발광성 도판트를 수용할 수 있는 바와 같이, 청색, 녹색 및 적색 디바이스에서 사용될 수 있다. 바람직하게는, 이러한 화합물은 청색 디바이스에 사용될 수 있다. 본 원에서 제공되는 아자 유형의 화합물은 또한 트리페닐렌 및 질소 함유 치환기 둘 모두에 의해 치환될 수 있다. 트리페닐렌 및 질소 함유 기 둘 모두에 의해 치환되는 이러한 화합물은, 이러한 화합물이 녹색 및 적색 발광성 도판트를 수용할 수 있는 바와 같이, 녹색 및 적색 디바이스에서 사용될 수 있다. 바람직하게는, 이러한 화합물은 녹색 디바이스에서 사용될 수 있다.

[0062]

본 원에서 기술되는 헤테로방향족 화합물(즉, 아자-디벤조티오펜 및 아자-디벤조푸란)은 이의 디벤조티오펜 또는 디벤조푸란 반대 부분보다, 특히 0.2~0.5 V에 의해 더욱 용이하게 환원될 수 있다. 결과적으로, 이러한 아자 유형 화합물은 낮은 작동 전압 및 긴 수명을 갖는 디바이스를 제공할 수 있다. 이론에 얽매임 없이, 상기 더욱 용이하게 환원되는 화합물은 상기 디바이스에서 더욱 우수한 음이온 안정성, 및 상기 전자 이송층(ETL)에서 상기 발광층(EML)으로의 더욱 용이한 음이온 주입을 제공할 수 있는 것으로 생각된다.

[0063]

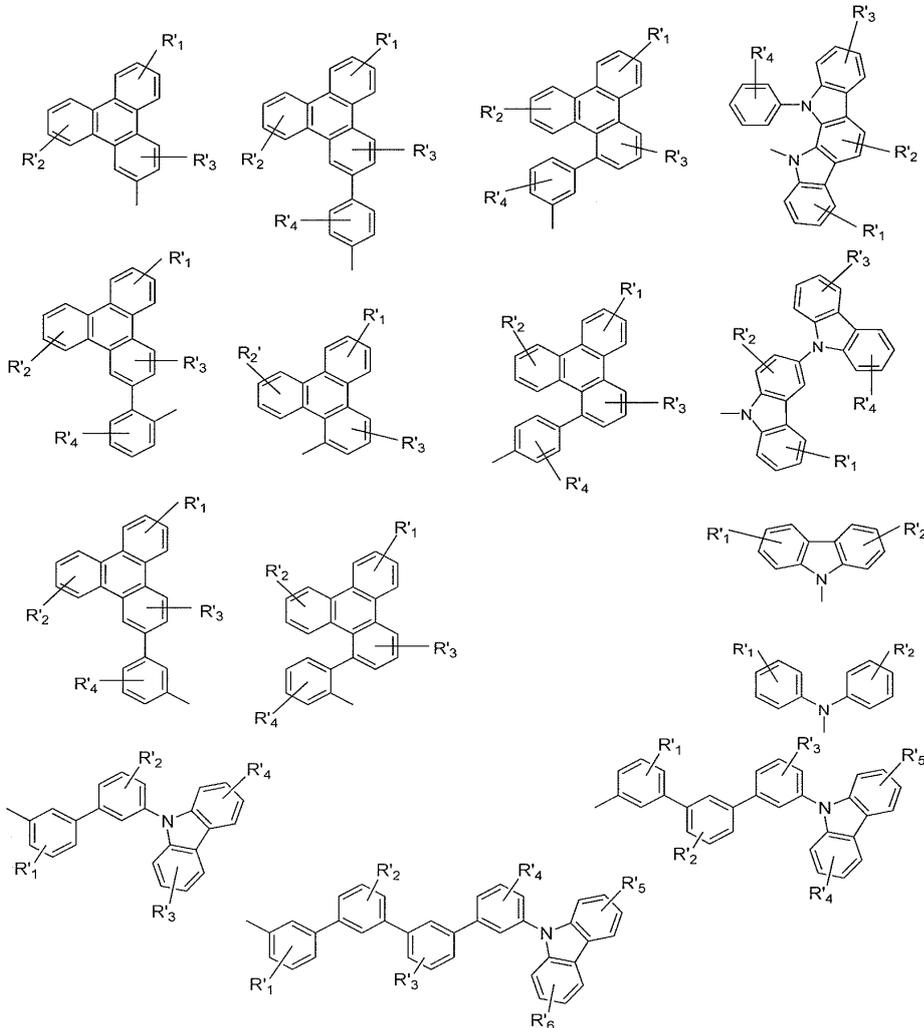
상기 화합물은 하기 화학식을 가진다:



[0064]

화학식 (I)

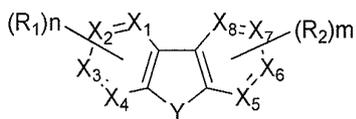
[0065] $X_1, X_2, X_3, X_4, X_5, X_6, X_7$ 및 X_8 은 독립적으로 탄소 원자 및 질소 원자로 구성된 군으로부터 선택되고, $X_1, X_2, X_3, X_4, X_5, X_6, X_7$ 및 X_8 중 1 이상은 질소 원자이다. Y 는 S 또는 O이다. R_1 및 R_2 는 1개, 2개, 3개 또는 4개의 치환을 나타낼 수 있다. R_1 및 R_2 는 독립적으로 수소, 알킬, 아릴 및 할라이드로 구성된 군으로부터 선택된다. R_1 및 R_2 중 1 이상은 하기로 구성된 군으로부터 선택된다:



[0066]

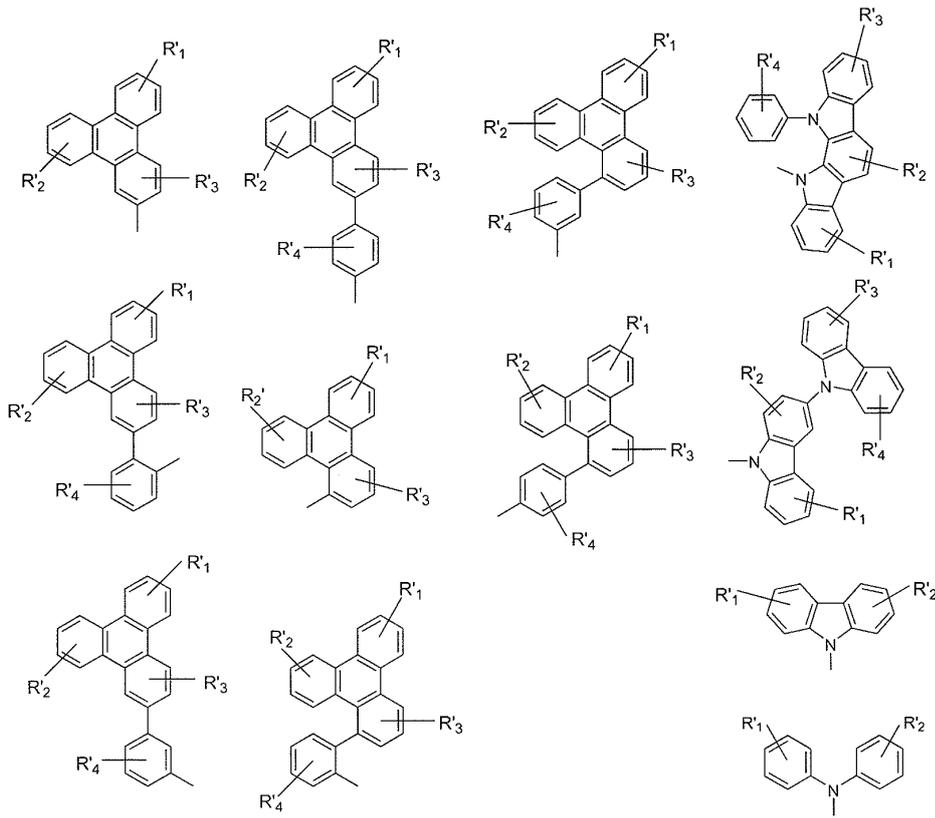
[0067] R'_1, R'_2, R'_3 및 R'_4 는 1개, 2개, 3개, 4개 또는 5개의 치환을 나타낼 수 있고, R'_1, R'_2, R'_3 및 R'_4 는 독립적으로 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군으로부터 선택된다. 바람직하게는, R'_1, R'_2, R'_3 및 R'_4 는 각각 독립적으로 수소 또는 메틸이다.

[0068] 상기 화합물은 하기 화학식을 가진다:



[0069] ** 화학식 (I)

[0070] 여기서, $X_1, X_2, X_3, X_4, X_5, X_6, X_7$ 및 X_8 은 독립적으로 탄소 원자 및 질소 원자로 구성된 군으로부터 선택되고, $X_1, X_2, X_3, X_4, X_5, X_6, X_7$ 및 X_8 중 1 이상은 질소 원자이다. Y 는 S 또는 O이고; 여기서 R_1 및 R_2 는 1개, 2개, 3개 또는 4개의 치환을 나타낼 수 있다. R_1 및 R_2 는 독립적으로 수소, 알킬, 아릴 및 할라이드로 구성된 군으로부터 선택되고, R_1 및 R_2 중 1 이상은 하기로 구성된 군으로부터 선택된다:



[0071]

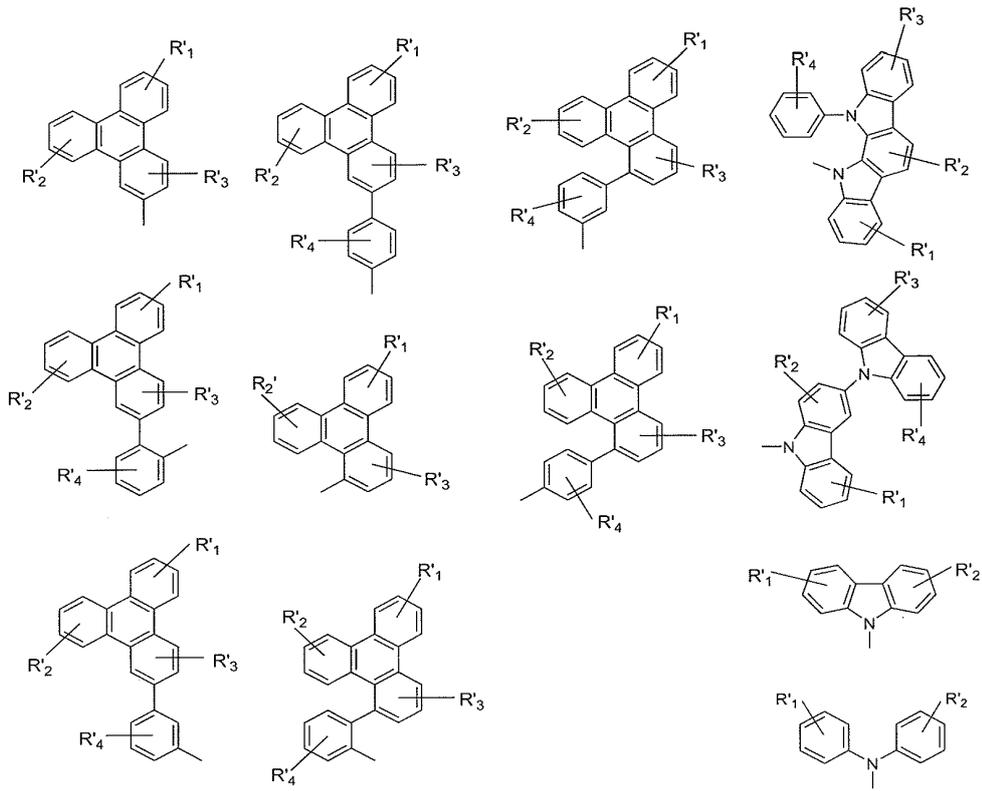
[0072]

R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 1개, 2개, 3개, 4개 또는 5개의 치환을 나타낼 수 있고, R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 독립적으로 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군으로부터 선택된다. 바람직하게는, R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 각각 독립적으로 수소 또는 메틸이다.

[0073]

바람직하게는, m 및 n은 0, 1, 2, 3 또는 4이고, m+n은 2 이상이고 m+n은 6 이하이다. 이론에 얽매임 없이, 2 이상은 바람직한 양의 전자 이송 부분을 제공하여 우수한 전자 이송 특성을 제공하는 것으로 생각된다. 더욱이, 6 초과는 승화 온도의 상승을 유도할 수 있어 상기 화합물을 갖는 디바이스 제조가 현실적이지 않은 것으로 생각된다.

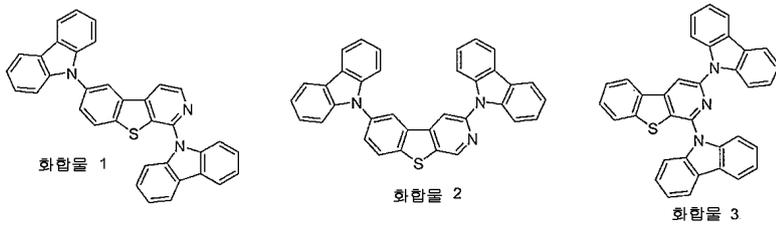
[0074] 한 양태에서, R₁ 및 R₂ 중 1 이상은 하기로 구성된 군으로부터 선택된다:



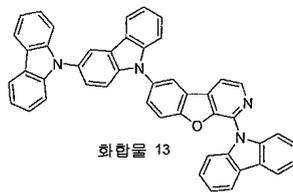
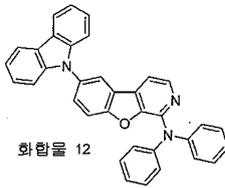
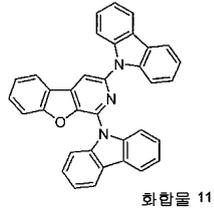
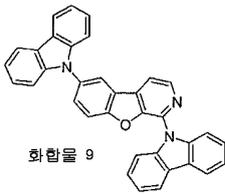
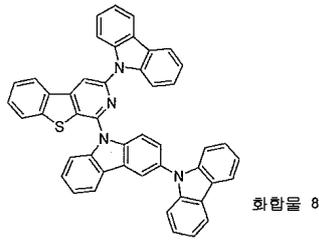
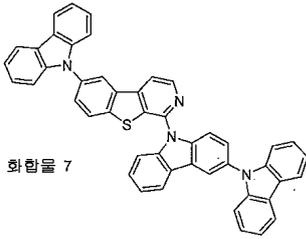
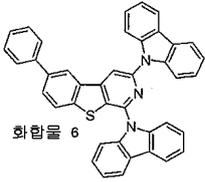
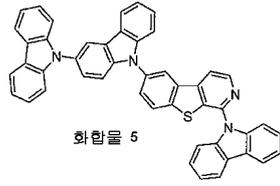
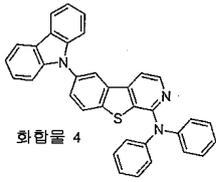
[0075]

[0076] R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 독립적으로 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군으로부터 선택된다. 바람직하게는 R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 각각 독립적으로 수소 또는 메틸이다.

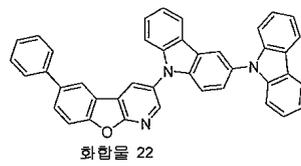
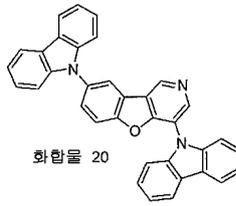
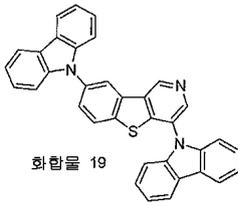
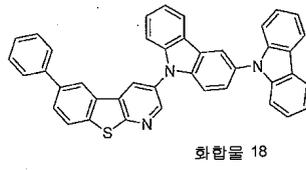
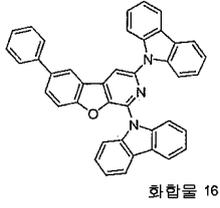
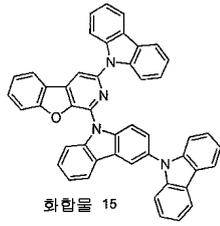
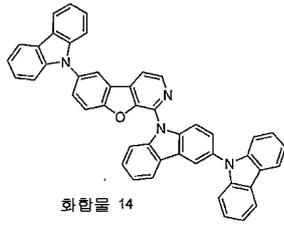
[0077] 상기 화합물의 특징예가 제공되며, 하기로 구성된 군으로부터 선택되는 화합물을 들 수 있다:



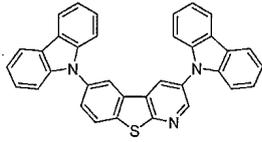
[0078]



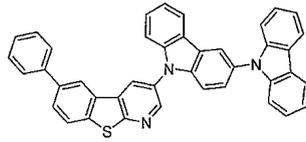
[0079]



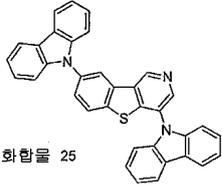
[0080]



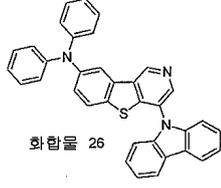
화합물 23



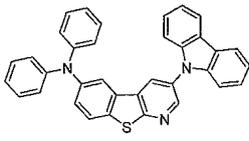
화합물 24



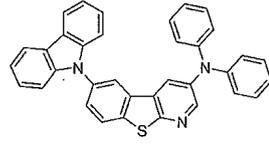
화합물 25



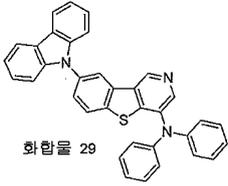
화합물 26



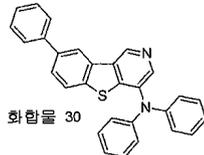
화합물 27



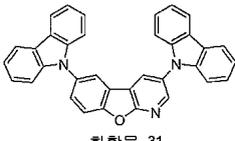
화합물 28



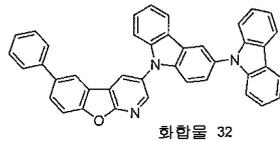
화합물 29



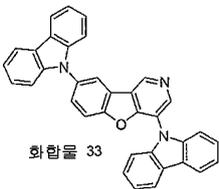
화합물 30



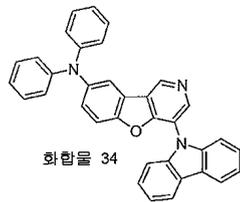
화합물 31



화합물 32

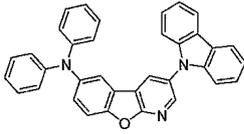


화합물 33

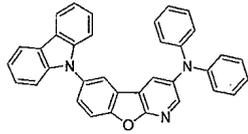


화합물 34

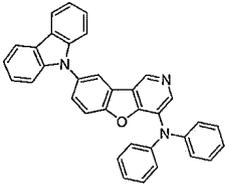
[0081]



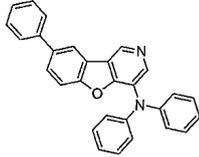
화합물 35



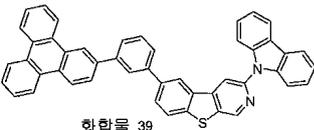
화합물 36



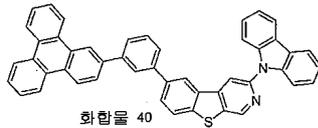
화합물 37



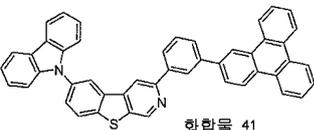
화합물 38



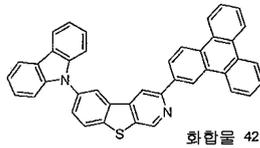
화합물 39



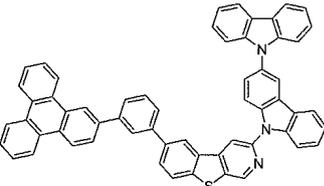
화합물 40



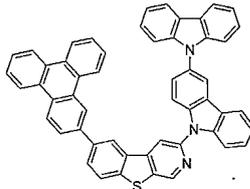
화합물 41



화합물 42

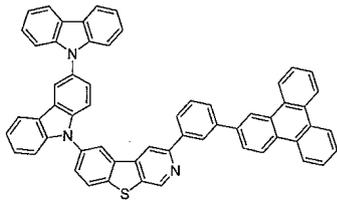


화합물 43

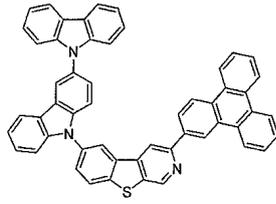


화합물 44

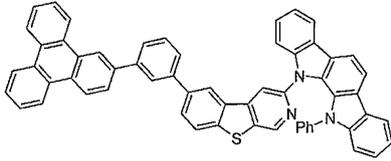
[0082]



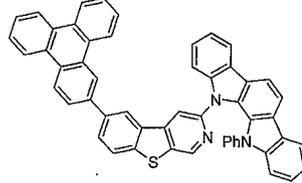
화합물 45



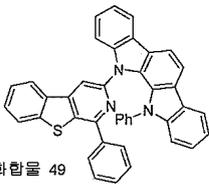
화합물 46



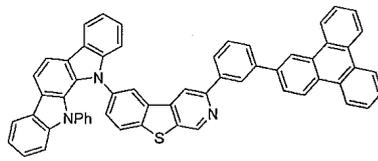
화합물 47



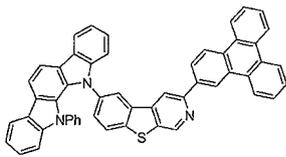
화합물 48



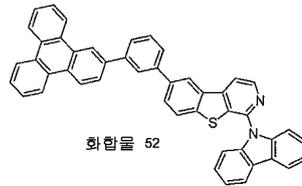
화합물 49



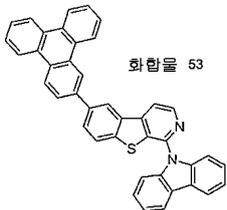
Compound 50



화합물 51

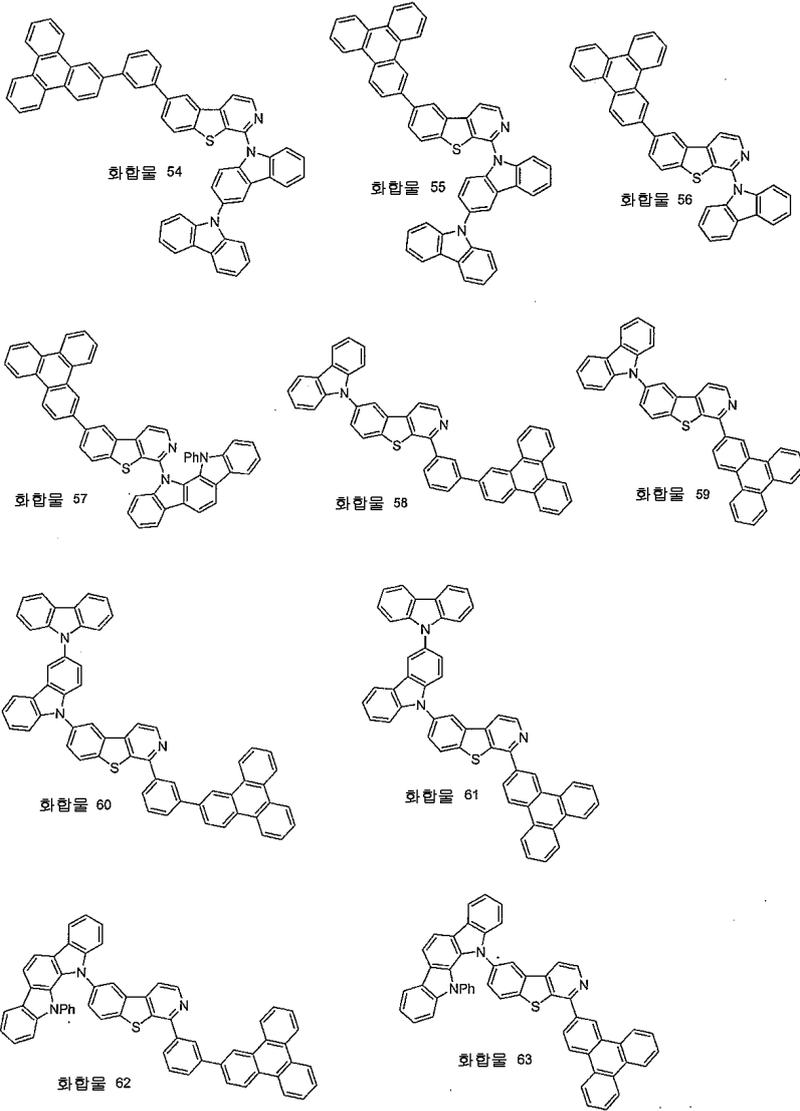


화합물 52

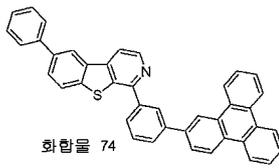
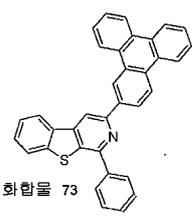
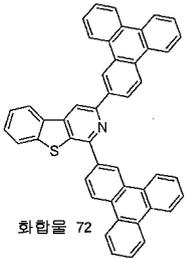
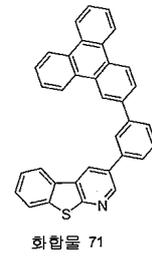
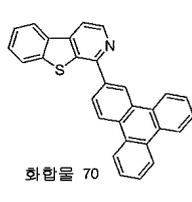
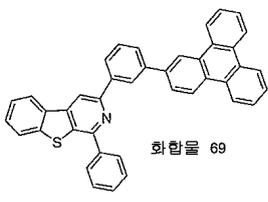
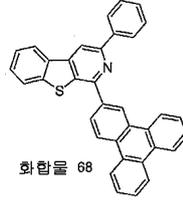
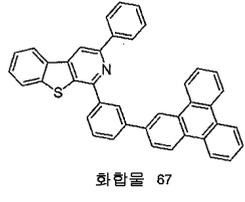
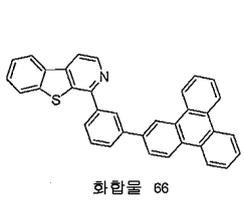
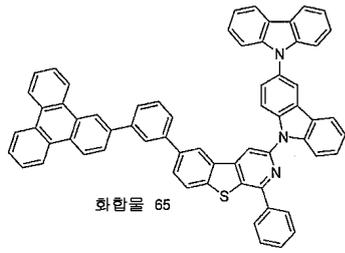
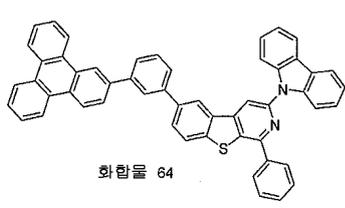


화합물 53

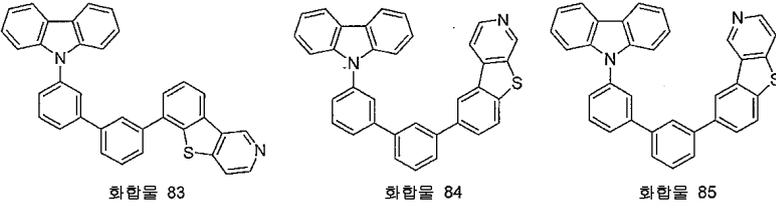
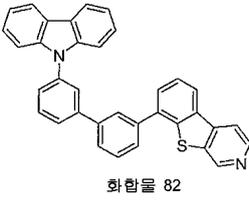
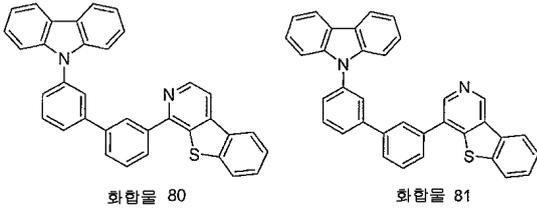
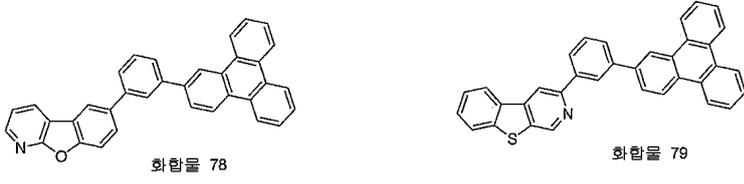
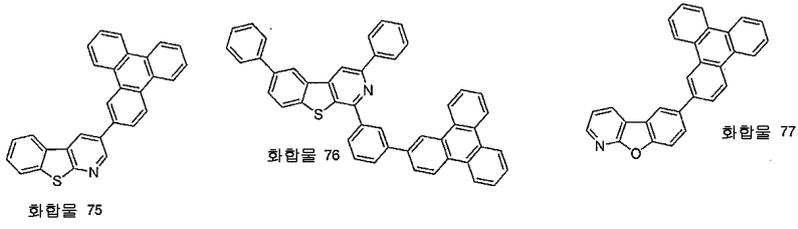
[0083]



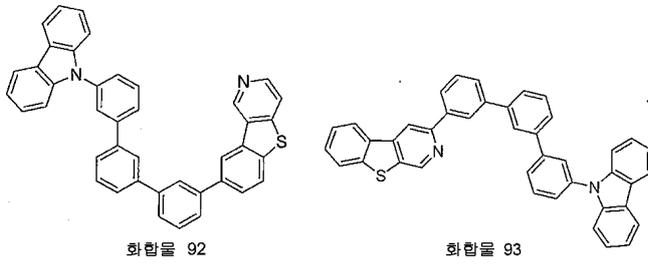
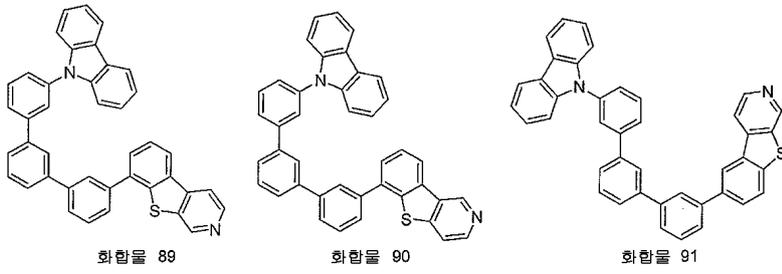
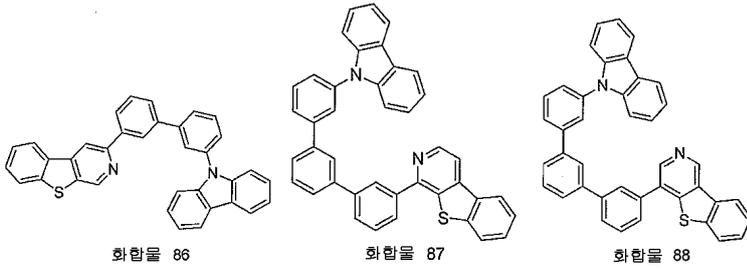
[0084]



[0085]

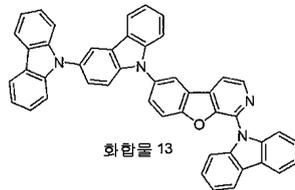
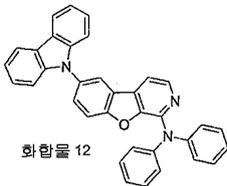
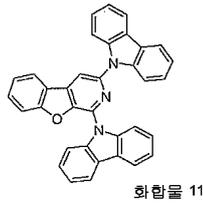
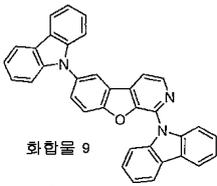
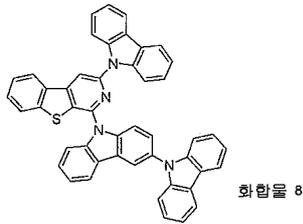
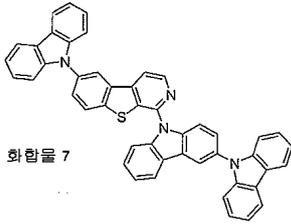
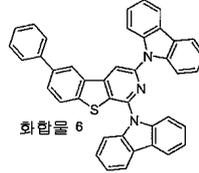
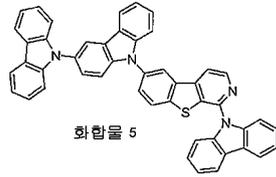
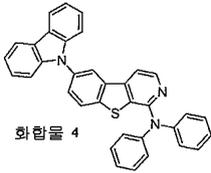
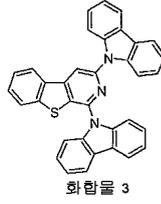
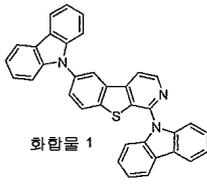


[0086]

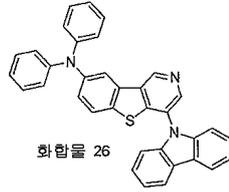
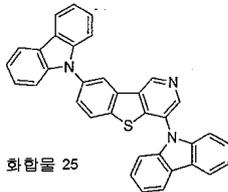
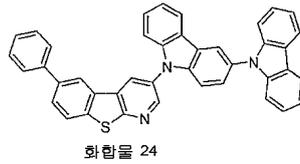
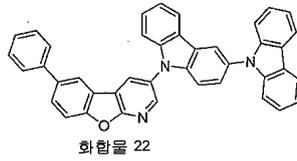
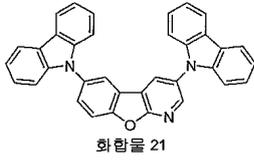
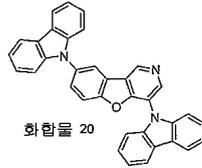
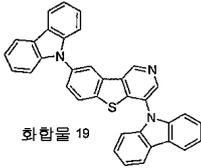
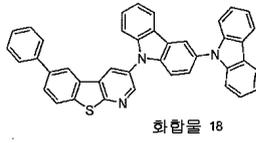
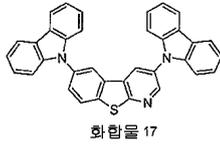
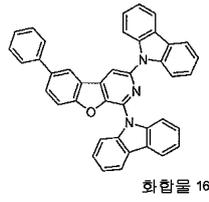
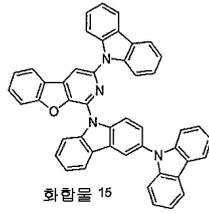


[0087]

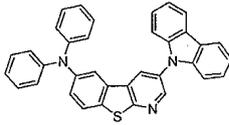
[0088] 상기 화합물의 특징예가 제공되며, 하기로 구성된 군으로부터 선택되는 화합물을 들 수 있다:



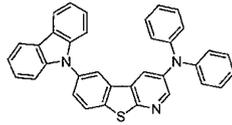
[0089]



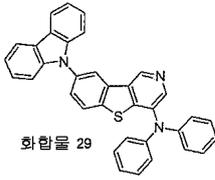
[0090]



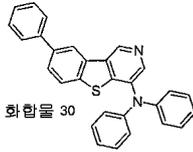
화합물 27



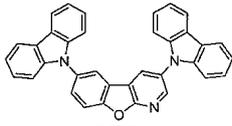
화합물 28



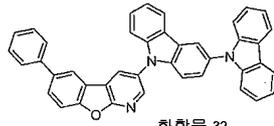
화합물 29



화합물 30



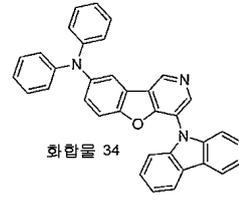
화합물 31



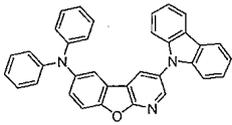
화합물 32



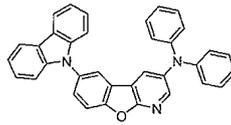
화합물 33



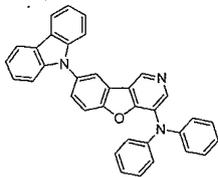
화합물 34



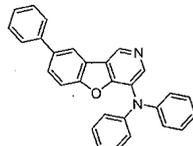
화합물 35



화합물 36

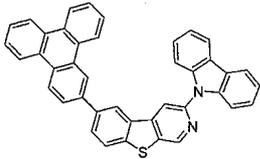


화합물 37

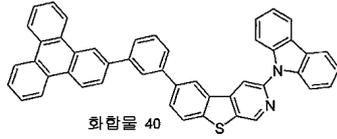


화합물 38

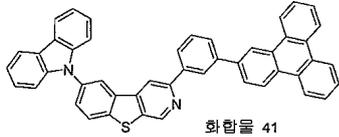
[0091]



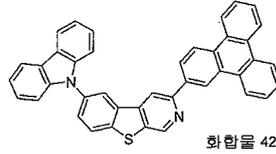
화합물 39



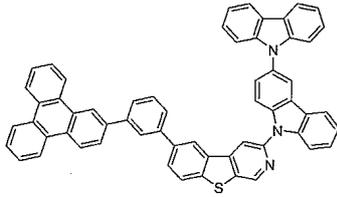
화합물 40



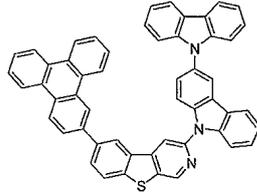
화합물 41



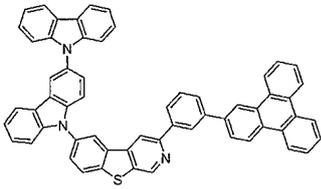
화합물 42



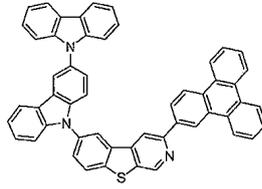
화합물 43



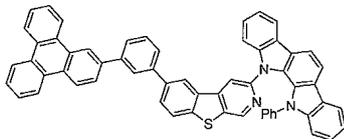
화합물 44



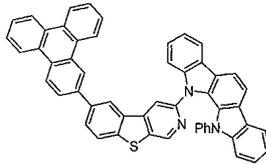
화합물 45



화합물 46

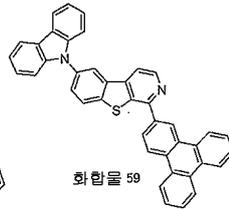
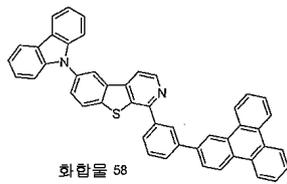
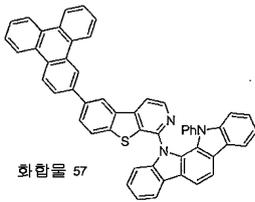
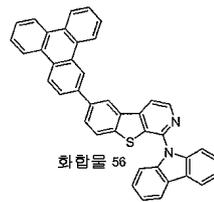
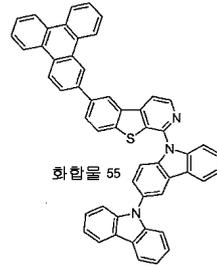
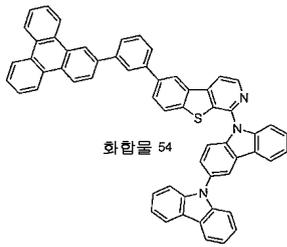
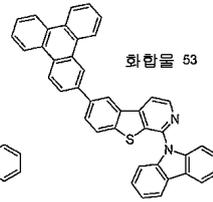
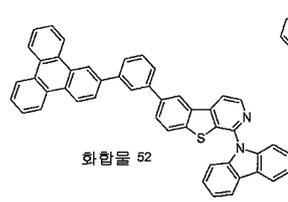
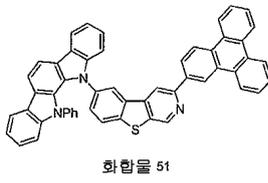
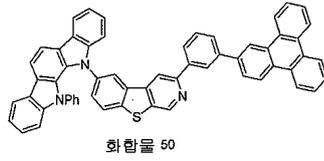
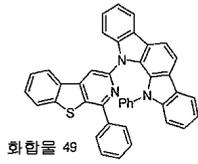


화합물 47

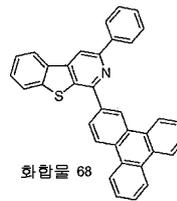
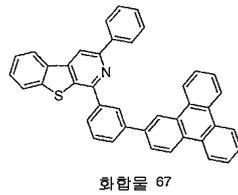
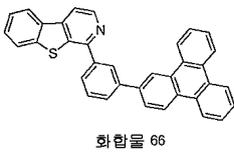
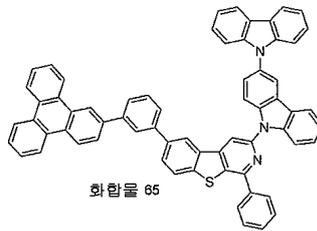
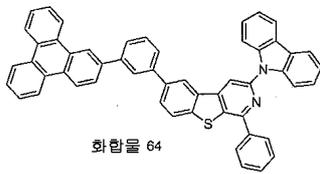
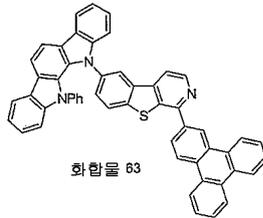
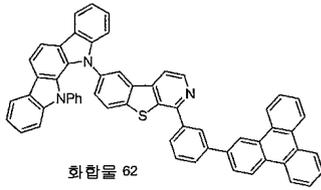
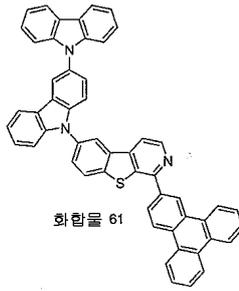
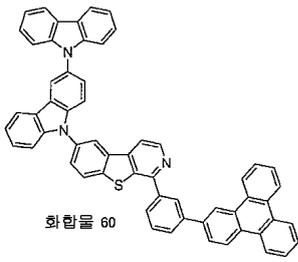


화합물 48

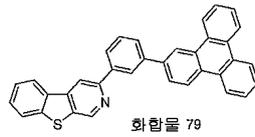
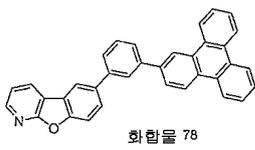
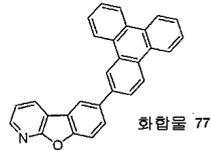
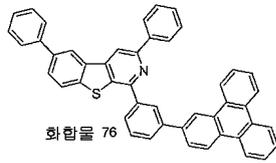
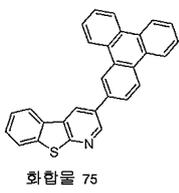
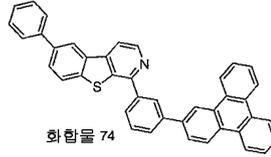
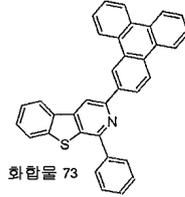
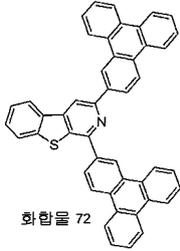
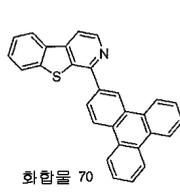
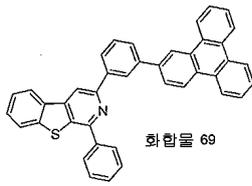
[0092]



[0093]

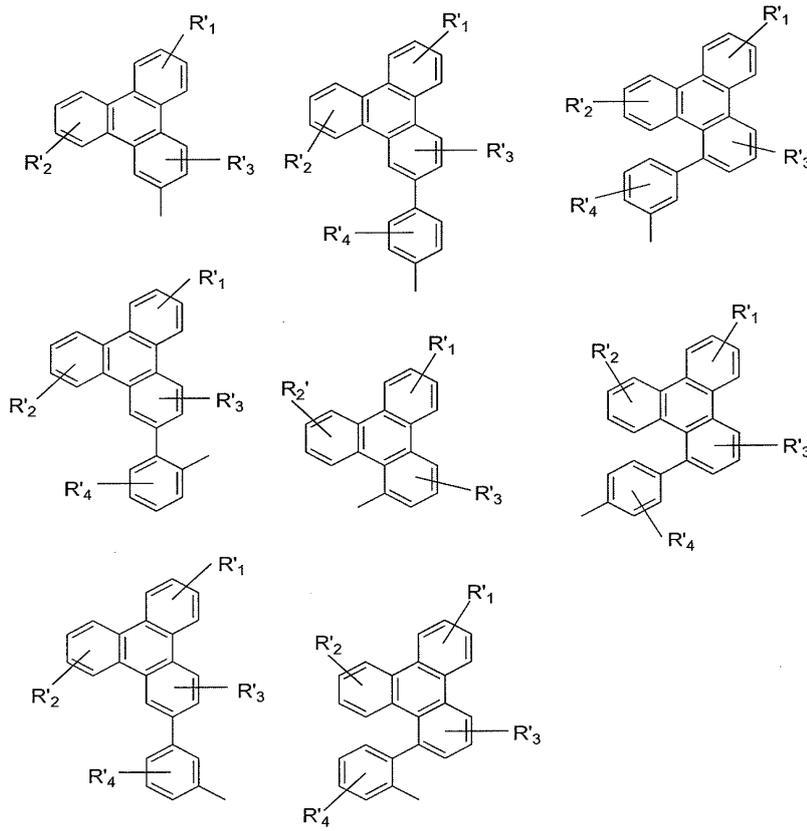


[0094]



[0095]

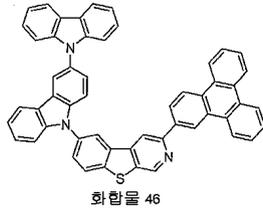
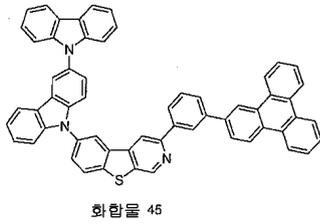
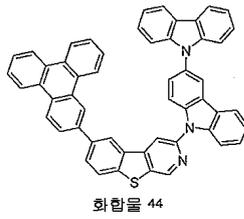
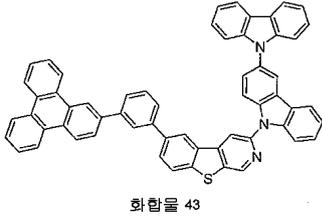
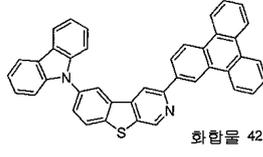
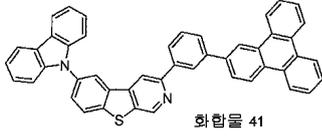
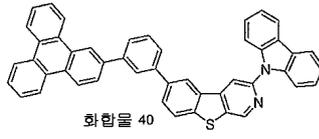
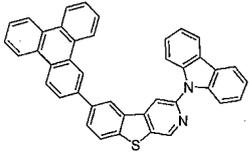
[0096] 한 양태에서, R₁ 및 R₂ 중 1 이상은 하기로 구성된 군으로부터 선택된다:



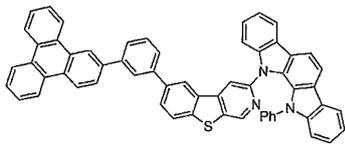
[0097]

[0098] R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 독립적으로 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군으로부터 선택된다. 바람직하게는 R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 각각 독립적으로 수소 또는 메틸이다.

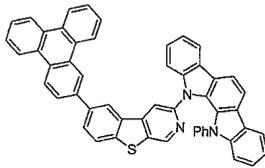
[0099] 상기 화합물의 특징예가 제공되며, 하기로 구성된 군으로부터 선택되는 화합물을 들 수 있다:



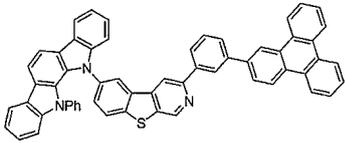
[0100]



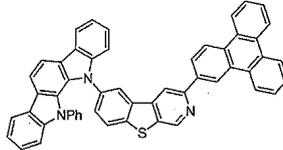
화합물 47



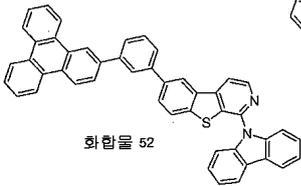
화합물 48



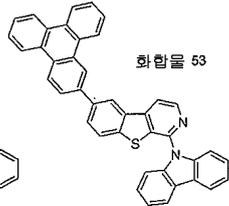
화합물 50



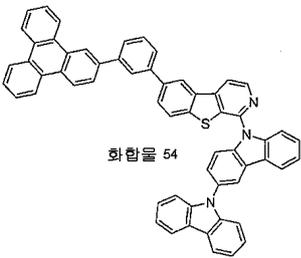
화합물 51



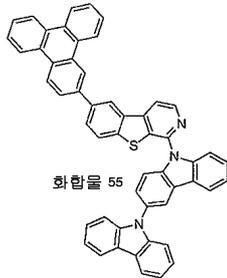
화합물 52



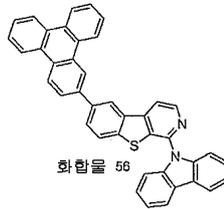
화합물 53



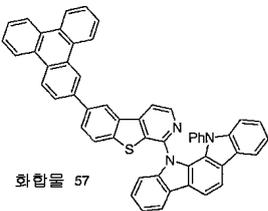
화합물 54



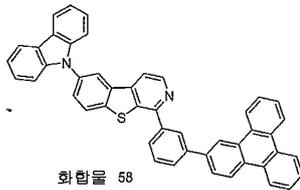
화합물 55



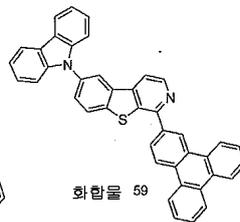
화합물 56



화합물 57

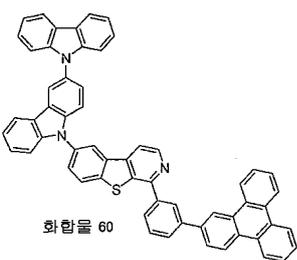


화합물 58

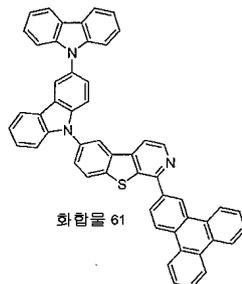


화합물 59

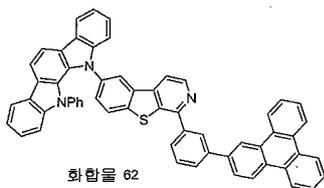
[0101]



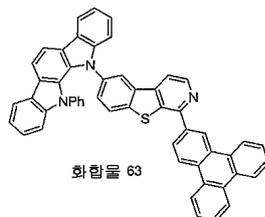
화합물 60



화합물 61

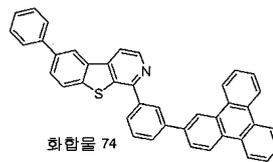
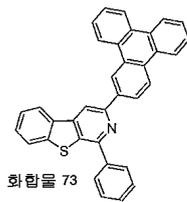
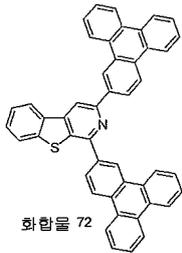
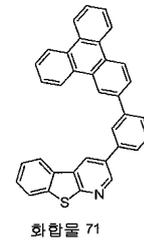
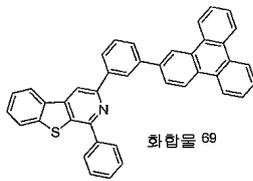
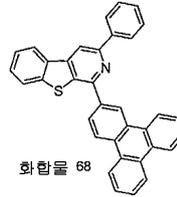
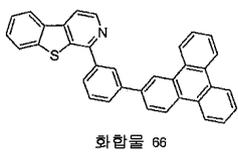
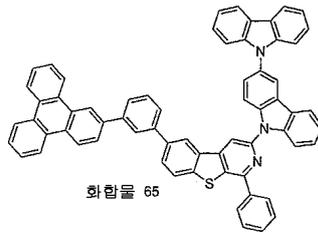
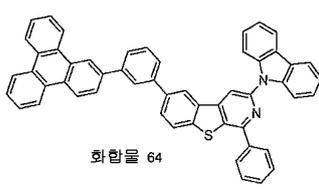


화합물 62

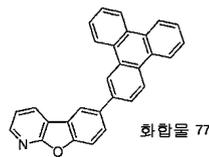
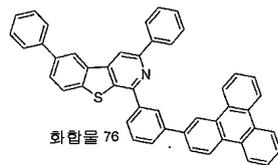
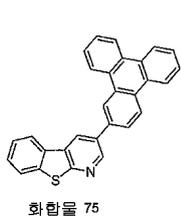


화합물 63

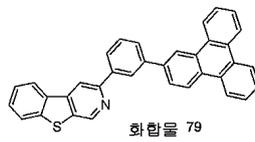
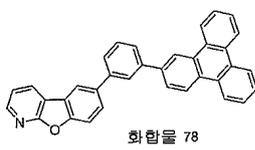
[0102]



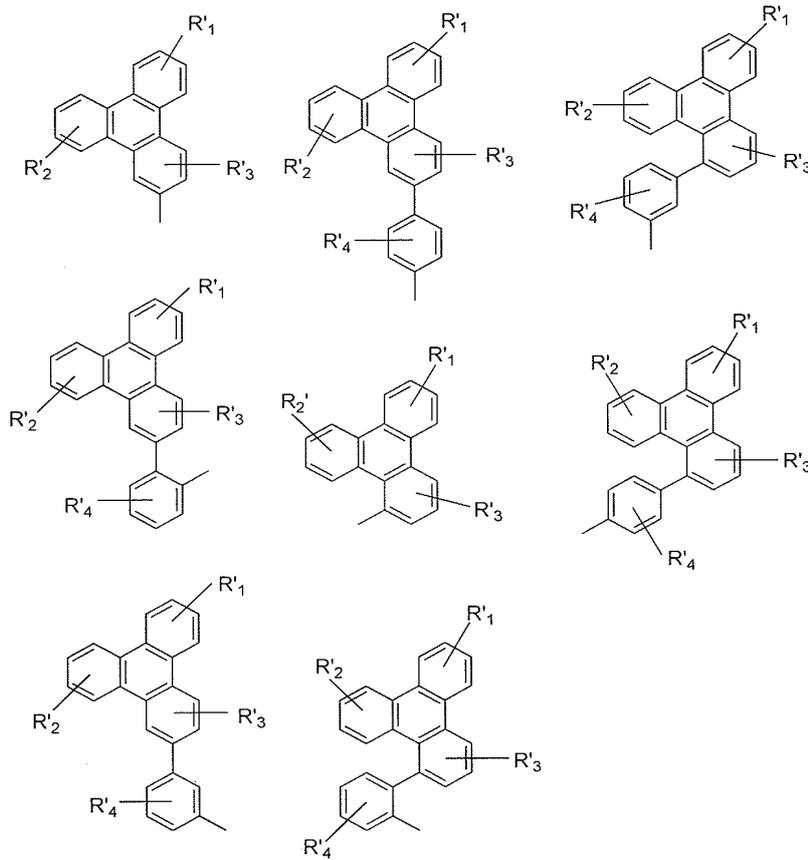
[0103]



[0104]



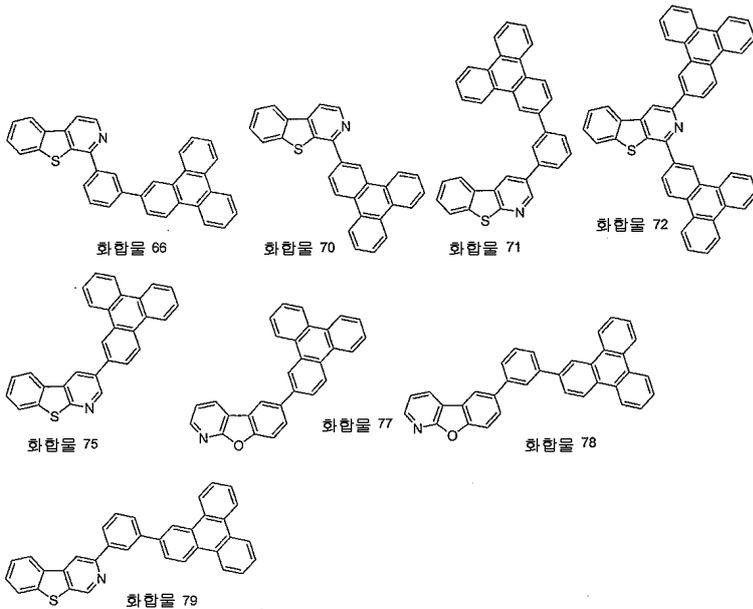
[0105] 한 양태에서, R₁ 및 R₂ 중 1 이상은 각각 독립적으로 수소 및 하기로 구성된 군으로부터 선택된다:



[0106]

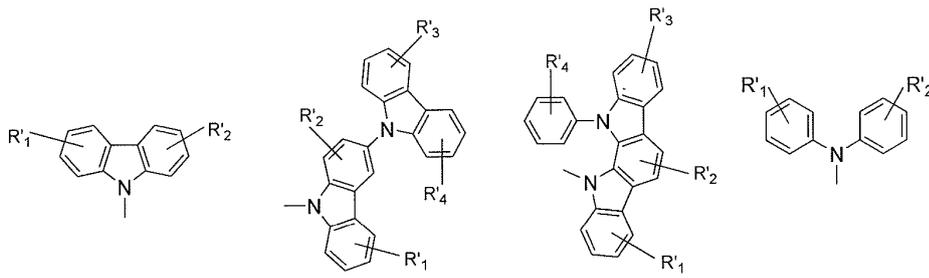
[0107] R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 독립적으로 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군으로부터 선택된다. 바람직하게는 R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 각각 독립적으로 수소 또는 메틸이다.

[0108] 상기 화합물의 특징예가 제공되며, 하기로 구성된 군으로부터 선택되는 화합물을 들 수 있다:



[0109]

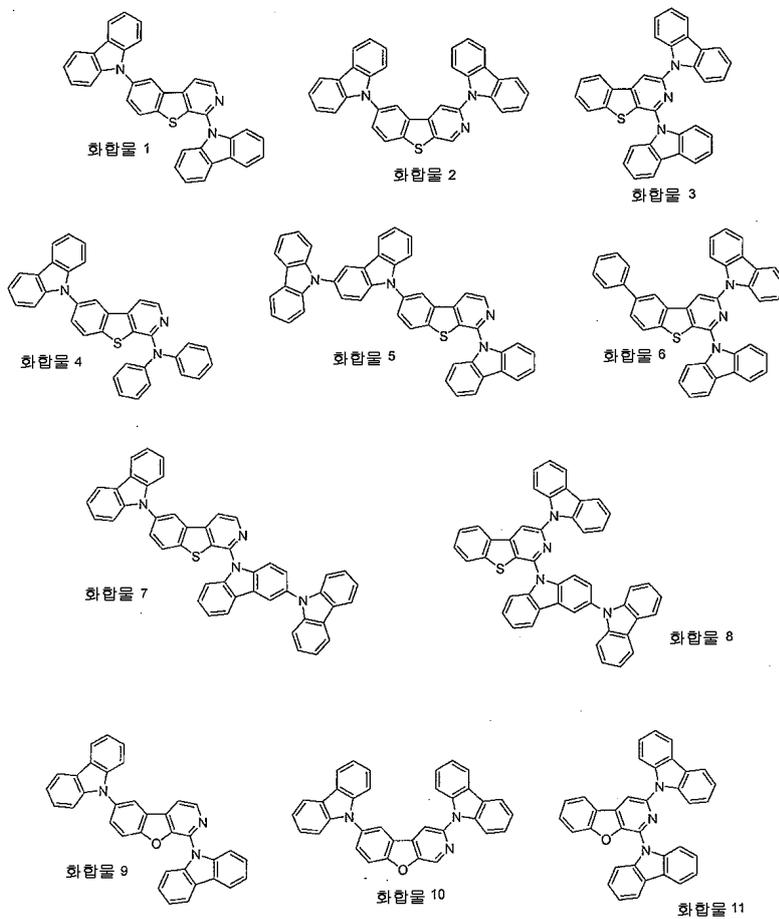
[0110] 한 양태에서, R₁ 및 R₂ 중 1 이상은 하기로 구성된 군으로부터 선택된다:



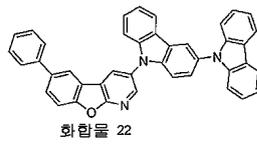
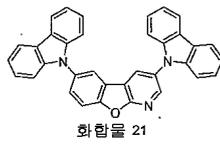
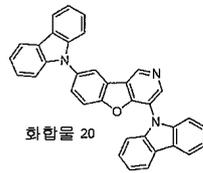
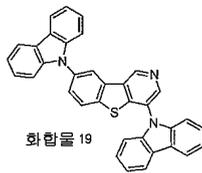
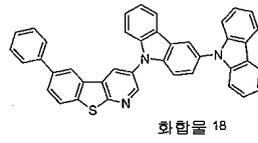
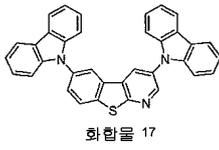
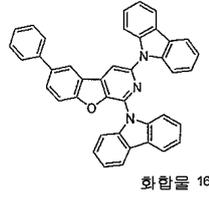
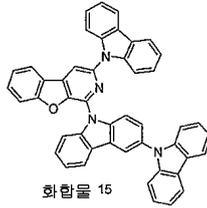
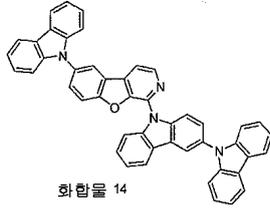
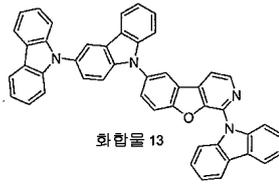
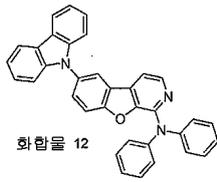
[0111]

[0112] R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 독립적으로 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군으로부터 선택된다. 바람직하게는 R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 각각 독립적으로 수소 또는 메틸이다.

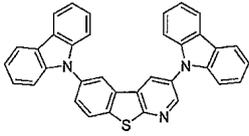
[0113] 이러한 화합물의 특정예로는 하기로 구성된 군으로부터 선택된 화합물을 들 수 있다:



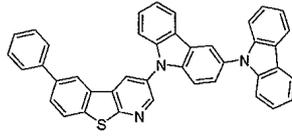
[0114]



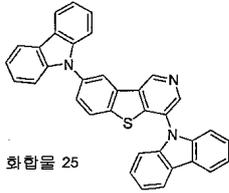
[0115]



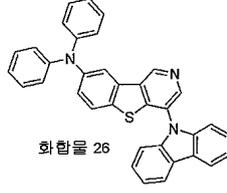
화합물 23



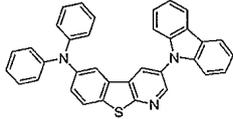
화합물 24



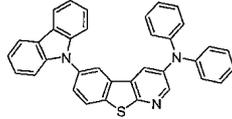
화합물 25



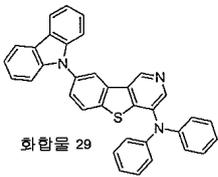
화합물 26



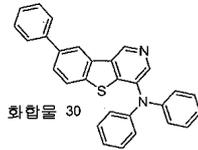
화합물 27



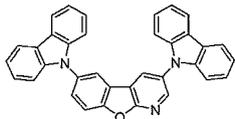
화합물 28



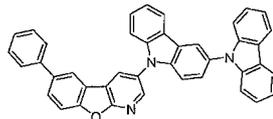
화합물 29



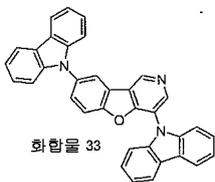
화합물 30



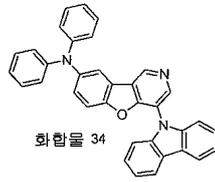
화합물 31



화합물 32

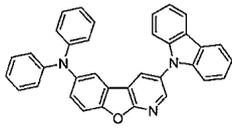


화합물 33

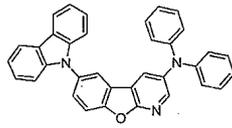


화합물 34

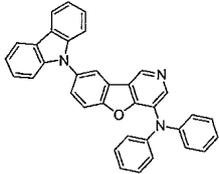
[0116]



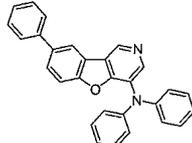
화합물 35



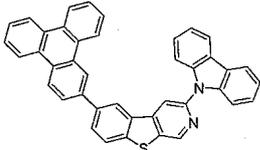
화합물 36



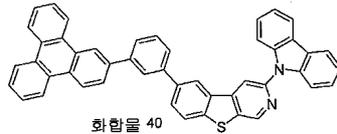
화합물 37



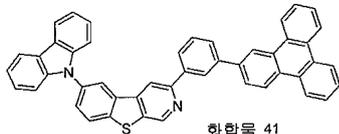
화합물 38



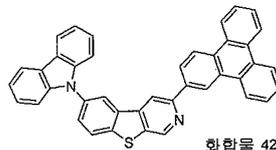
화합물 39



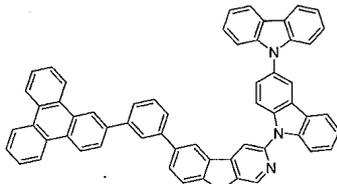
화합물 40



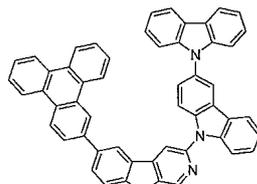
화합물 41



화합물 42

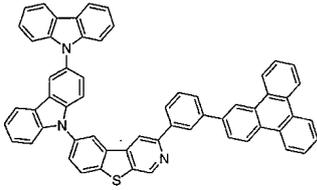


화합물 43

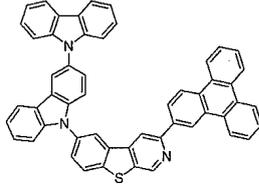


화합물 44

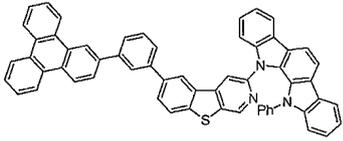
[0117]



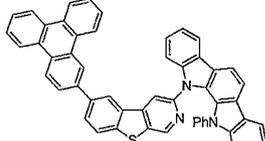
화합물 45



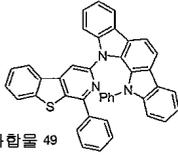
화합물 46



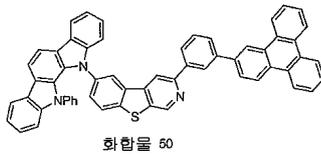
화합물 47



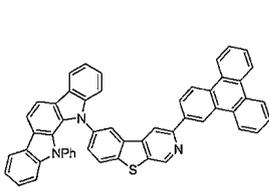
화합물 48



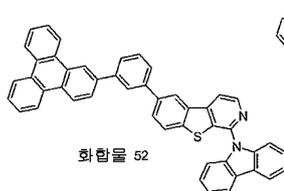
화합물 49



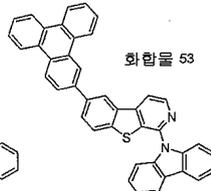
화합물 50



화합물 51

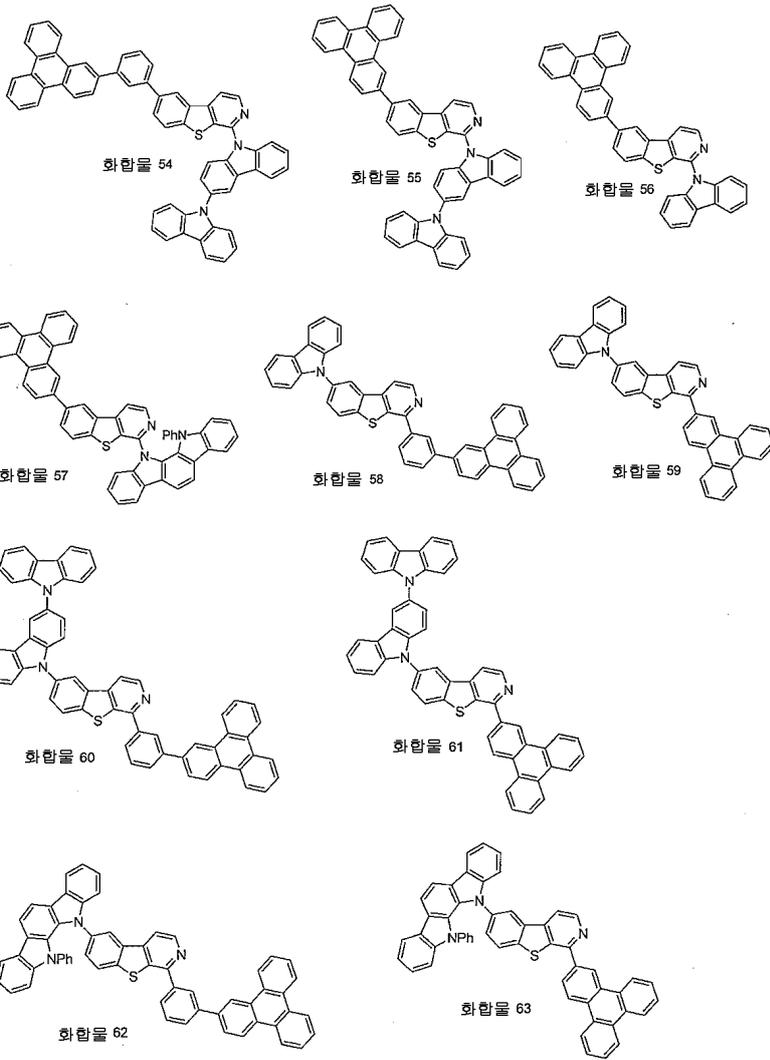


화합물 52

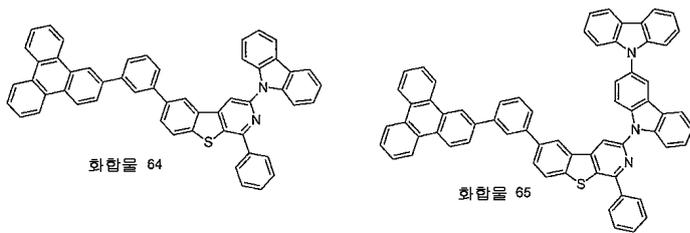


화합물 53

[0118]

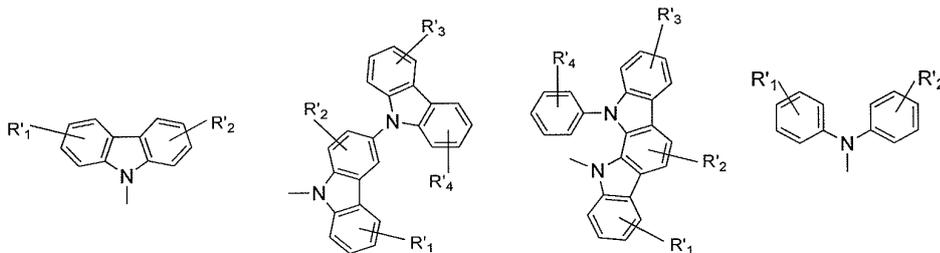


[0119]



[0120]

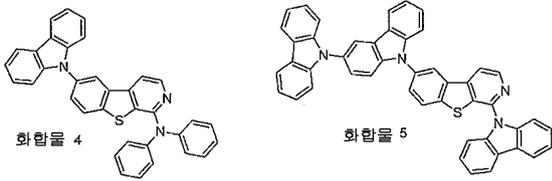
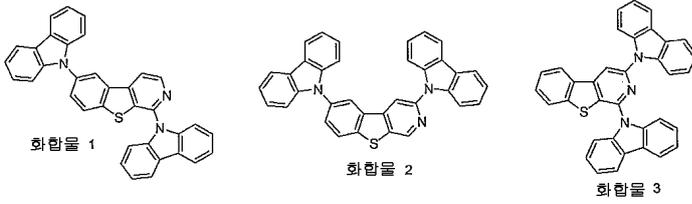
[0121] 한 양태에서, R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 수소 및 하기로 구성된 군으로부터 선택된다:



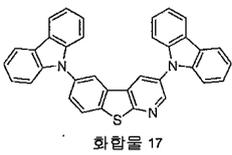
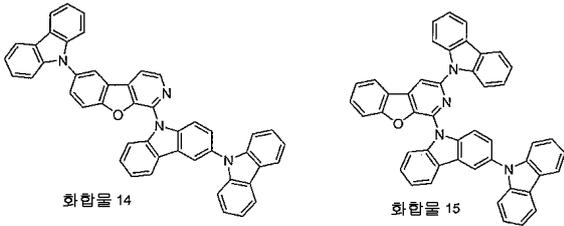
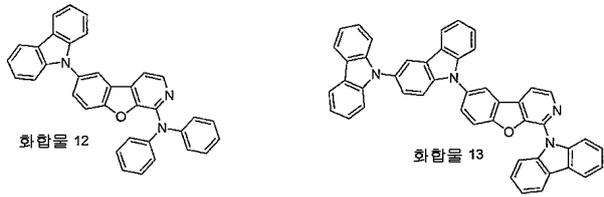
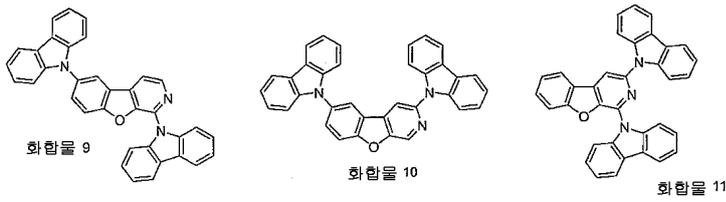
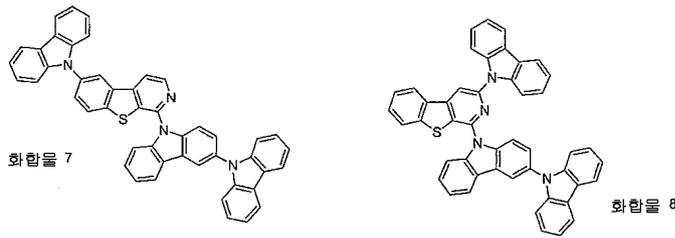
[0122]

[0123] R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 독립적으로 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군으로부터 선택된다. 바람직하게는 R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 각각 독립적으로 수소 또는 메틸이다.

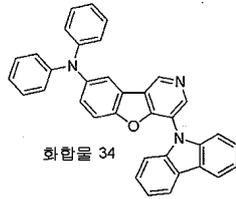
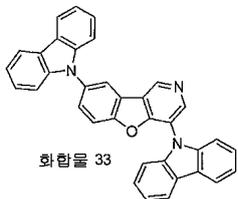
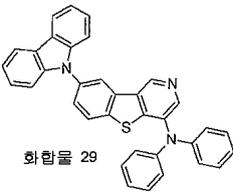
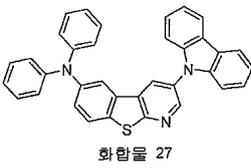
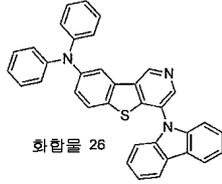
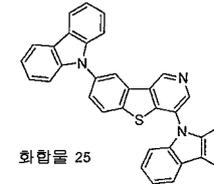
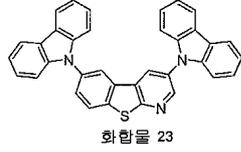
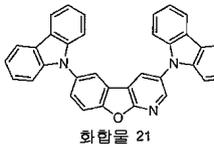
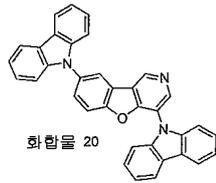
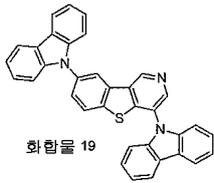
[0124] 이러한 화합물의 특징으로는 하기로 구성된 군으로부터 선택된 화합물을 들 수 있다:



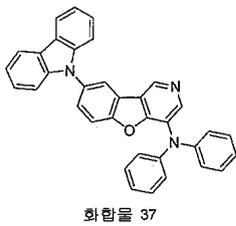
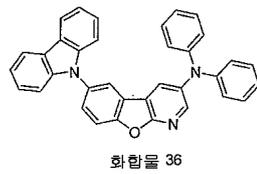
[0125]



[0126]

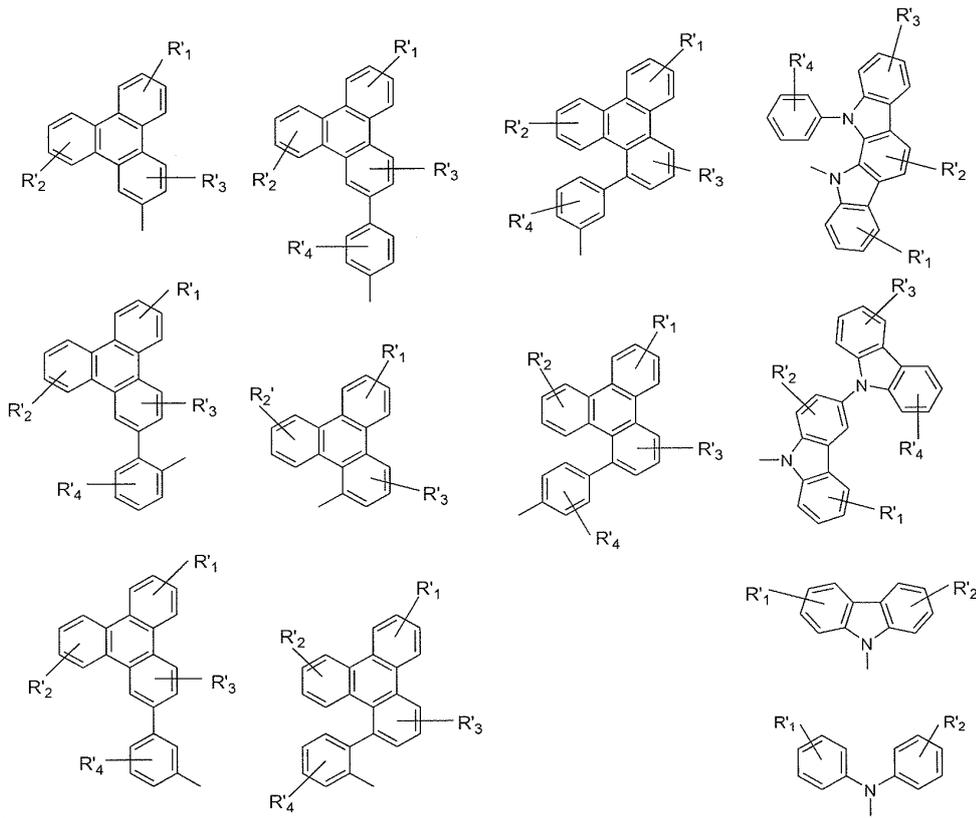


[0127]



[0128]

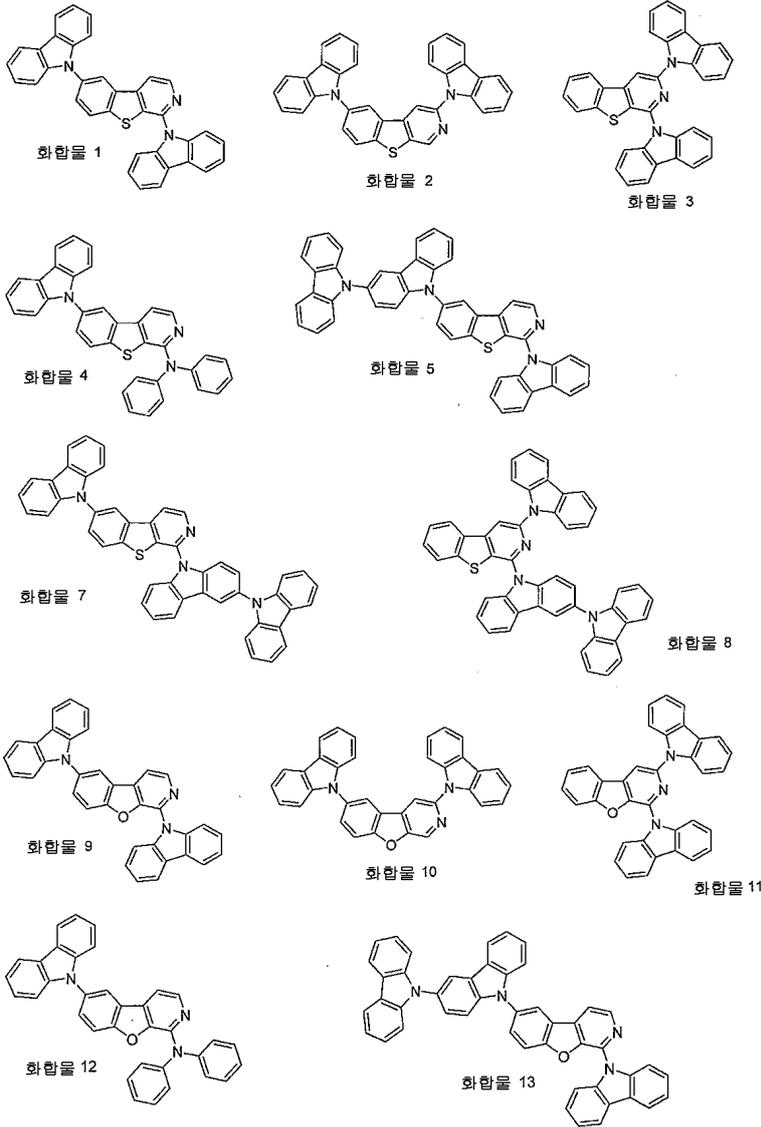
[0129] 한 양태에서, R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 수소 및 하기로 구성된 군으로부터 선택된다:



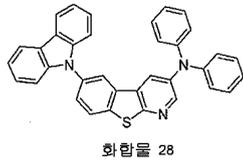
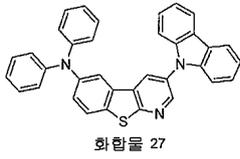
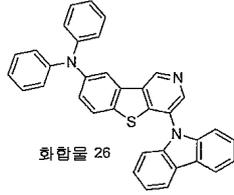
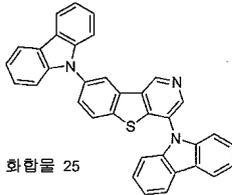
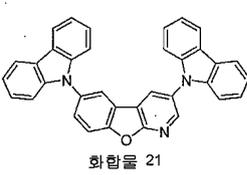
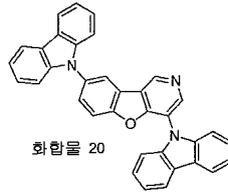
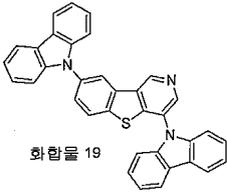
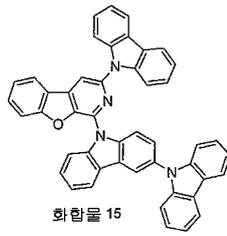
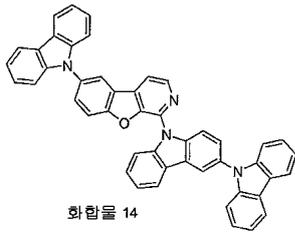
[0130]

[0131] R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 독립적으로 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군으로부터 선택된다. 바람직하게는 R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 각각 독립적으로 수소 또는 메틸이다.

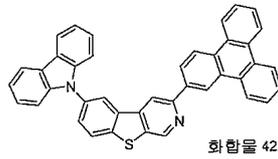
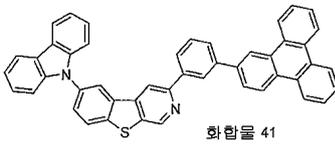
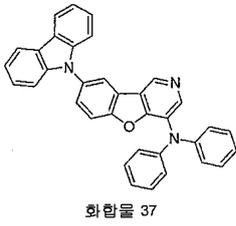
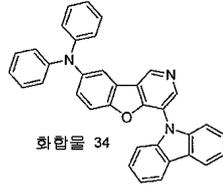
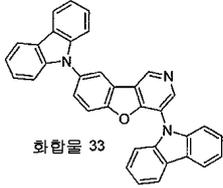
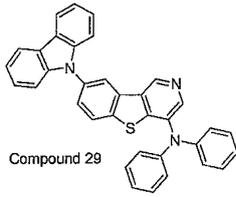
[0132] 이러한 화합물의 특징으로는 하기로 구성된 군으로부터 선택된 화합물을 들 수 있다:



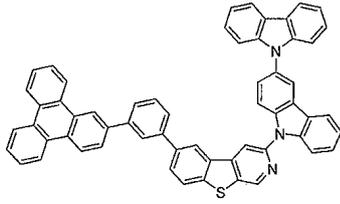
[0133]



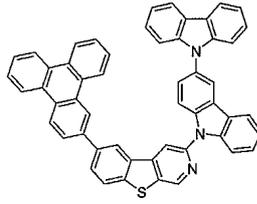
[0134]



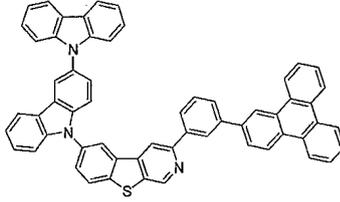
[0135]



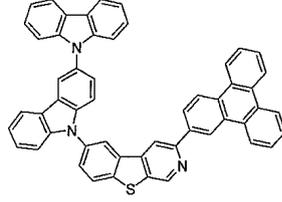
화합물 43



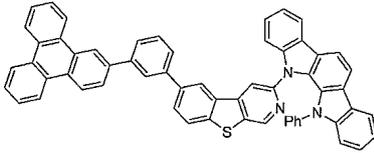
화합물 44



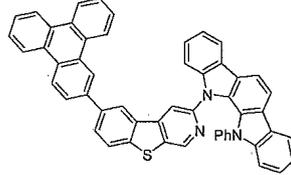
화합물 45



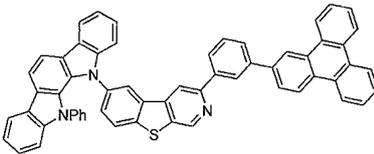
화합물 46



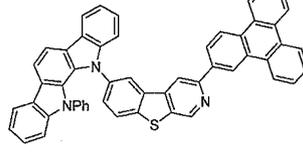
화합물 47



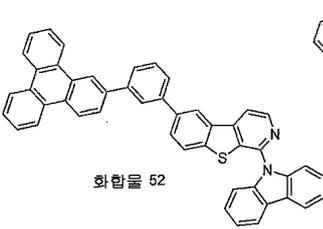
화합물 48



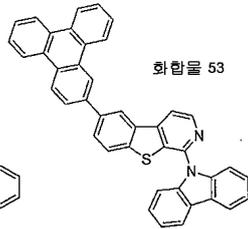
화합물 50



화합물 51

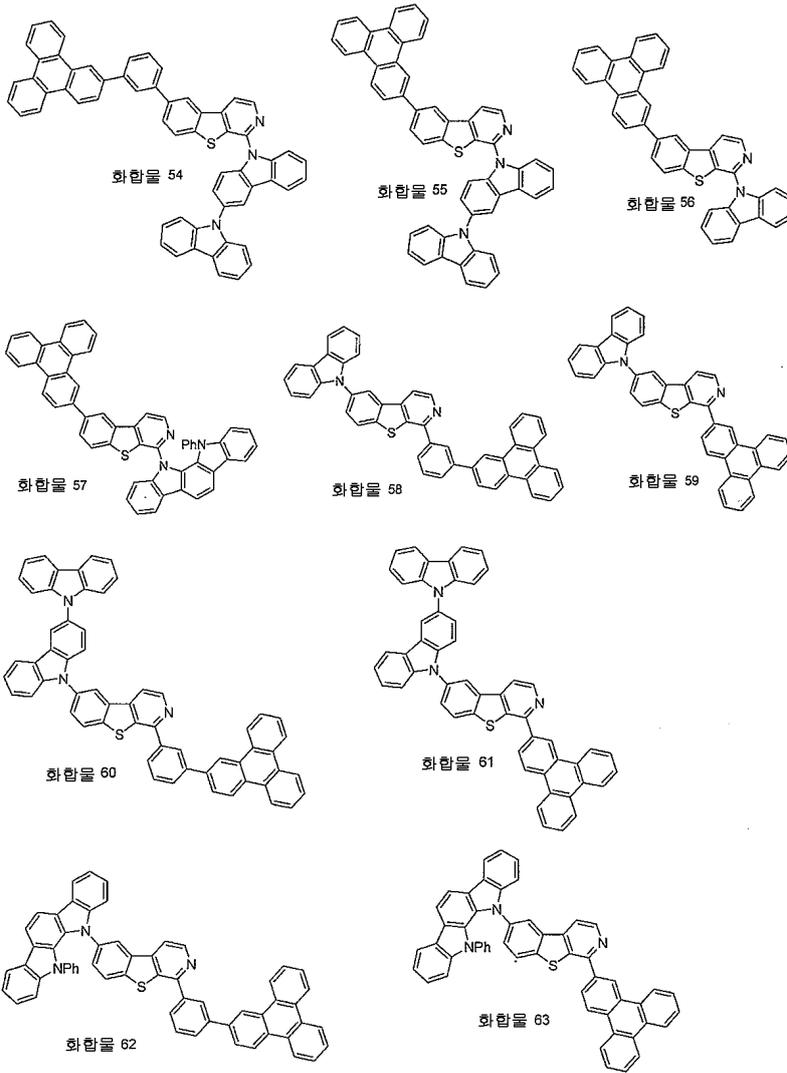


화합물 52

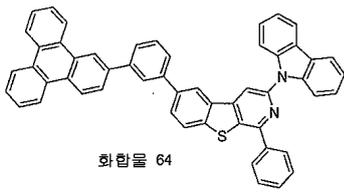


화합물 53

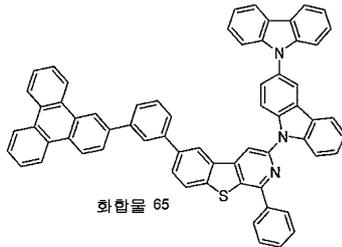
[0136]



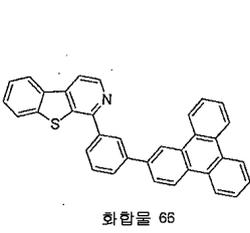
[0137]



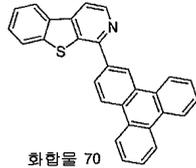
화합물 64



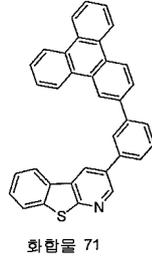
화합물 65



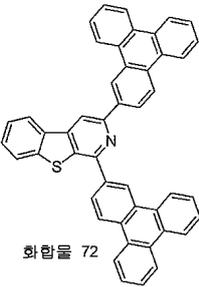
화합물 66



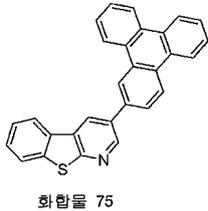
화합물 70



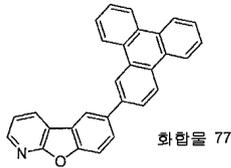
화합물 71



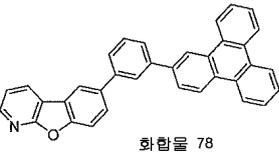
화합물 72



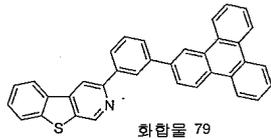
화합물 75



화합물 77



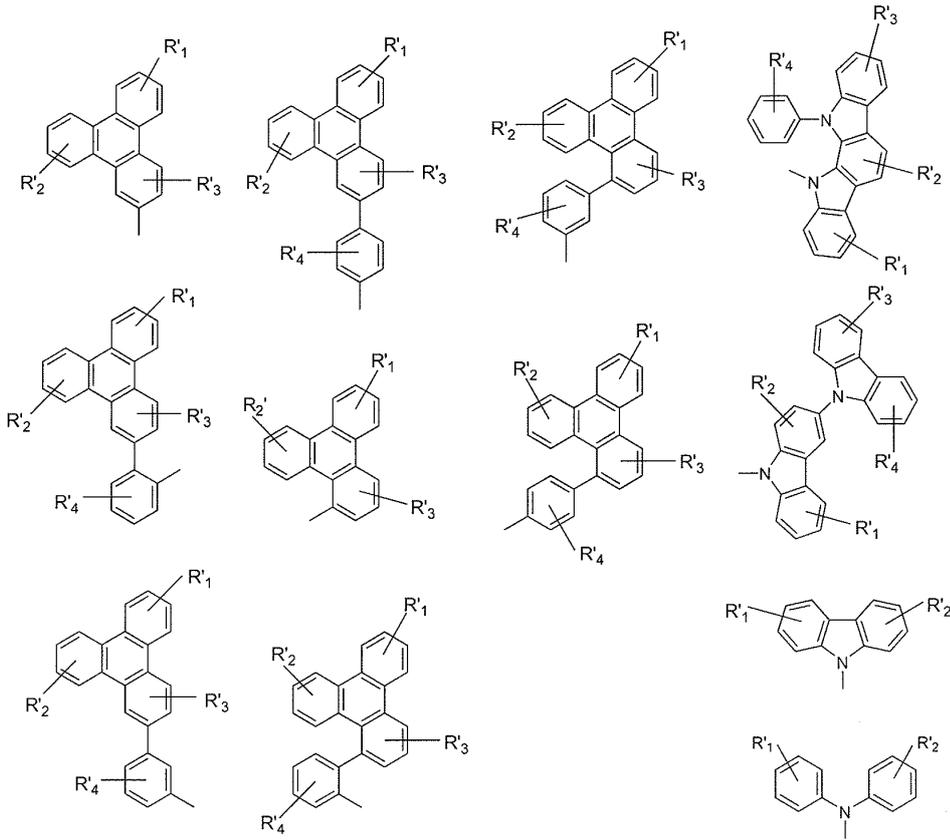
화합물 78



화합물 79

[0138]

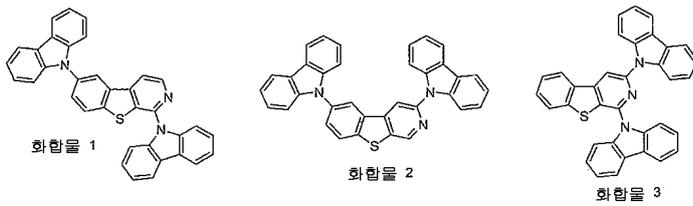
[0139] 한 양태에서, R₁은 하기로 구성된 군으로부터 선택된다:



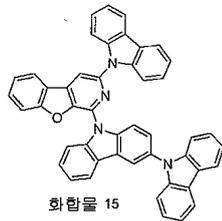
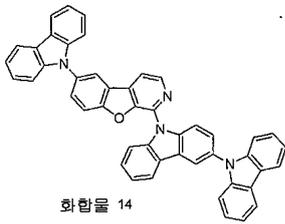
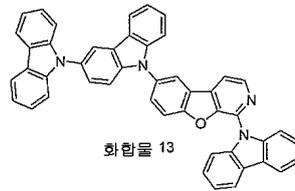
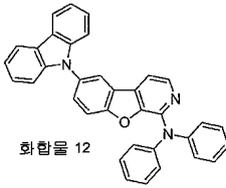
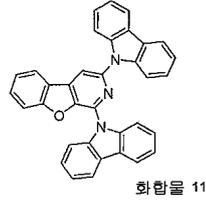
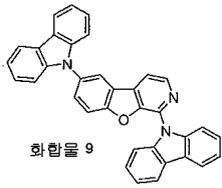
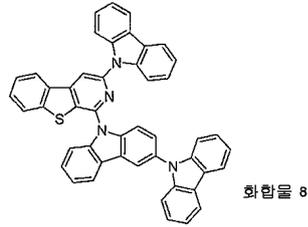
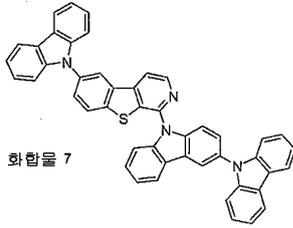
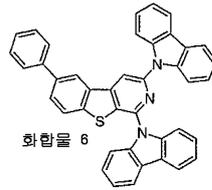
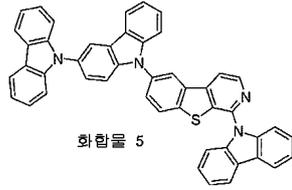
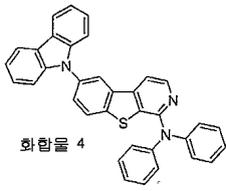
[0140]

[0141] R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 독립적으로 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군으로부터 선택된다. R₂는 수소이다. 바람직하게는 R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 각각 독립적으로 수소 또는 메틸이다.

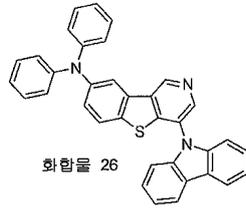
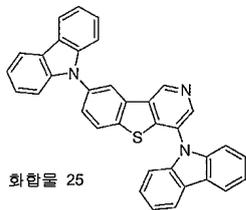
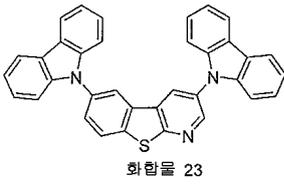
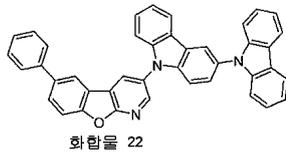
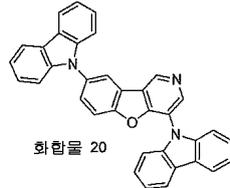
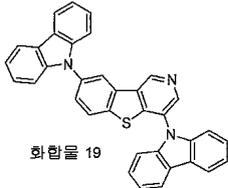
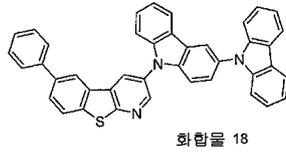
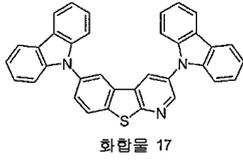
[0142] 이러한 화합물의 특정예로는 하기로 구성된 군으로부터 선택된 화합물을 들 수 있다:



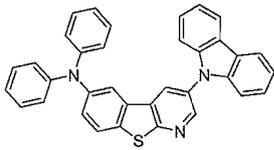
[0143]



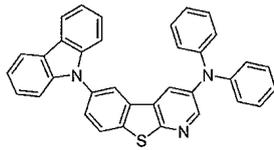
[0144]



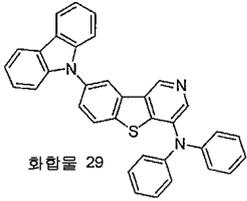
[0145]



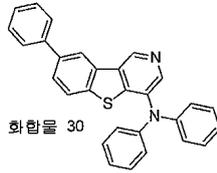
화합물 27



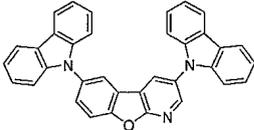
화합물 28



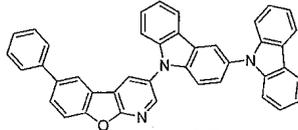
화합물 29



화합물 30



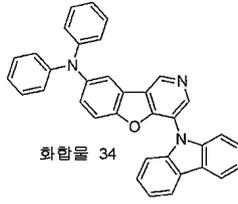
화합물 31



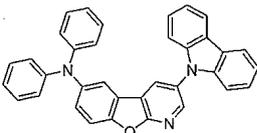
화합물 32



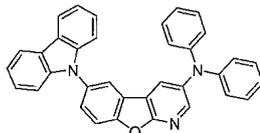
화합물 33



화합물 34

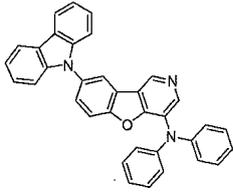


화합물 35

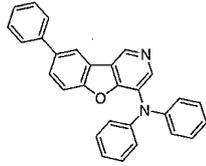


화합물 36

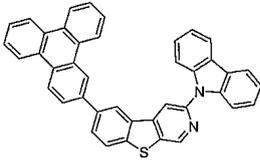
[0146]



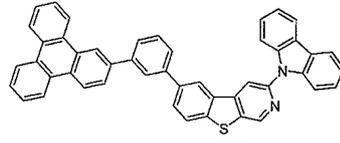
화합물 37



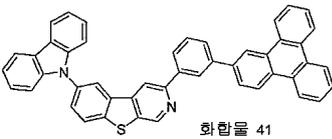
화합물 38



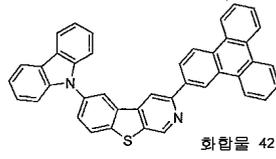
화합물 39



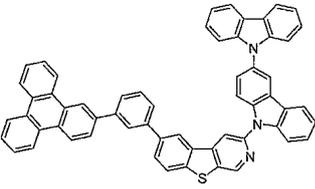
화합물 40



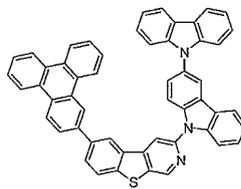
화합물 41



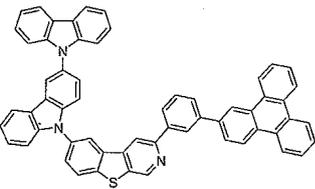
화합물 42



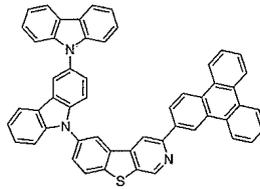
화합물 43



화합물 44

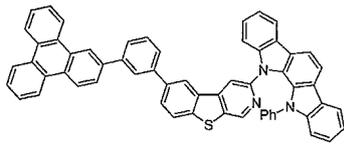


화합물 45

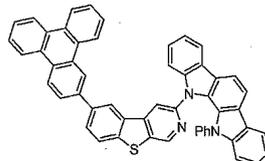


화합물 46

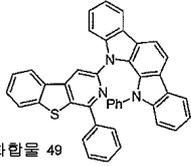
[0147]



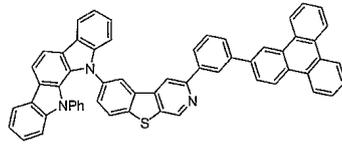
화합물 47



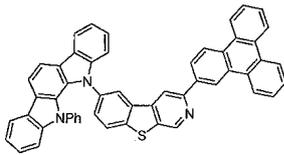
화합물 48



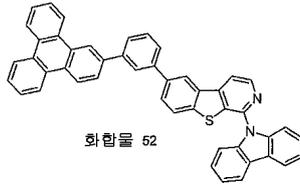
화합물 49



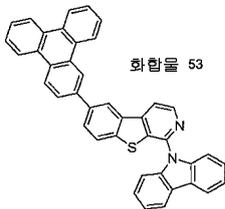
화합물 50



화합물 51

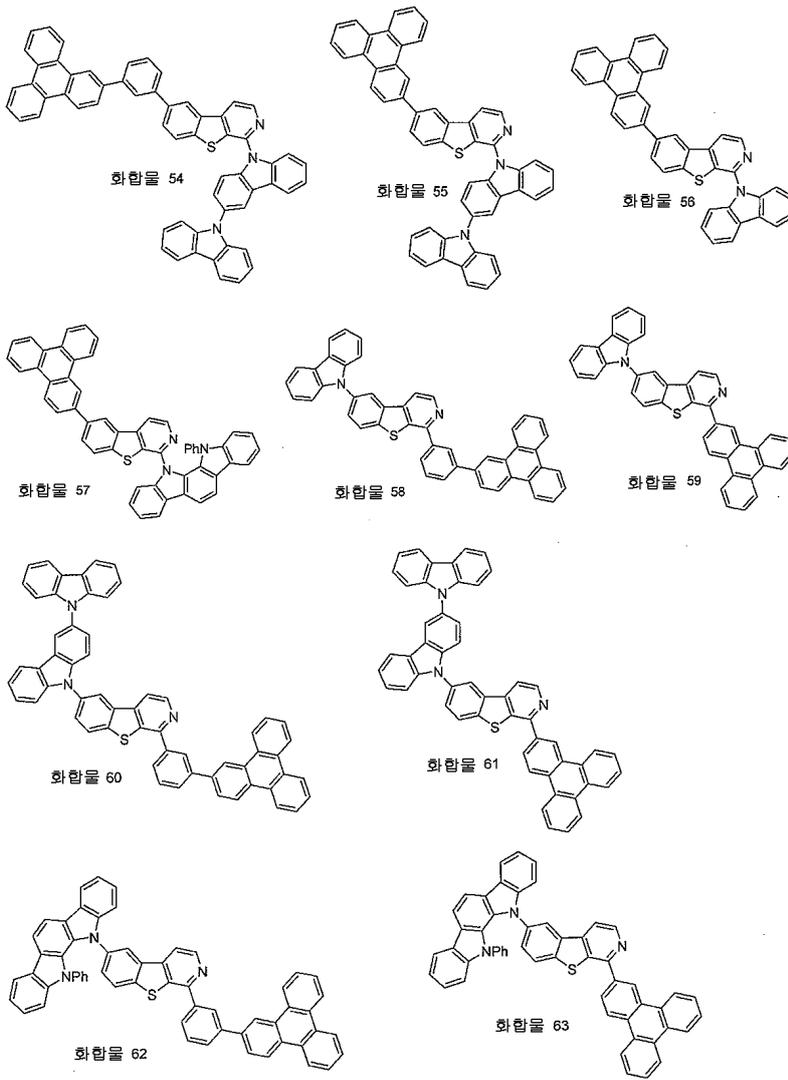


화합물 52



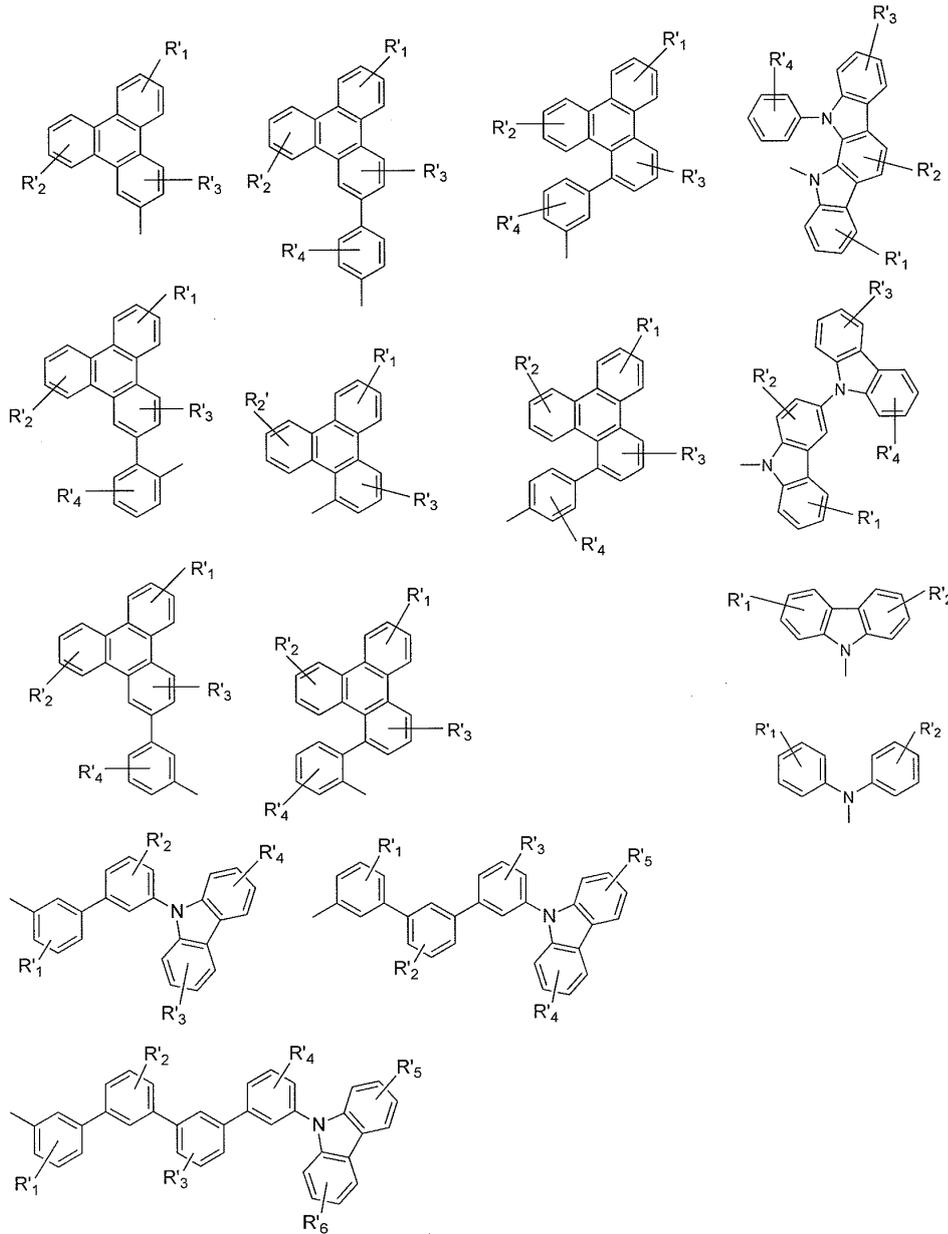
화합물 53

[0148]



[0149]

R₁ 및 R₂ 중 1 이상은 하기로 구성된 군으로부터 선택된다:



[0155]

[0156]

R₃ 및 R₄는 1개, 2개, 3개, 4개 또는 5개의 치환을 나타낼 수 있다. R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 독립적으로 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군으로부터 선택된다.

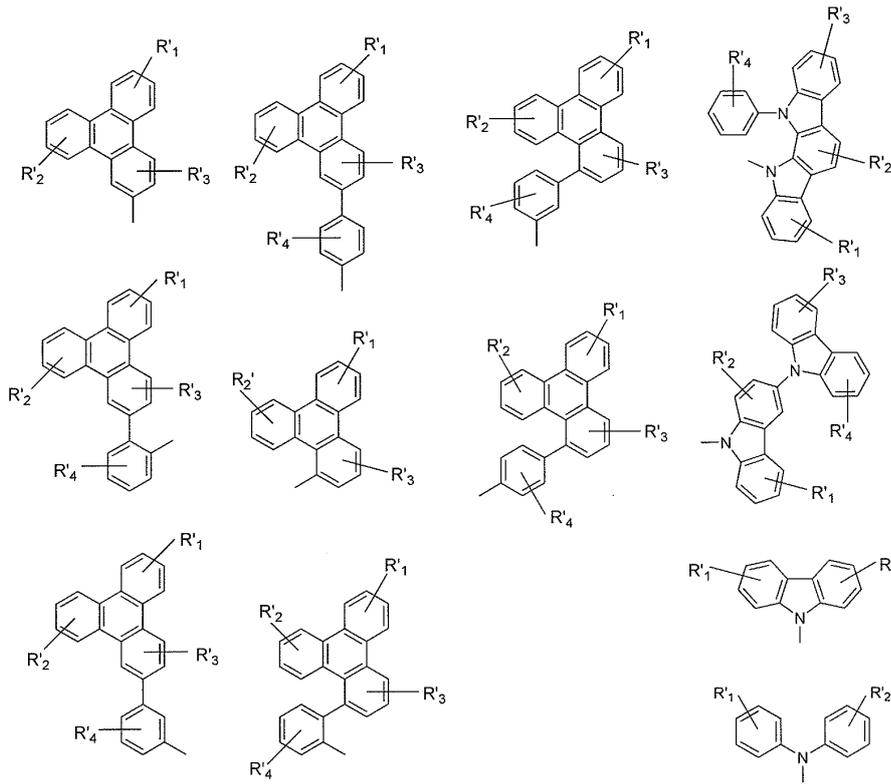
[0157]

한 양태에서, 상기 제1 디바이스는 소비 제품이다.

[0158]

추가로, 유기 발광 디바이스가 제공된다. 상기 디바이스는 애노드, 캐소드, 및 그 애노드와 캐소드 사이에 위치하는 유기층을 포함하며, 여기서 상기 유기층은 화학식 (I)을 갖는 화합물을 포함한다. 바람직하게는, m 및 n은 0, 1, 2, 3 또는 4이고; m+n은 2 이상이고, m+n은 6 이하이다.

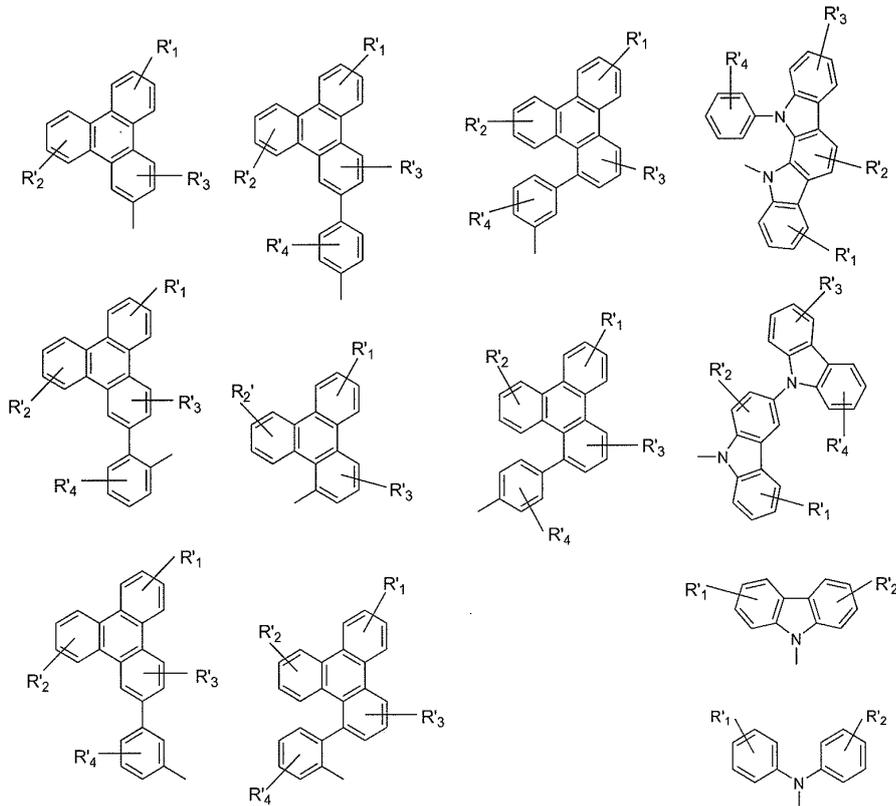
[0159] 한 양태에서, R₁ 및 R₂ 중 1 이상은 하기로 구성된 군으로부터 선택된다:



[0160]

[0161] R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 독립적으로 수소, 알킬, 헤테로알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군으로부터 선택된다.

[0162] 한 양태에서, R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 수소 및 하기로 구성된 군으로부터 선택된다:

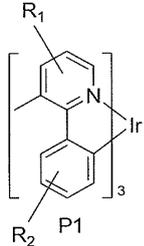


[0163]

[0164] 한 양태에서, 화합물 1~93으로 구성된 군으로부터 선택된 화합물을 함유하는 디바이스가 제공된다.

[0165] 특히, 상기 화합물이 화합물 1~79로 구성된 군으로부터 선택된 화합물인 디바이스가 제공된다.

[0166] 한 양태에서, 상기 유기층은 발광층이고, 화학식 (I)을 갖는 아자-디벤조티오펜 및 아자-디벤조푸란은 상기 유기층 중의 호스트이다. 상기 유기층은 발광성 도판트를 추가로 포함할 수 있다. 바람직하게는, 상기 발광성 도판트는 하기 화학식을 가진다:

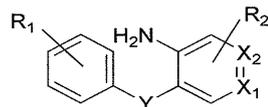


[0167] 여기서 R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 수소, 알킬 및 아릴로 구성된 군으로부터 선택된다.

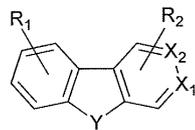
[0168] 상기 논의된 바와 같이, 화학식 (I)을 갖는 상기 아자-디벤조티오펜 및 아자-디벤조푸란 화합물은 상기 발광층에서 호스트 물질로서 이롭게 사용될 수 있다. 그러나, 이러한 화합물은 또한 강화층에서의 물질로서 사용될 수 있다. 특히, 본원에서 기술된 화합물은 차단층에서의 물질로서 사용될 수 있다.

[0169] 소비자 디바이스가 또한 제공되며, 여기서 상기 디바이스는 애노드, 캐소드 및 유기층을 추가로 포함한다. 상기 유기층은 화학식 (I)을 갖는 아자-디벤조티오펜 또는 아자-디벤조푸란 화합물을 추가로 포함한다.

[0170] 추가로, 아자-디벤조티오펜 화합물 또는 아자-디벤조푸란 화합물의 제조 방법이 제공된다(도 4 정상부에



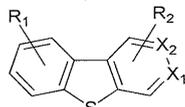
에시워). 상기 방법은 화학식



을 ^tBuONO로 처리하여 화학식

을 갖는 아자 착물을 생성하는 것을 포함한다. Y는 S 또는 O이다. X₁ 또는 X₂는 질소이다. R₁ 및 R₂는 1개, 2개, 3개 또는 4개의 치환일 수 있다. R₁은 수소, 알킬, 아릴 및 헤테로아릴로 구성된 군으로부터 선택되고; R₂는 수소, 알킬, 아릴 및 할라이드로 구성된 군으로부터 선택된다. 예를 들어, 피리딘 고리 상의 할라이드 치환을 갖는 중간체 3-아미노-4-아릴티오 피리딘의 아세트산 용액, 또는 상기 피리딘 고리 상에 할라이드 치환을 갖는 중간체 3-아릴티오-4-아미노 피리딘의 아세트산 용액을 ^tBuONO 1~2 당량에 의해 실온에서 기체가 발생하지 않을 때까지, 일반적으로 1~3 시간 동안 처리할 수 있다.

[0171] 특히 상기 방법의 예로는 중간체 및 아자 착물(여기서, Y는 S임)(즉, 디벤조티오펜 중간체 및 아자-디벤조티오펜 착물)을 포함한다. 대안적으로, 상기 방법은 바람직하게는 중간체 및 아자 착물(여기서, Y는 O임)(즉, 디벤조푸란 중간체 및 아자-디벤조푸란 착물)을 포함한다. 본원에서 제공된 방법은 상기 아자 착물을 50% 이상 또



는 70% 이상으로 산출할 수 있다. 구체적으로, 의 수율은 50% 이상일 수 있다.

[0172] 아자-디벤조티오펜 또는 아자-디벤조푸란 화합물의 제조 방법의 예는 X₁ 및 X₂ 중 하나가 탄소이고 다른 하나가 질소인 중간체를 포함한다. 상기 방법의 구체예에서, X₁은 질소이고, X₂는 탄소이다. 또다른 특정예에서, X₁은 탄소이고, X₂는 질소이다.

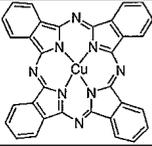
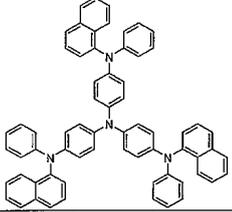
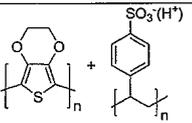
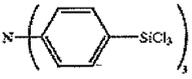
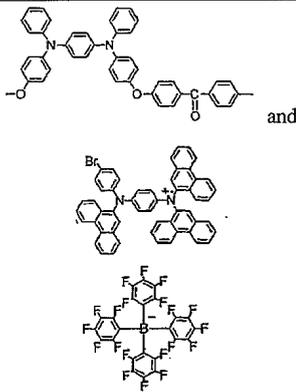
[0173] 아자-디벤조티오펜 또는 아자-디벤조푸란 화합물의 제조 방법의 예는 R₂가 1 이상 할라이드를 포함하는 화합물을 포함한다. 상기 방법의 구체예에서, R₂는 할라이드 치환만을 포함한다. 더욱이, R₁은 바람직하게는 할라이드이다. 할라이드 치환기는 비한정적으로 브롬화물, 염화물, 불화물 및 요오드화물을 포함할 수 있다.

[0174] 상기 방법을 또한 이용하여 R₂가 할라이드가 아닌(즉, 상기 피리딘 고리 상에 추가 치환기가 없음) 아자-디벤조티오펜 또는 아자-디벤조푸란 화합물을 제조할 수 있다. 피리딘 고리 상에 할라이드 치환기가 없는 이러한 아자 화합물에 대해서, 상기 아미노-아릴티오 피리딘 중간체를 ^tBuONO로 처리하기 전에 H₂SO₄로 처리한다(도 4 하부에 예시됨). 예를 들어, 상기 중간체 3-아미노-4-아릴티오 피리딘의 아세트산 용액 또는 상기 중간체 3-아릴티오-4-아미노 피리딘의 아세트산 용액을 5 당량의 H₂SO₄로 처리한 후, 1~2 당량의 ^tBuONO로 기체가 발생하지 않을 때까지, 일반적으로 약 1~5 시간 동안 처리할 수 있다.

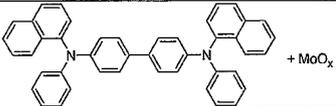
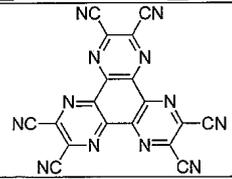
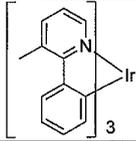
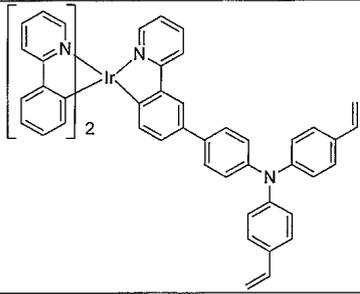
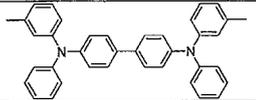
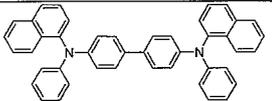
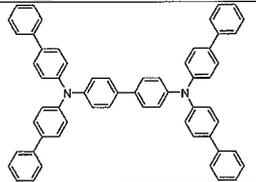
[0175] 유기 발광 디바이스 중 특정 층에 유용한 것으로 본 원에서 기술된 물질은 상기 디바이스에 존재하는 다른 다양한 물질과 병용할 수 있다. 예를 들어, 본 원에서 개시된 발광성 도판트는 다양한 호스트, 이송층, 차단층, 주입층, 전극 및 다른 존재할 수 있는 층과 함께 사용할 수 있다. 하기 기술 또는 언급되는 물질은 본 원에서 개시된 화합물과의 조합에 유용할 수 있는 물질의 비한정예이며, 당업자는 조합에 유용할 수 있는 다른 물질을 확인하기 위한 문헌을 용이하게 조언할 수 있다.

[0176] 본 원에서 개시된 물질 이외에 및/또는 이와 조합하여, 많은 정공 주입 물질, 정공 이송 물질, 호스트 물질, 도판트 물질, 엑시톤/정공 차단층 물질, 전자 이송 및 전자 주입 물질을 OLED에 사용할 수 있다. OLED에서 본 원에서 기술된 물질과 조합하여 사용할 수 있는 물질의 비한정적인 예가 하기 표 1에 기재되어 있다. 표 1은 물질의 비한정적인 부류, 각 부류에 대한 화합물의 비한정적인 예 및 상기 물질을 개시하는 참조 문헌을 기재한다.

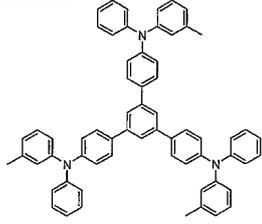
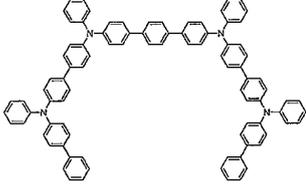
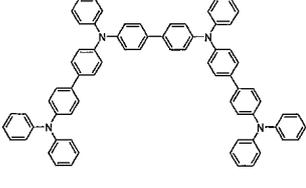
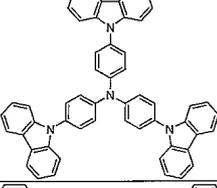
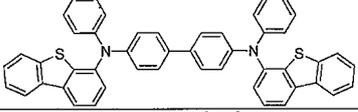
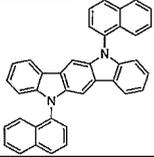
[0177] 표 1

물질	물질예	공개 문헌
정공 주입 물질 프탈로시아닌 및 포르피린 화합물		Appl. Phys. Lett. 69, 2160 (1996)
스타버스트형 트리아릴아민		J. Lumin. 72-74, 985 (1997)
CF _x 불화탄화수소 중합체	$\text{-(CH}_2\text{F}_y\text{)-}_n$	Appl. Phys. Lett. 78, 673 (2001)
전도성 중합체 (예를 들어, PEDOT; PSS, 폴리아닐린, 폴리티오펜)		Synth. Met. 87, 171 (1997) WO2007002683
포스포산 및 실란 SAM		US20030162053
전도 도판트를 갖는 트리아릴아민 또는 폴리티오펜 중합체		EA01725079A1

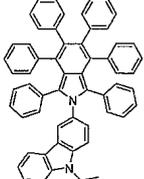
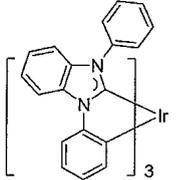
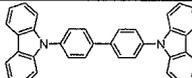
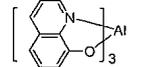
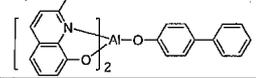
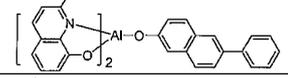
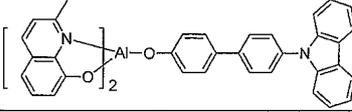
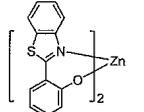
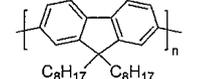
[0178]

<p>금속 산화물, 예컨대 폴리브롬덴 및 텅스텐 산화물과 착화된 아릴아민</p>	 <p>+ MoO_x</p>	<p>SID Symposium Digest, 37, 923 (2006) WO2009018009</p>
<p>P형 반도체성 유기 착물</p>		<p>US20020158242</p>
<p>금속 유기금속성 착물</p>		<p>US20060240279</p>
<p>가교결합성 화합물</p>		<p>US20080220265</p>
<p>정공 이송 물질</p>		
<p>트리아릴아민 (예를 들어, TPD, α-NPD)</p>		<p>Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987)</p>
		<p>US5061569</p>
		<p>EP650955</p>

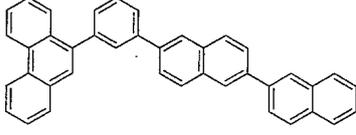
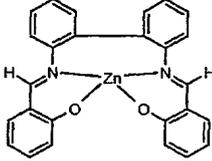
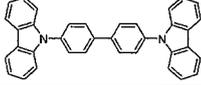
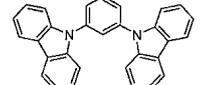
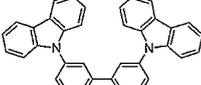
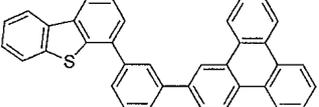
[0179]

		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)
아릴아민 카르바졸 화합물		Adv. Mater. 6, 677 (1994), US20080124572
(디)벤조티오펜/ (디)벤조푸란을 갖는 트리아릴아민		US20070278938, US20080106190
인들로카르바졸		Synth. Met. 111, 421 (2000)

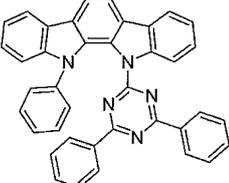
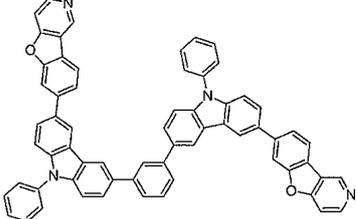
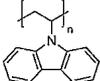
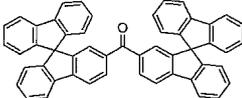
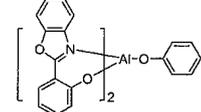
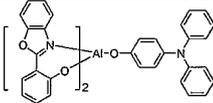
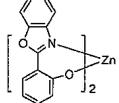
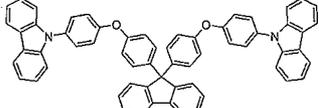
[0180]

이소인들 화합물		Chem. Mater. 15, 3148 (2003)
금속 카르벤 착물		US20080018221
인광성 OLED 호스트 물질		
적색 호스트		
아릴카르바졸		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
금속 8-히드록시퀴놀레이트 (예를 들어, Alq3, BAlq)		Nature 395, 151 (1998)
		US20060202194
		WO2005014551
		WO2006072002
금속 페녹시벤조티아졸 화합물		Appl. Phys. Lett. 90, 123509 (2007)
컨쥬게이팅된 올리고머 및 중합체 (예를 들어, 폴리플루오렌)		Org. Electron. 1, 15 (2000)

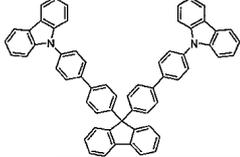
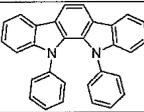
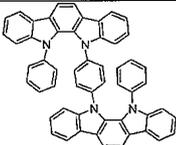
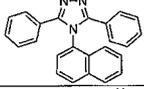
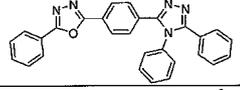
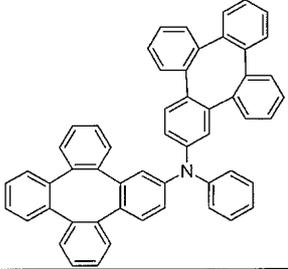
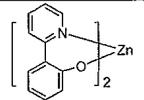
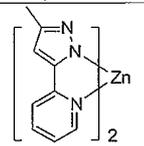
[0181]

<p>방향족 융합 고리</p>		<p>WO2009066779, WO2009066778, WO2009063833, US20090045731, US20090045730, WO2009008311, US2009008605, US20090009065</p>
<p>아연 착물</p>		<p>WO2009062578</p>
<p>녹색 호스트</p>		
<p>아릴카르바졸</p>		<p>Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)</p>
		<p>US20030175553</p>
		<p>WO2001039234</p>
<p>아릴트리페닐렌 화합물</p>		<p>US20060280965</p>
		<p>US20060280965</p>
		<p>WO2009021126</p>

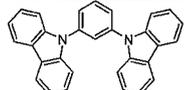
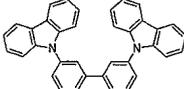
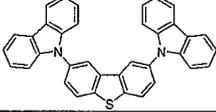
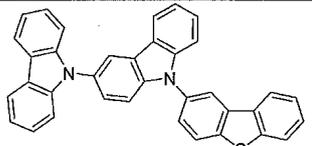
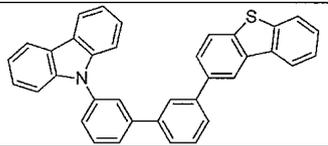
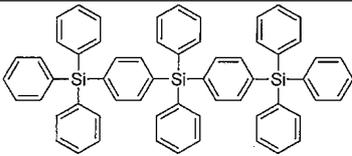
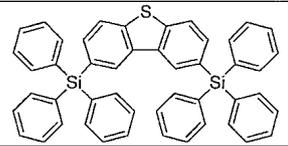
[0182]

공여체 수용체 유형 분자		WO2008056746
아자-카르바졸/DBT/DBF		JP2008074939
중합체 (예를 들어, PVK)		Appl. Phys. Lett. 77, 2280 (2000)
스피로플루오렌 화합물		WO2004093207
금속 페녹시벤조옥사졸 화합물		WO2005089025
		WO2006132173
		JP200511610
스피로플루오렌-카르바졸 화합물		JP2007254297

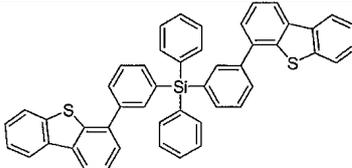
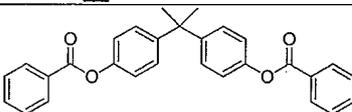
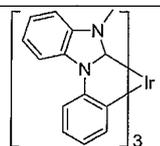
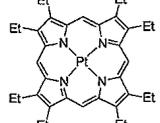
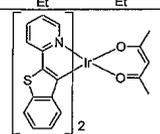
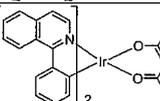
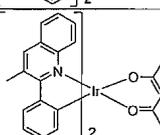
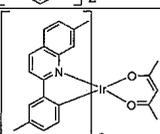
[0183]

		JP2007254297
인돌로카르바졸		WO2007063796
		WO2007063754
5원 고리 전자 결핍 이종환 (예를 들어, 트리아졸, 옥사디아졸)		J. Appl. Phys. 90, 5048 (2001)
		WO2004107822
테트라페닐렌 착물		US20050112407
금속 페녹시피리딘 화합물		WO2005030900
금속 배위 착물 (예를 들어, N^N 리간드를 갖는 Zn, Al)		US20040137268, US20040137267
형색 호스트		

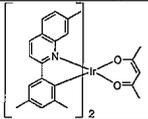
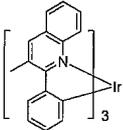
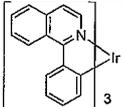
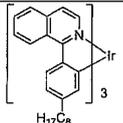
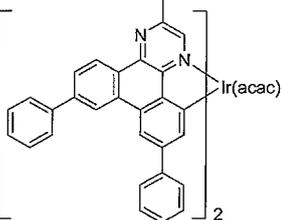
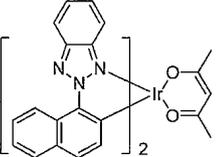
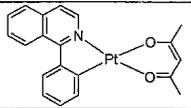
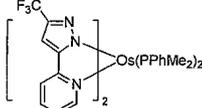
[0184]

아릴카르바졸		Appl. Phys. Lett, 82, 2422 (2003)
		US20070190359
디벤조티오펜/디벤조푸란-카르바졸 화합물		WO2006114966, US20090167162
		US20090167162
		WO2009086028
		US20090030202, US20090017330
규소 아릴 화합물		US20050238919
		WO2009003898

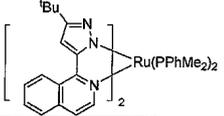
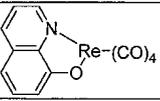
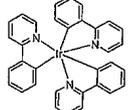
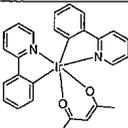
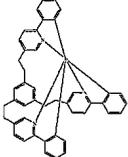
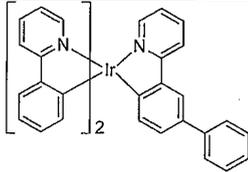
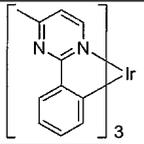
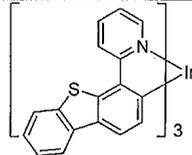
[0185]

<p>규소/게르마늄 아릴 화합물</p>		<p>EP2034538A</p>
<p>아릴 벤조일 에스테르</p>		<p>WO2006100298</p>
<p>백은 트리플렛 민감도 유기금속 착물</p>		<p>US7154114</p>
<p>인광성 도판트</p>		
<p>적색 도판트</p>		
<p>중금속 포르피린 (예를 들어, PtOEP)</p>		<p>Nature 395, 151 (1998)</p>
<p>이리듐(III) 유기금속성 착물</p>		<p>Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)</p>
		<p>US2006835469</p>
		<p>US2006835469</p>
		<p>US20060202194</p>

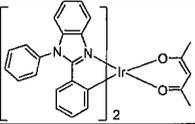
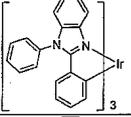
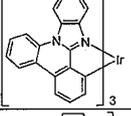
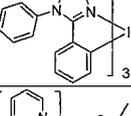
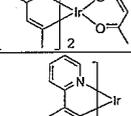
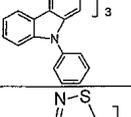
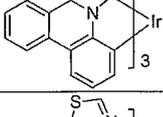
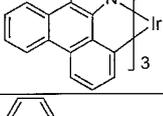
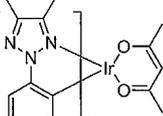
[0186]

		US20060202194
		US20070087321
		US20070087321
		Adv. Mater. 19, 739 (2007)
		WO2009100991
		WO2008101842
백금(II) 유기금속성 착물		WO2003040257
오스뮴(III) 착물		Chem. Mater. 17, 3532 (2005)

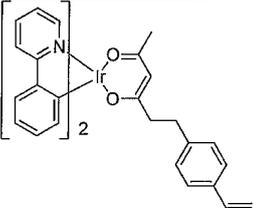
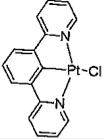
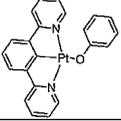
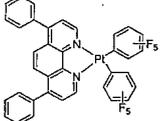
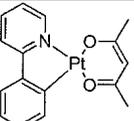
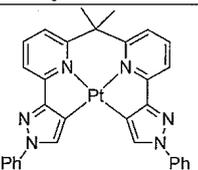
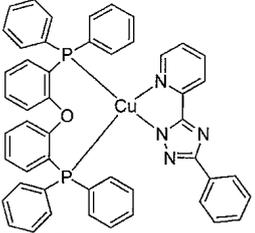
[0187]

루테늄(II) 착물		Adv. Mater. 17, 1059 (2005)
레늄 (I), (II) 및 (III) 착물		US20050244673
복색 도판트		
이리듐(III) 유기금속성 착물	 <p>및 이의 유도체</p>	Inorg. Chem. 40, 1704 (2001)
		US20020034656
		US7332232
		US20090108737
		US20090039776
		US6921915

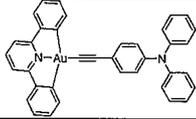
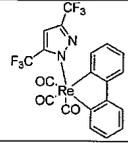
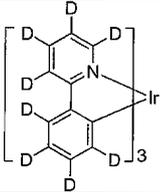
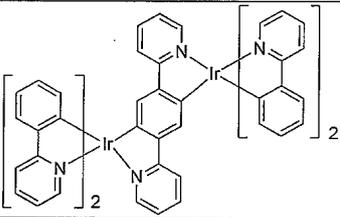
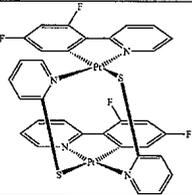
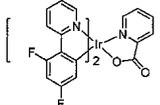
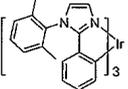
[0188]

		US6687266
		Chem. Mater. 16, 2480 (2004)
		US20070190359
		US 20060008670 JP2007123392
		Adv. Mater. 16, 2003 (2004)
		Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7800
		WO2009050290
		US20090165846
		US20080015355

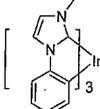
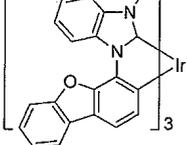
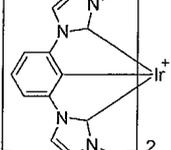
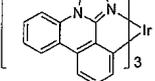
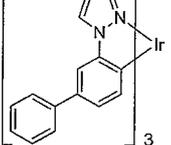
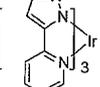
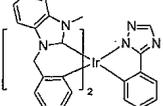
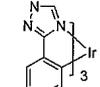
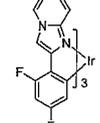
[0189]

<p>중합체 금속 유기금속성 화합물에 대한 단량체</p>		<p>US7250226, US7396598</p>
<p>여러 자리 리간드를 포함하는 Pt(II) 유기금속성 착물</p>		<p>Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)</p>
		<p>Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)</p>
		<p>Chem. Lett. 34, 592 (2005)</p>
		<p>WO2002015645</p>
		<p>US20060263635</p>
<p>Cu 착물</p>		<p>WO2009000673</p>

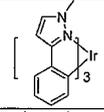
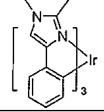
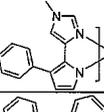
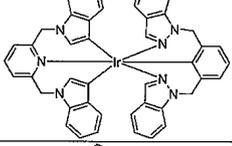
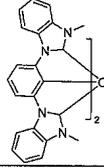
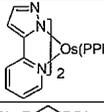
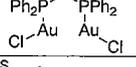
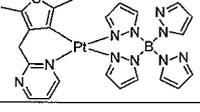
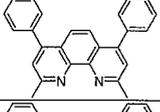
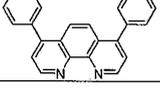
[0190]

금 착물		Chem. Commun. 2906 (2005)
류테튬(III) 착물		Inorg. Chem. 42, 1248 (2003)
중수소화 유기금속성 착물		US20030138657
2 이상의 금속 중심을 갖는 유기금속성 착물		US20030152802
		US7090928
<p>형색 도판트</p> <p>이리듐(III) 유기금속성 착물</p>		WO2002002714
		WO2006009024
		US20060251923

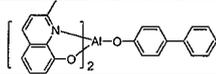
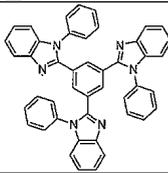
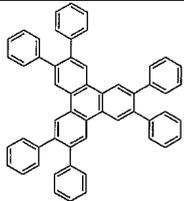
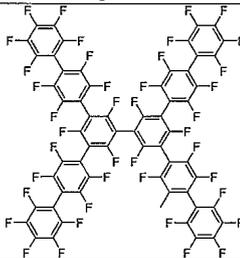
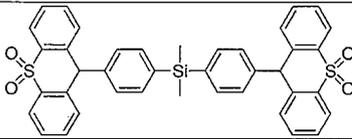
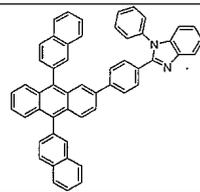
[0191]

		<p>US7393599, WO2006056418, US20050260441, WO2005019373</p>
		<p>US7534505</p>
		<p>US7445855</p>
		<p>US20070190359, US20080297033</p>
		<p>US7338722</p>
		<p>US20020134984</p>
		<p>Angew. Chem. Int. Ed. 47, 1 (2008)</p>
		<p>Chem. Mater. 18, 5119 (2006)</p>
		<p>Inorg. Chem. 46, 4308 (2007)</p>

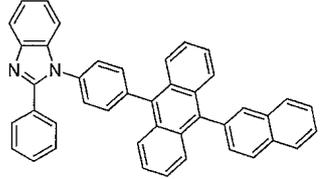
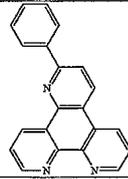
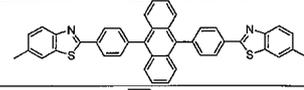
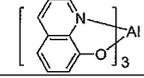
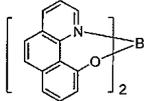
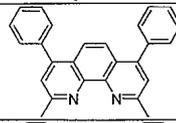
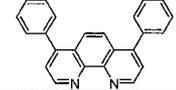
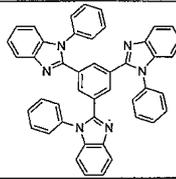
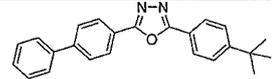
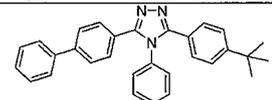
[0192]

		WO2005123873
		WO2005123873
		WO2007004380
		WO2006082742
오스뮴(II) 착물		US7279704
		Organometallics 23, 3745 (2004)
금 착물		Appl. Phys. Lett. 74, 1361 (1999)
백금(II) 착물		WO2006098120, WO2006103874
여기자/정공 차단층 물질		
바토큐프린 화합물 (예를 들어, BCP, BPhen)		Appl. Phys. Lett. 75, 4 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)

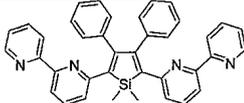
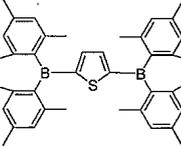
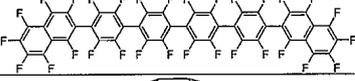
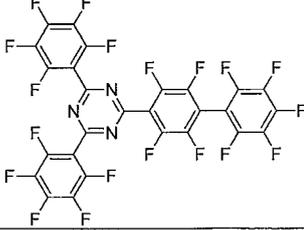
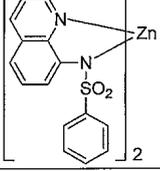
[0193]

<p>금속 8-히드록시퀴놀레이드 (예를 들어, BAlq)</p>		<p>Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)</p>
<p>5원 고리 전자 결핍 이중환, 예컨대 트리아졸, 옥사디아졸, 이미다졸, 벤조이미다졸</p>		<p>Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)</p>
<p>트리페닐렌 화합물</p>		<p>US20050025993</p>
<p>불화 방향족 화합물</p>		<p>Appl. Phys. Lett. 79, 156 (2001)</p>
<p>페노티아진-S-옥사이드</p>		<p>WO2008132085</p>
<p>전자 이송 물질</p>		
<p>안트라센-벤조이미다졸 화합물</p>		<p>WO2003060956</p>

[0194]

		US20090179554
아자 트리페닐렌 유도체		US20090115316
안트라센-벤조티아졸 화합물		Appl. Phys. Lett. 89, 063504 (2006)
금속 8-히드록시퀴놀레이 트 (예를 들어, Alq3, Zrq4)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987) US7230107
금속 히드록시벤조퀴놀레이트		Chem. Lett. 5, 905 (1993)
바토큐프린 화합물, 예컨대 BCP, BPhen 등		Appl. Phys. Lett. 91, 263503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
5원 고리 전자 결핍 이종환 (예를 들어, 트리아졸, 옥사디아졸, 이미다졸, 벤조이미다졸)		Appl. Phys. Lett. 74, 865 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 55, 1489 (1989)
		Jpn. J. Apply. Phys. 32, L917 (1993)

[0195]

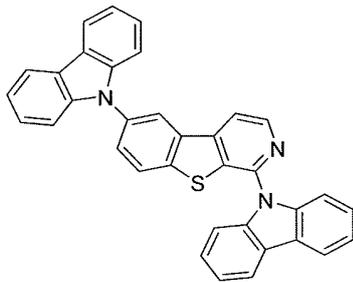
실리콘 화합물		Org. Electron. 4, 113 (2003)
아릴보란 화합물		J. Am. Chem. Soc. 120, 9714 (1998)
불화 방향족 화합물		J. Am. Chem. Soc. 122, 1832 (2000)
풀러렌 (예를 들어, C60)		US20090101870
트리아진 화합물		US20040036077
Zn (N^N) 착물		US6528187

[0196]
[0197]
[0198]
[0199]

실시예

화합물예

실시예 1. 화합물 1의 합성



화합물 1

[0200]
[0201]
[0202]
[0203]

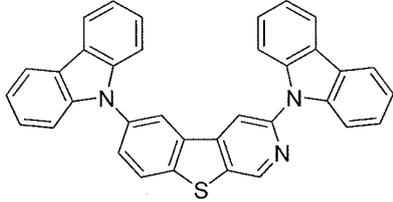
단계 1. 500 mL 둥근 플라스크에 2-클로로-3-요오도-4-아미노피리딘(10 g, 39 mmol), 4-브로모티오펜올(7.0 g, 34 mmol), CuI(0.4 g, 2.0 mmol), 에틸렌 글리콜(4.9 g, 78 mmol), 탄산칼륨(10.8 g, 74 mmol) 및 200 mL의 이소프로판올을 첨가하였다. 상기 반응을 환류로 가열하고, 질소 분위기 하에서 24 시간 동안 교반하였다. 냉각 후, 상기 혼합물을 실리카 겔 칼럼으로 정제하였다. 2-클로로-3-(4-브로모페닐티오)-4-아미노피리딘의 산출량은 7.4 g였다.

단계 2. 500 mL 둥근 플라스크에 2-클로로-3-(4-브로모페닐티오)-4-아미노피리딘(7.0 g, 22 mmol), 및 400 mL의 AcOH를 첨가하였다. 이러한 맑은 용액에, Bu^tONO(2.3 g, 22mmol)를 적가하였다. 실온에서 1 시간 동안 교반한 후, 또다른 10 mmol의 Bu^tONO를 첨가하였다. 상기 혼합물을 추가 2 시간 동안 계속 교반하였다. 상기 반응을 물로 쉐킷하고, 상기 생성물을 실리카 겔 칼럼으로 정제하였다. 1-클로로-6-브로모-[1]벤조티에노[2,3-c]피리딘의 산출량은 6.5 g였다.

단계 3. 500 mL 둥근 플라스크에 1-클로로-6-브로모-[1]벤조티에노[2,3-c]피리딘(3.6 g, 12 mmol), 카르바졸

(6.0 g, 36 mmol), Pd₂(dba)₃(1.1 g, 1.2 mmol), 2-디시클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시비페닐(S-Phos, 2.0 g, 4.8 mmol), 나트륨 t-부톡시드(6.9 g, 72 mmol) 및 250 mL의 크실렌을 첨가하였다. 상기 반응을 환류로 가열하고, 질소 분위기 하에서 24 시간 동안 교반하였다. 냉각 후, 상기 혼합물을 실리카 겔 칼럼으로 정제하였다. 산출량은 4.0 g이었다. 상기 생성물을 감압 승화로 추가 정제하였다. ¹H NMR 결과로 소정의 화합물을 확인하였다.

[0204] **실시예 2. 화합물 2의 합성**



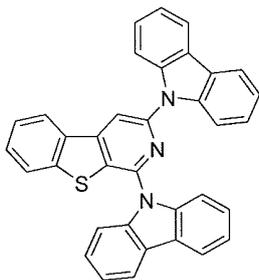
화합물 2

[0205] 단계 1. 500 mL 둥근 플라스크에 2-클로로-4-아미노-5-요오도-피리딘(11.5 g, 45 mmol), 4-브로모티오페놀(8.1 g, 42.8 mmol), CuI(0.4 g, 2.3 mmol), 에틸렌 글리콜(5.6 g, 90.4 mmol), 탄산칼륨(12.4 g, 90.4 mmol) 및 200 mL의 이소프로판올을 첨가하였다. 상기 반응을 환류로 가열하고, 질소 분위기 하에서 24 시간 동안 교반하였다. 냉각 후, 상기 혼합물을 실리카 겔 칼럼으로 정제하였다. 2-클로로-5-(4-브로모페닐티오)-4-아미노피리딘의 산출량은 9.2 g였다.

[0207] 단계 2. 500 mL 둥근 플라스크에 2-클로로-5-(4-브로모페닐티오)-4-아미노피리딘(11 g, 35 mmol) 및 600 mL의 AcOH를 첨가하였다. 이러한 맑은 용액에, Bu^tONO(3.6 g, 35 mmol)를 적가하였다. 실온에서 1 시간 동안 교반한 후, 또다른 15 mmol의 Bu^tONO를 첨가하였다. 상기 혼합물을 추가 2 시간 동안 계속 교반하였다. 상기 반응을 물로 켄칭하고, 상기 생성물을 실리카 겔 칼럼으로 정제하였다. 3-클로로-6-브로모-[1]벤조티에노[2,3-c]피리딘의 산출량은 10 g였다.

[0208] 단계 3. 500 mL 둥근 플라스크에 3-클로로-6-브로모-[1]벤조티에노[2,3-c]피리딘(3.0 g, 10 mmol), 카르바졸(4.2 g, 25 mmol), Pd(OAc)₂(0.1 g, 0.5 mmol), P(Bu^t)₃(톨루엔 중 1 M, 1.5 mL, 1.5 mmol), 나트륨 t-부톡시드(6.3 g, 66 mmol) 및 250 mL의 크실렌을 첨가하였다. 상기 반응을 환류로 가열하고, 질소 분위기 하에서 24 시간 동안 교반하였다. 냉각 후, 상기 혼합물을 실리카 겔 칼럼으로 정제하였다. 산출량은 4.2 g였다. 상기 생성물을 감압 승화로 추가 정제하였다. ¹H NMR 결과로 소정의 화합물을 확인하였다.

[0209] **실시예 3. 화합물 3의 합성**



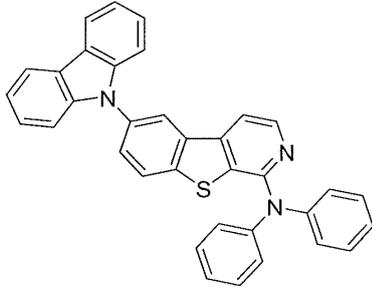
[0210] 단계 1. 500 mL 둥근 플라스크에 2,6-디클로로-3-요오도-4-아미노피리딘(7.0 g, 28.8 mmol), 티오페놀(3.2 g, 34.8 mmol), CuI(0.2 g, 1.2 mmol), 에틸렌 글리콜(3.0 g, 57.6 mmol), 탄산칼륨(6.6 g, 57.6 mmol) 및 200 mL의 이소프로판올을 첨가하였다. 상기 반응을 환류로 가열하고, 질소 분위기 하에서 24 시간 동안 교반하였다. 냉각 후, 상기 혼합물을 실리카 겔 칼럼으로 정제하였다. 2,6-디클로로-3-페닐티오-4-아미노피리딘의 산출량은 4.0 g였다.

[0212] 단계 2. 500 mL 둥근 플라스크에 2,6-디클로로-3-페닐티오-4-아미노피리딘(4.0 g, 14.7 mmol) 및 200 mL의 AcOH를 첨가하였다. 이러한 맑은 용액에, Bu^tONO(1.5 g, 15mmol)를 적가하였다. 실온에서 1 시가 동안 교반한 후, 또다른 8 mmol의 Bu^tONO를 첨가하였다. 상기 혼합물을 추가 2 시간 동안 계속 교반하였다. 상기 반응을 물로 켄칭하고, 상기 생성물을 실리카 겔 칼럼으로 정제하였다. 1,3-디클로로-[1]벤조티에노[2,3-c]피리딘의 산출

량은 3.2 g였다.

[0213] 단계 3. 500 mL 둥근 플라스크에 1,3-디클로로-[1]벤조티에노[2,3-c]피리딘(2.5 g, 10 mmol), 카르바졸(4.2 g, 25 mmol), Pd₂(dba)₃(0.9 g, 1.0 mmol), 2-디시클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시비페닐(S-Phos, 1.6 g, 4.0 mmol), 나트륨 t-부톡사이드(4.8 g, 50 mmol) 및 200 mL의 크실렌을 첨가하였다. 상기 반응을 환류로 가열하고, 질소 분위기 하에서 24 시간 동안 교반하였다. 냉각 후, 상기 혼합물을 실리카 겔 칼럼으로 정제하였다. 산출량은 4.2 g였다. 상기 생성물을 감압 승화로 추가 정제하였다. ¹H NMR 결과로 소정의 화합물을 확인하였다.

[0214] 실시예 4. 화합물 4의 합성

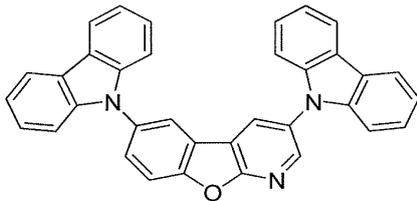


화합물 4

[0215] 단계 1. 500 mL 둥근 플라스크에 1-클로로-6-브로모-[1]벤조티에노[2,3-c]피리딘(5.0 g, 16.7 mmol), 카르바졸(2.8 g, 16.7 mmol), Pd(OAc)₂(0.1 g, 0.4 mmol), PBU₃(톨루엔 중 1.0 M 용액, 1.2 mL, 1.2 mmol), 나트륨 t-부톡사이드(4.8 g, 50.1 mmol) 및 400 mL의 크실렌을 첨가하였다. 상기 반응을 환류로 가열하고, 질소 분위기 하에서 24 시간 동안 교반하였다. 냉각 후, 상기 혼합물을 실리카 겔 칼럼으로 정제하였다. 1-클로로-6-(9-카르바졸)-[1]벤조티에노[2,3-c]피리딘의 산출량은 1.9 g였다.

[0217] 단계 2. 500 mL 둥근 플라스크에 1-클로로-6-(9-카르바졸)-[1]벤조티에노[2,3-c]피리딘(1.3 g, 3.4 mmol), 디페닐아민(0.7 g, 4.0 mmol), Pd₂(dba)₃(0.09 g, 0.1 mmol), 2-디시클로헥실포스피노-2',4',6'-트리이소프로필비페닐(0.2 g, 0.4 mmol), 나트륨 t-부톡사이드(0.8 g, 8.0 mmol) 및 100 mL의 톨루엔을 첨가하였다. 상기 반응을 환류로 가열하고, 질소 분위기 하에서 24 시간 동안 교반하였다. 냉각 후, 상기 혼합물을 실리카 겔 칼럼으로 정제하였다. 화합물 4의 산출량은 1.1 g였다.

[0218] 실시예 5. 화합물 21의 합성



화합물 21

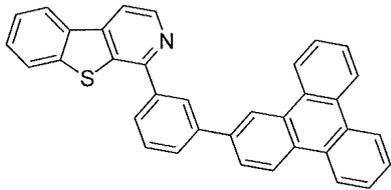
[0220] 단계 1. 100 mL의 아세트산 중 2-아미노-5-클로로피리딘(10.0 g, 77.8 mmol), 아세트산칼륨(7.63 g, 77.8 mmol)의 용액을 85°C로 가열하고, 50 mL의 아세트산 중 ClI(12.6 g, 77.8 mmol)를 적가하였다. 반응 혼합물을 상기 온도에서 2 시간 동안 유지한 후, 물 1 L로 희석하고, NaOH 1 N에 의해 pH 7로 중화시키며, 아세트산에틸(4 x 75 mL)로 추출하였다. 유기 분리를 배합하고, NaHCO₃로 세척하며, 셀라이트를 통해 여과시키고, 증발시켰다. 잔류물을 실리카 상의 칼럼 크로마토그래피(용리액 - 헥산/아세트산에틸 1/1)로 처리하여, 황색 고체로서 5-클로로-3-요오도피리딘-2-아민(11.9 g, 60%)을 산출하였다.

[0221] 단계 2. 5-클로로-2-메톡시페닐보론산(5.0 g, 26.8 mmol), 5-클로로-3-요오도피리딘-2-아민(6.83 g, 26.8 mmol), 탄산나트륨(8.53 g, 50 mL의 물 중 80.5 mmol), Pd(PPh₃)₄ (621 mg, 2 mol%) 및 100 mL의 톨루엔의 혼합물을 N₂ 하에서 밤새 환류시켰다. 상기 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 유기층을 분리하며, 진공 농축시켰다. 상기 잔류물을 용리액으로서 헥산/아세트산에틸 구배를 갖는 실리카 겔 상의 칼럼 크로마토그래피로 처리하여 5-클로로-3-(5-클로로-2-메톡시페닐)피리딘-2-아민 3.3 g(46% 수율)을 제공하였다.

[0222] 단계 3. 50 mL의 빙초산 및 20 mL의 THF 중 5-클로로-3-(5-클로로-2-메톡시페닐)피리딘-2-아민(5.2 g, 19.3

[0230] 단계 1. 1-클로로-6-(9-카르바졸)-[1]벤조티에노[2,3-c]피리딘(1.0 g, 1.6 mmol), 트리페닐렌-2-일보론산(0.85 g, 3.1 mmol), 제3인산칼륨(1.7 g, 7.8 mmol), 100 mL의 톨루엔 및 5 mL의 물의 혼합물을 제조하고, 질소에 의해 20 분 동안 버블링하였다. 이어서, 상기 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(24 mg, 0.030 mmol) 및 2-디시클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시비페닐(43 mg, 0.10 mmol)을 첨가하였다. 상기 혼합물을 질소에 의해 추가 20 분 동안 버블링하였다. 질소 하에서 밤새 환류시킨 후에, 상기 반응을 실온으로 냉각시키고, 농축시켰다. 얻어진 고체를 800 mL의 환류 톨루엔에 재용해시키고, 얇은 셀라이트 플러그를 통해 여과시켰다. 수집된 여과물을 약 100 mL로 여과시킨 후, 질소 하에서 1 시간 동안 환류시켰다. 실온으로 천천히 냉각시킨 후, 침전물을 여과에 의해 수집하였다. 잔류물을 메탄올 중 20% 디클로로메탄의 100 mL 고온 혼합물에 교반시키고, 이를 실온으로 냉각시킨 후, 밤새 교반하였다. 잔류물을 여과에 의해 수집하고, 진공 하에 건조시켜 백색 고체 1.2 g(2.1 mmol, 81% 수율)을 산출하였다.

[0231] 실시예 8. 화합물 66의 합성



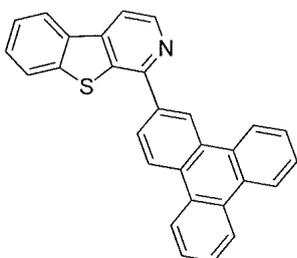
화합물 66

[0232] 단계 1. 250 mL 둥근 플라스크에 2-클로로-3-요오도-4-아미노피리딘(5.0 g, 19.6 mmol), 티오펜올(2.16 g, 19.6 mmol), CuI(0.187 g, 0.98 mmol), 에틸렌 글리콜(2.5 g, 39 mmol), 탄산칼륨(5.4 g, 39 mmol) 및 150 mL의 이소프로판올을 첨가하였다. 반응을 환류로 가열시키고, 질소 분위기 하에서 24 시간 동안 교반하였다. 냉각시킨 후, 상기 혼합물을 실리카 겔 칼럼으로 정제하였다. 2-클로로-3-페닐티오-4-아미노피리딘의 산출량은 4.2 g(91%)였다.

[0234] 단계 2. 250 mL 둥근 플라스크에 2-클로로-3-페닐티오-4-아미노피리딘(2.7 g, 11.4 mmol) 및 60 mL의 빙초산을 첨가하였다. 이러한 맑은 용액에, Bu^tONO(1.36 g, 11.45 mmol)를 적가하였다. 실온에서 1 시간 동안 교반한 후, Bu^tONO의 추가 (1.36g 11.45) mmol을 첨가하였다. 상기 혼합물을 실온에서 18 시간 동안 계속 교반하였다. 상기 반응을 물로 퀀칭시키고, 상기 생성물을 실리카 겔 칼럼으로 정제하였다. 1-클로로-벤조티에노[2,3-c]피리딘의 산출량은 2.2 g(88%)였다.

[0235] 단계 3. 1-클로로-벤조티에노[2,3-c]피리딘(1.5 g, 6.8 mmol), 미국 가출원 60/963,944호에 따라 합성된 3-(트리페닐렌-2-일)페닐보론산(2.5 g, 7.2 mmol), 제3인산칼륨(4.4 g, 20.4 mmol), 100 mL의 톨루엔 및 10 mL의 물의 혼합물을 제조하고, 질소에 의해 15 분 동안 버블링하였다. 이어서, 상기 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(63 mg, 0.068 mmol) 및 2-디시클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시비페닐(116 mg, 0.28 mmol)을 첨가하였다. 상기 혼합물을 질소에 의해 추가 20 분 동안 버블링하였다. 질소 하에서 밤새 환류시킨 후, 반응 혼합물을 실온으로 냉각시켰다. 상기 생성물을 실리카 겔 크로마토그래피 칼럼으로 정제하였다. ~2.7 g(81%)의 화합물 66을 수득하였다.

[0236] 실시예 9. 화합물 70의 합성

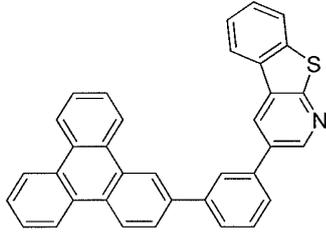


화합물 70

[0238] 단계 1. 1-클로로-벤조티에노[2,3-c]피리딘(1.0 g, 4.5 mmol), 미국 가출원 60/963,944호에 따라 합성된 2-트리페닐렌-보론산(1.25 g, 4.5 mmol), 제3인산칼륨(3.0 g, 18.0 mmol), 100 mL의 톨루엔 및 10 mL의 물의 혼합물을 제조하고, 질소에 의해 15 분 동안 버블링하였다. 이어서, 상기 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(42 mg, 0.045 mmol) 및 2-디시클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시비페닐(77 mg, 0.18 mmol)을 첨가하였다. 상기 혼합물을

질소에 의해 추가 20 분 동안 버블링하였다. 질소 하에서 밤새 환류시킨 후, 반응 혼합물을 실온으로 냉각시켰다. 상기 생성물을 실리카 겔 크로마토그래피 칼럼으로 정제하였다. ~1.5 g(84%)의 화합물 70을 수득하였다.

[0239] 실시예 10. 화합물 71의 합성



화합물 71

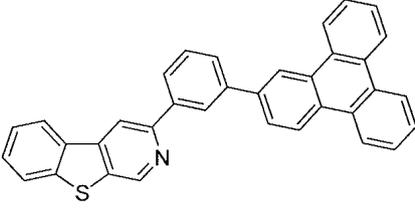
[0240] 단계 1. 100 mL의 아세트산 중 2-아미노-5-클로로피리딘(10.0 g, 77.8 mmol) 아세트산칼륨(7.63 g, 77.8 mmol)의 용액을 85°C로 가열하고, 50 mL의 아세트산 중 ClI(12.6 g, 77.8 mmol)를 적가하였다. 반응 혼합물을 상기 온도에서 2 시간 동안 유지하고, 1 L의 물로 희석시키며, NaOH 1 N 용액에 의해 pH 7로 중화시키고, 아세트산에틸(4 x 75 mL)로 추출하였다. 유기 분류를 배합하고, NaHCO₃로 세척하며, 셀라이트를 통해 여과시키고, 증발시켰다. 잔류물을 실리카 겔 상의 칼럼 크로마토그래피(용리액 - 헥산/아세트산에틸 1/1)로 처리하여 황색 고체 5-클로로-3-요오도피리딘-2-아민(11.9 g, 60%)을 산출하였다.

[0242] 단계 2. 2-(메틸티오)페닐보론산(5.0 g, 29.8 mmol), 5-클로로-3-요오도피리딘-2-아민(7.56 g, 29.8 mmol), 탄산나트륨(9.0 g, 50 mL의 물), Pd(PPh₃)₄(621 mg) 및 100 mL의 톨루엔의 혼합물을 N₂ 하에서 밤새 환류시켰다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 유기층을 분리시키며, 진공 농축시켰다. 상기 잔류물을 용리액으로서 헥산/아세트산에틸 구배 혼합물을 갖는, 실리카 겔 상의 칼럼 크로마토그래피로 처리하여, 5-클로로-3-(2-(메틸티오)페닐)피리딘-2-아민 3.5 g을 산출하였다.

[0243] 단계 3. 50 mL의 빙초산 및 20 mL의 THF 중 5-클로로-3-(2-(메틸티오)페닐)피리딘-2-아민(5.2 g, 19.3 mmol)의 용액을 -10°C로 냉각시키고, tert-부틸 니트라이트(4.6 mL)를 적가하였다. 상기 반응 혼합물을 0°C에서 밤새 교반하고, 실온으로 가온시키며, 100 mL의 물로 희석시켰다. 고체 물질을 여과시키고, 건조시켜 순수한 3-클로로벤조티에노[2,3-b]피리딘 2.5 g을 산출하였다.

[0244] 단계 4. 3-클로로-[1]벤조티에노[2,3-b]피리딘(1.3 g, 5.9 mmol), 4,4,5,5-테트라메틸-2-(3-(트리페닐렌-2-일)페닐)-1,3,2-디옥사보롤란(3.1 g, 7.1 mmol), 제3인산칼륨(3.8 g, 18 mmol), 100 mL의 톨루엔 및 10 mL 물의 혼합물을 제조하고, 질소로 15 분 동안 버블링하였다. 이어서, 상기 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(54 mg, 0.060 mmol) 및 2-디시클로헥실포스포노-2',6'-디메톡시비페닐(97 mg, 0.24 mmol)을 첨가하였다. 상기 혼합물을 질소에 의해 추가 20 분 동안 버블링하였다. 질소 하에서 밤새 환류시킨 후, 상기 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 여과시켜 침전물을 수집하였다. 상기 잔류물을 메탄올로 세척한 후, 고온 톨루엔에 재용해시켰다. 상기 용액을 황산마그네슘 플러그를 통해 여과시키고, 이를 디클로로메탄으로 세척하였다. 배합된 여과물을 농축시켜 백색 고체 700 mg(1.4 mmol, 24% 수율)을 산출하였다.

[0245] 실시예 11. 화합물 79의 합성



화합물 79

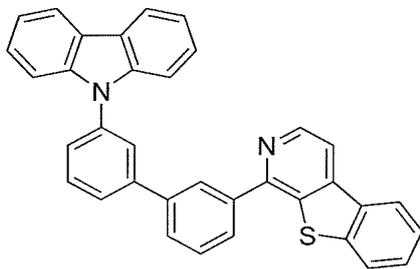
[0247] 단계 1. 250 mL 둥근 플라스크에 2-클로로-5-요오도-4-아미노피리딘(5.0 g, 19.6 mmol), 티오펜(2.16 g, 19.6 mmol), CuI(0.187 g, 0.98 mmol), 에틸렌 글리콜(2.5 g, 39 mmol), 탄산칼륨(5.4 g, 39 mmol) 및 150 mL의 이소프로판올을 첨가하였다. 상기 반응을 환류로 가열하고, 질소 분위기 하에서 24 시간 동안 교반하였다. 냉각 후, 상기 혼합물을 실리카 겔 칼럼으로 정제하였다. 2-클로로-3-페닐티오-4-아미노피리딘의 산출량은 4.5 g였다.

[0248] 단계 2. 250 mL 둥근 플라스크에 2-클로로-3-페닐티오-4-아미노피리딘(3.7 g, 16.8 mmol) 및 60 mL의 빙초산을

첨가하였다. 이러한 맑은 용액에, Bu^tONO(1.8 g, 16.8 mmol)를 적가하였다. 실온에서 1 시간 동안 교반한 후, 추가 (1.8 g 16.8) mmol의 Bu^tONO을 첨가하였다. 상기 혼합물을 실온에서 18 시간 동안 계속 교반하였다. 상기 반응을 물로 킨칭시키고, 상기 생성물을 실리카 겔 칼럼으로 정제하였다. 3-클로로-벤조티에노[2,3-c]피리딘의 산출량은 1.2 g(33%)였다.

[0249] 단계 3. 3-클로로-벤조티에노[2,3-c]피리딘(1.0 g, 4.5 mmol), 미국 가출원 60/963,944호에 따라 합성된 3-(트리페닐렌-2-일)페닐보론산(2.1 g, 4.8 mmol), 제3인산칼륨(2.9 g, 13.5 mmol), 100 mL의 톨루엔 및 10 mL의 물의 혼합물을 제조하고, 질소에 의해 15 분 동안 버블링하였다. 이어서, 상기 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(63 mg, 0.068 mmol) 및 2-디시클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시비페닐(116 mg, 0.28 mmol)을 첨가하였다. 상기 혼합물을 질소에 의해 추가 20 분 동안 버블링하였다. 질소 하에서 밤새 환류시킨 후, 상기 반응 혼합물을 실온으로 냉각시켰다. 상기 생성물을 실리카 겔 크로마토그래피 칼럼으로 정제하였다. ~1.2 g(55%)의 화합물 79를 수득하였다.

[0250] 실시예 12. 화합물 80의 합성



화합물 80

[0251] 단계 1. 카르바졸(7.3 g, 43.7 mmol), 3-브로모요오도벤젠(25 g, 87.3 mmol) 및 나트륨 t-부톡사이드(8.4 g, 87.3 mmol)을 질소 분위기 하에서 건조 크실렌 150 ml에 현탁시켰다. 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(200 mg) 및 1,1'-비스(디페닐포스피노) 페로센(400 mg)을 한 분액으로 첨가하고, 상기 반응을 환류로 가열시키며, 질소 분위기 하에서 24 시간 동안 교반하였다. 냉각 후, 상기 크실렌을 증발시키고, 상기 잔류물을 실리카 겔 상의 칼럼 크로마토그래피로 처리하여 3-브로모페닐 카르바졸(9.5 g, 황색 고형화된 오일)을 산출하였다.

[0253] 단계 2. 3-브로모페닐 카르바졸(9.5 g, 29.5 mmol), 비스(피나콜라토)디보론 (11.2 g, 44.2 mmol), 아세트산칼륨(8.7 g), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(200 mg) 및 1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센(400 mg)을 200 mL의 디옥산에 현탁시키고, 질소 분위기 하에서 밤새 환류로 가열하였다. 냉각 및 증발 후에, 상기 잔류물을 실리카 겔 상의 칼럼 크로마토그래피로 처리하여 9-(3-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)-9H-카르바졸 b(6.0 g, 무색 결정)를 산출하였다.

[0254] 단계 3. 1,3-디브로모벤젠(16 g, 64.9 mmol), 9-(3-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)-9H-카르바졸 b(6.0 g, 11.6 mmol), 아세트산칼륨(물 중 6.6 g의 포화 용액) 및 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)(380 mg)을 질소 분위기 하에서 150 mL의 톨루엔에서 밤새 환류로 가열하였다. 냉각, 증발 및 칼럼 크로마토그래피 후에, 9-(3'-브로모-[1,1'-비페닐]-3-일)-9H-카르바졸(5.8 g)을 수득하였다.

[0255] 단계 4. 단계 2와 동일한 조건에서, 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐 및 1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센으로 촉매된, 디옥산 중 비스(피나콜라토)디보론 및 9-(3'-브로모-[1,1'-비페닐]-3-일)-9H-카르바졸을, 염기로서 아세트산칼륨과 반응시켜 9-(3'-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-[1,1'-비페닐]-3-일)-9H-카르바졸을 산출하고, 이를 실리카 겔 상의 칼럼 크로마토그래피로 정제하였다.

[0256] 단계 5. 1-클로로벤조[4,5]티에노[2,3-c]피리딘(화합물 66로서 기술됨, 단계 2) 및 9-(3'-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-[1,1'-비페닐]-3-일)-9H-카르바졸을 톨루엔 (150 mL)에 용해시켰다. 촉매 (트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐, 400 mg 및 2-디시클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시비페닐, 200 mg) 및 염기(제3인산칼륨)를 한 분액으로 첨가하고, 반응을 질소 분위기 하에서 환류로 밤새 가열하였다. 상기 생성물을 실리카 겔 칼럼으로 정제하여 화합물 80을 산출하였다.

[0257] 디바이스에

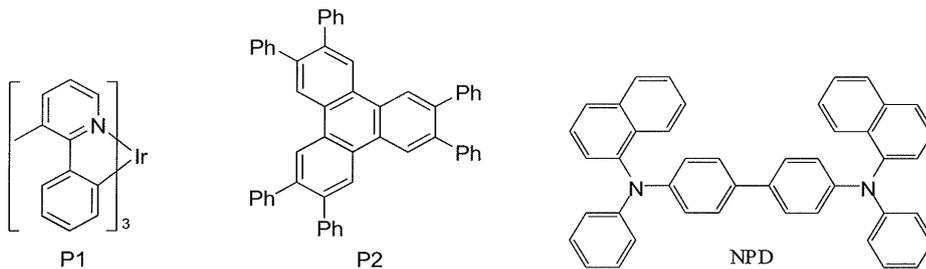
[0258] 모든 실시예 디바이스를 고진공(<10⁻⁷ Torr) 열증발에 의해 제조하였다. 상기 애노드 전극은 인듐 주석 산화물(ITO) 800 Å이다. 상기 캐소드는 LiF 10 Å 및 Al 1000 Å로 구성된다. 모든 디바이스는 제조 직후에 질소 글

러브 박스(H₂O 및 O₂ <1 ppm)에서 유리 두경으로 에폭시 수지에 의해 밀봉하여 캡슐화시키고, 수분 게터(moisture getter)를 상기 패키지 내에 투입하였다.

[0259] P1이 발광성 도판트이고, 본 발명의 화합물, 화합물 1, 화합물 2 또는 화합물 3이 호스트인 특정 디바이스가 제공된다. 디바이스에 1~3의 유기 스택은 ITO 표면으로부터 순차적으로, 정공 주입층(HIL)으로서 P1 100 Å, 정공 이송층(HTL)으로서 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(α -NPD) 30 Å, 발광층(EML)으로서 P1, Ir 인광성 화합물 15%로 도핑된 본 발명의 화합물 300 Å, ETL2로서 본 발명의 화합물 100 Å 및 ETL1으로서 Alq₃ (트리스-8-히드록시퀴놀린 알루미늄) 400 Å으로 구성된다.

[0260] 비교예 1을, EML이 P1 10%로 도핑된 호스트로서 CBP를 포함하고, P2를 차단층 물질로서 사용한다는 것을 제외하고 상기 디바이스 예와 유사하게 제조하였다.

[0261] 본 원에서 사용되는 바와 같이, 하기 화합물이 하기 구조를 가진다:



[0262] 특히 우수한 특성을 갖는 디바이스를 유도할 수 있는, OLED에 사용하기 위한 특정 물질이 제공된다. 상기 물질은 발광층의 호스트로서 또는 강화층 중의 물질로서 사용될 수 있다. 디바이스에 1~3의 상기 발광층 물질 및 차단층 물질을 표 2에 나타내었다. 상기 디바이스를 시험하고, 측정된 결과를 표 3에 제공하였다. Compd는 화합물의 약자이다. 화합물 1~3을 이용한 발광층 및 차단층을 갖는 디바이스는 높은 디바이스 효율, 긴 수명 및 감소된 작동 전압을 나타내었다.

[0264] 표 2

디바이스 샘플	화합물	도판트%	BL
1	1	P1 15%	1
2	2	P1 15%	2
3	3	P1 15%	3
비교예 1	CBP	P1 10%	P2

[0265] 표 3

디바이스 샘플	CIE		L = 1000 cd/m ²							RT 40mA/cm ²		
	X	Y	λ_{max} (nm)	FWHM (nm)	V (V)	LE (cd/A)	EQE (%)	PE lm/W	EQE _{int} LE	Lo (cd/m ²)	LT _{80%} (hr)	Gnits ² (hr)
1	0.366	0.602	530	79	5	60.9	16.9	38.4	3.6	17,697	113	35.37
2	0.362	0.605	530	76	5.2	64.3	17.6	38.7	3.7	18,976	85	30.61
3	0.359	0.604	528	76	6	47.6	13.1	24.9	3.6	15582	106	25.81
비교예 1	0.345	0.615	524	75	5.8	61	16.7	33	3.7	16148	83	21.64

[0267] 디바이스에 1~3으로부터, 녹색 인광성 OLED에서의 호스트로서 본 발명의 화합물은 높은 효율(즉, 1000 cd/m²에서 LE > 60 cd/A)을 제공한다는 것을 확인할 수 있으며, 이는 발색단으로서 아자-디벤조티오펜이 효율적인 녹색 전계인광성에 충분히 높은 트리플렛을 보유한다는 것을 나타낸다. 또한, 호스트로서 화합물 1 및 2를 포함하는 디바이스의 높은 안정성이 주지할 만하다. 수명 T_{80%}(실온에서의 40 mA/cm²의 일정한 전류 밀도에서 초기 휘도 L₀가 이의 수치의 80%로 감소하는 데 필요한 시간으로 정의됨)는 화합물 1 및 2에 대해서 각각 113 시간 및 85 시간이며, L₀은 비교예 1보다 높다. 이는 디바이스 안정성이 1.5 배 향상되었음을 의미한다. 따라서, 본 발명의

화합물은 강화층으로서 잘 작용할 수 있다.

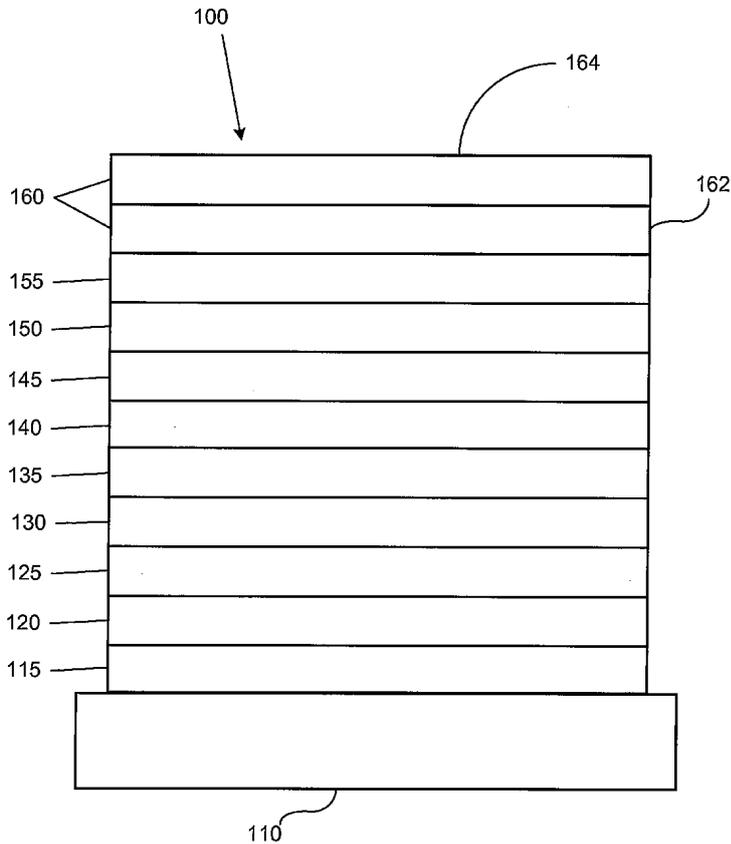
[0269] 또다른 주목할 만한 특징은, 화합물 1 및 2 둘 모두가, 1000 cd/m²에서 5.8 V를 갖는 CBP에 비해 낮은 디바이스 전압, 1000 cd/m²에서 5 V 및 1000 cd/m²에서 5.2 V이라는 점이다.

[0270] 상기 데이터는 아자-디벤조티오펜이 인광성 OLED에서 우수한 호스트 및 강화층일 수 있어, 높은 효율, 낮은 전압 및 통상적으로 사용되는 호스트 CBP보다 몇 배 우수한 디바이스 안정성 향상을 제공할 수 있다는 것을 제시한다.

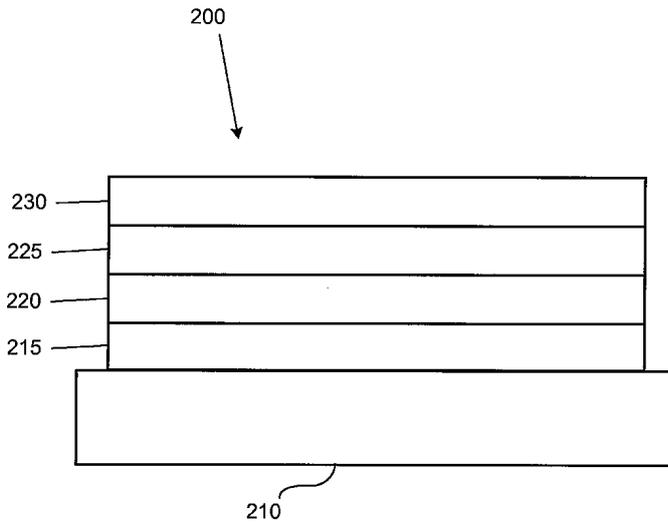
[0271] 본 원에서 기술된 다양한 실시양태는 단지 예로서 존재하며, 본 발명의 범위를 한정하려는 의도는 아니라는 것이 이해된다. 예를 들어, 본 원에서 기술된 많은 물질 및 구조는 본 발명의 사상을 벗어남 없이 다른 물질 및 구조로 대체할 수 있다. 따라서, 청구되는 본 발명은, 당업자에게 명백하게 되는 바와 같이, 본 원에서 기술된 특정 실시예 및 바람직한 실시예로부터의 변경예를 포함할 수 있다. 본 발명의 작용 원리에 대한 다양한 이론은 한정되지 않는다는 것이 이해되게 된다.

도면

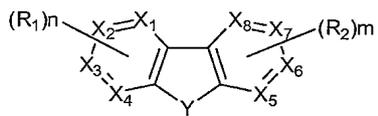
도면1



도면2



도면3



도면4

