



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2011년11월24일
 (11) 등록번호 10-1086655
 (24) 등록일자 2011년11월18일

(51) Int. Cl.
C07F 1/12 (2006.01) *C07F 5/00* (2006.01)
C07F 15/00 (2006.01)
 (21) 출원번호 10-2005-7016840
 (22) 출원일자(국제출원일자) 2004년03월09일
 심사청구일자 2009년03월06일
 (85) 번역문제출일자 2005년09월09일
 (65) 공개번호 10-2006-0002810
 (43) 공개일자 2006년01월09일
 (86) 국제출원번호 PCT/EP2004/002393
 (87) 국제공개번호 WO 2004/081017
 국제공개일자 2004년09월23일
 (30) 우선권주장
 103 10 887.4 2003년03월11일 독일(DE)
 (56) 선행기술조사문헌
 W0200070655 A1
 W0200022026 A1
 EP1028136 A
 US20040133004 A1
 전체 청구항 수 : 총 29 항

(73) 특허권자
메르크 파텐트 게엠베하
 독일 64293 다름스타트 프랑크푸르터 스트라세 250
 (72) 발명자
슈퇴벨 필리프
 독일 65929 프랑크푸르트 호르텐진-링 17
슈프라이처 후베르트
 독일 68519 비른하임 브루노-타우트-슈트라세 20
 (74) 대리인
특허법인코리아나

심사관 : 김수미

(54) 금속 착물

(57) 요약

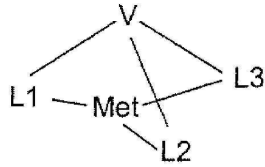
본 발명은 신규 금속 착물에 관한 것이다. 상기 화합물은 최광의의 전자 산업에 결과를 돌릴 수 있는 일련의 다양한 적용들에 활성 성분(=기능성 물질)로서 사용된다. 본 발명에 따른 화합물들은 구조 1 및 식 1 내지 82에 의해 나타낸다.

특허청구의 범위

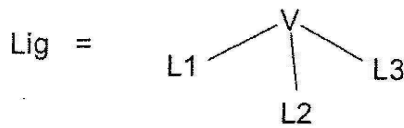
청구항 1

구조 2의 폴리포달 리간드 Lig에 배위된 하나 이상의 금속 Met를 포함하는 구조 1의 화합물로서;

[구조 1]

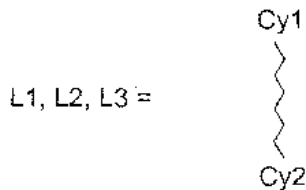


[구조 2]



[식 중, V는 1 내지 80 개의 원자들을 포함하고 각각의 예에서 동일하거나 상이할 수 있는 세 개의 부분 리간드 L1, L2 및 L3가 서로 공유 결합되어 있고, 여기서, 상기 세 개의 부분 리간드 L1, L2 및 L3는 구조 3을 만족시키는 것을 특징으로 하는 브릿지 단위이다:

[구조 3]



(식 중, Cy1 및 Cy2는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 치환 또는 비치환, 포화, 불포화 또는 방향족 호모 또는 헤테로고리 또는 융합계의 부분 호모 또는 부분 헤테로고리에 상응하고, 각각 고리 원자를 통해 또는 호모 또는 헤테로고리에 고리밖 결합된 원자를 통해 상기 금속에 이온성, 공유성 또는 배위성 결합을 함), 상기 구조 1의 화합물이 하전되지 않은, 즉 외부적으로 전기적 중성인 화합물.

청구항 2

제 1 항에 있어서, L1=L2=L3인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 3

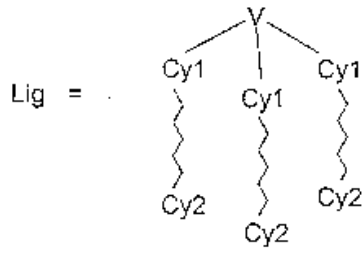
제 1 항에 있어서, L1≠L2인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 4

제 1 항에 있어서, 상기 연결 단위 V가 연결 원자로서 주족 3, 4 또는 5의 원소, 또는 3 내지 6 원자 호모 또는 헤테로고리를 포함하는 것을 특징으로 화합물.

청구항 5

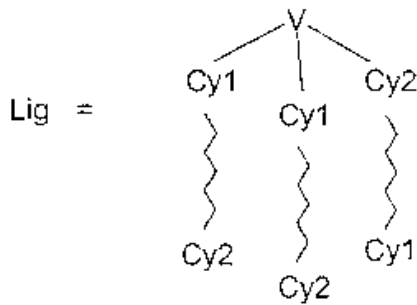
제 1 항에 있어서, 구조 4의 폴리포달 리간드 Lig가 금속 Met에 거울상 배위 모양을 발생시키는 것을 특징으로 하는 화합물.



구조 4

청구항 6

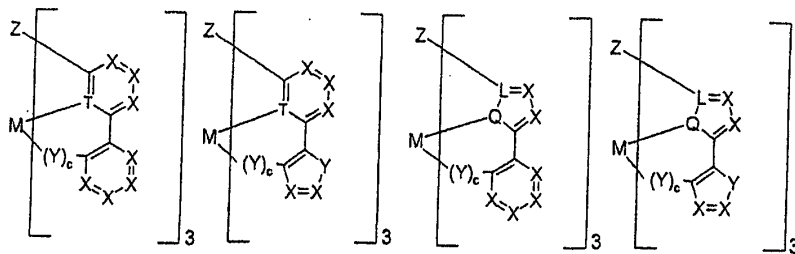
제 1 항에 있어서, 구조 5의 폴리포달 리간드 Lig가 금속 Met에 자오선 배위 모양을 발생시키는 것을 특징으로 하는 화합물.



구조 5

청구항 7

제 1 항에 있어서, 하기 화합물 (1) 내지 (8)로부터 선택되는 금속 착물인 화합물 :

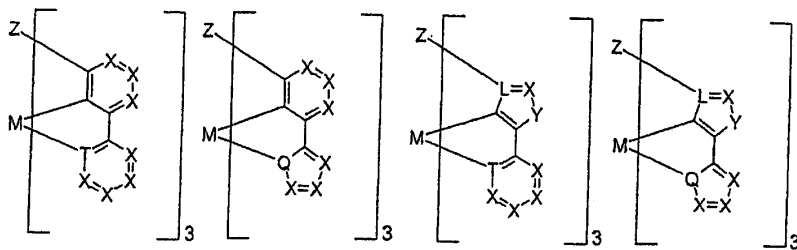


화합물 (1)

화합물 (2)

화합물 (3)

화합물 (4)



화합물 (5)

화합물 (6)

화합물 (7)

화합물 (8)

[식 중 기호 및 표시는 각각 하기와 같이 정의된다:

M은 Al, Ga, In, Tl, P, As, Sb, Bi, Sc, Y, La, V, Nb, Ta, Cr, Mo, W, Fe, Ru, Os, Co, Rh, Ir, Cu, Au, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb 또는 Lu이고;

L은 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 C, N 또는 P이고;

Q는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 O, S, Se, Te 또는 N이고;

T는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 N, P 또는 C이고;

X는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 CR, N 또는 P이고;

Y는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 NR¹, O, S, Se, Te, SO, SeO, TeO, SO₂, SeO₂ 또는 TeO₂이고;

Z는 B, BR, B(CR₂)₃, B(CR₂CR₂)₃, CR, COH, COR¹, CF, CCl, CBr, C-I, CNR¹₂, RC(CR₂)₃, RC(CR₂CR₂)₃, RC(SiR₂)₃, RC(SiR₂CR₂)₃, RC(CR₂SiR₂)₃, RC(SiR₂SiR₂)₃, cis,cis-1,3,5-시클로헥실, 1,3,5-(CR₂)₃C₆H₃, SiR, SiOH, SiOR¹, RSi(CR₂)₃, RSi(CR₂CR₂)₃, RSi(SiR₂)₃, RSi(SiR₂CR₂)₃, RSi(CR₂SiR₂)₃, RSi(SiR₂SiR₂)₃, N, N(CR₂)₃, N(C=O)₃, N(CR₂CR₂)₃, NO, P, As, Sb, Bi, PO, AsO, SbO, BiO, PSe, AsSe, SbSe, BiSe, PTe, AsTe, SbTe 또는 BiTe이고;

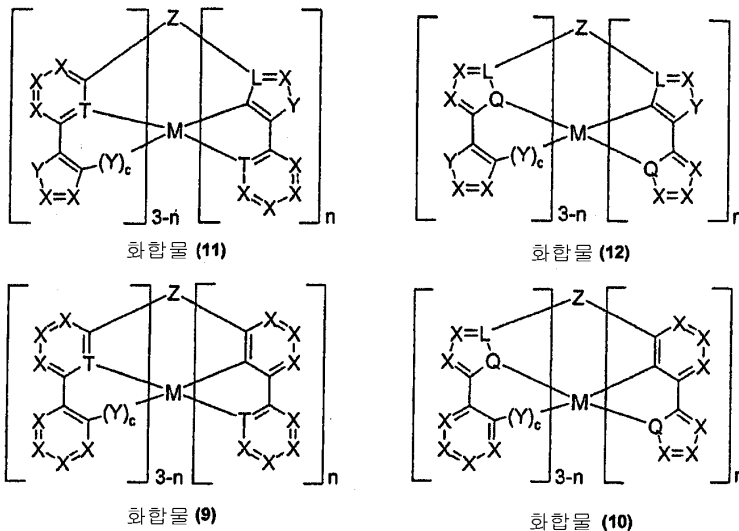
R은 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 H, F, Cl, Br, I, NO₂, CN 또는 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지 또는 고리 알킬 또는 알콕시기이고, 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂ 기가 -R¹C=CR¹-, -C≡C-, Si(R¹)₂, Ge(R¹)₂, Sn(R¹)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR¹, -O-, -S-, -NR¹- 또는 -CONR¹-으로 치환될 수 있고, 하나 이상의 수소 원자가 F, 또는 1 내지 14 개의 탄소 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴기로 치환될 수 있고 하나 이상의 비방향족 R 라디칼에 의해 치환될 수 있으며, 복수의 치환체 R은 동일한 고리 상 및 두 개의 상이한 고리 상 둘 다에서, 함께 추가의 단수 또는 복수 고리, 지방 또는 방향 고리계를 차례로 형성할 수 있고;

R¹은 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 또는 방향족 탄화수소 라디칼 이고;

c는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 0 또는 1이다].

청구항 8

제 1 항에 있어서, 하기 화합물 (9) 내지 (12)로부터 선택되는 금속 착물인 화합물 :



[식 중,

M은 Al, Ga, In, Tl, P, As, Sb, Bi, Sc, Y, La, V, Nb, Ta, Cr, Mo, W, Fe, Ru, Os, Co, Rh, Ir, Cu, Au, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb 또는 Lu이고;

L은 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 C, N 또는 P이고;

Q는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 O, S, Se, Te 또는 N이고;

T는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 N, P 또는 C이고;

X는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 CR, N 또는 P이고;

Y는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 NR¹, O, S, Se, Te, SO, SeO, TeO, SO₂, SeO₂ 또는 TeO₂이고;

Z는 B, BR, B(CR₂)₃, B(CR₂CR₂)₃, CR, COH, COR¹, CF, CCl, CBr, C-I, CNR¹₂, RC(CR₂)₃, RC(CR₂CR₂)₃, RC(SiR₂)₃, RC(SiR₂CR₂)₃, RC(CR₂SiR₂)₃, RC(SiR₂SiR₂)₃, cis,cis-1,3,5-시클로헥실, 1,3,5-(CR₂)₃C₆H₃, SiR, SiOH, SiOR¹, RSi(CR₂)₃, RSi(CR₂CR₂)₃, RSi(SiR₂)₃, RSi(SiR₂CR₂)₃, RSi(CR₂SiR₂)₃, RSi(SiR₂SiR₂)₃, N, N(CR₂)₃, N(C=O)₃, N(CR₂CR₂)₃, NO, P, As, Sb, Bi, PO, AsO, SbO, BiO, PSe, AsSe, SbSe, BiSe, PTe, AsTe, SbTe 또는 BiTe이고;

R은 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 H, F, Cl, Br, I, NO₂, CN 또는 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지 또는 고리 알킬 또는 알콕시기이고, 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂ 기가 -R¹C=CR¹-, -C≡C-, Si(R¹)₂, Ge(R¹)₂, Sn(R¹)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR¹, -O-, -S-, -NR¹- 또는 -CONR¹-으로 치환될 수 있고, 하나 이상의 수소 원자가 F, 또는 1 내지 14 개의 탄소 원자를 갖는 아틸 또는 헤테로아틸기로 치환될 수 있고 하나 이상의 비방향족 R 라디칼에 의해 치환될 수 있으며, 복수의 치환체 R은 동일한 고리 상 및 두 개의 상이한 고리 상 둘 다에서, 함께 추가의 단수 또는 복수 고리, 지방 또는 방향 고리계를 차례로 형성할 수 있고;

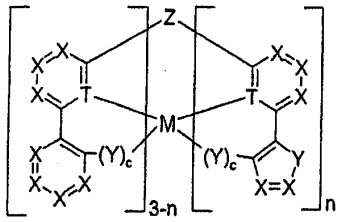
R¹은 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 또는 방향족 탄화수소 라디칼 이고;

c는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 0 또는 1이고;

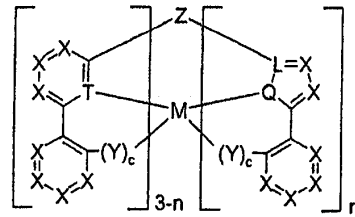
n은 1 또는 2이다].

청구항 9

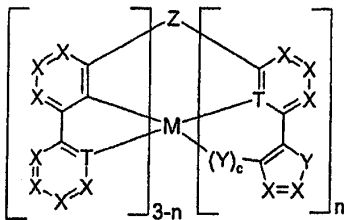
제 1 항에 있어서, 하기 화합물 (13) 내지 (30)으로부터 선택되는 금속 착물인 화합물 :



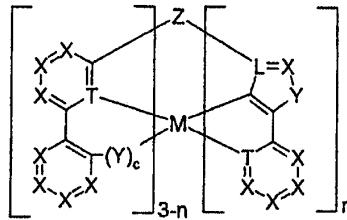
화합물 (13)



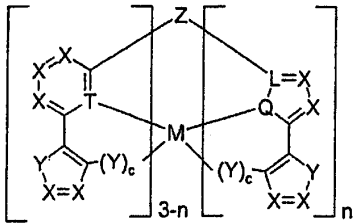
화합물 (14)



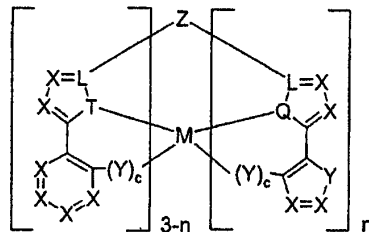
화합물 (19)



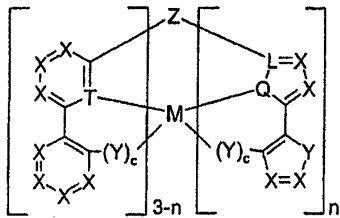
화합물 (20)



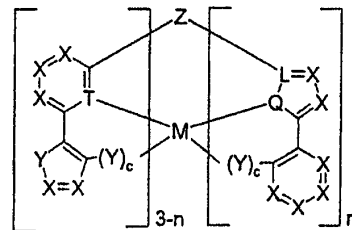
화합물 (17)



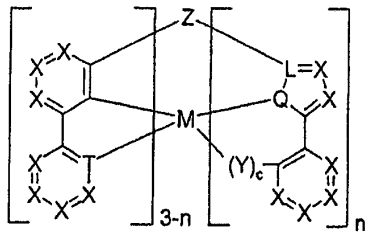
화합물 (18)



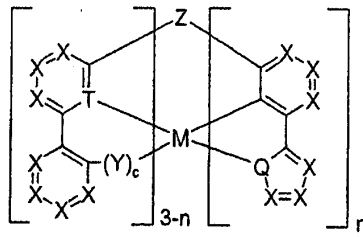
화합물 (15)



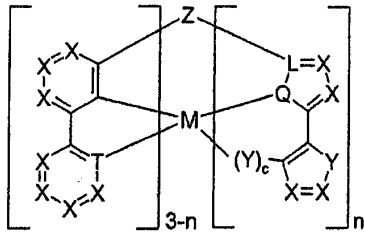
화합물 (16)



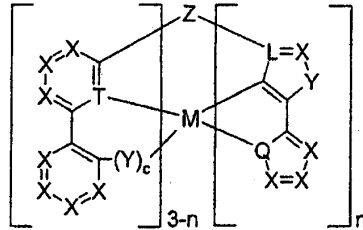
화합물 (21)



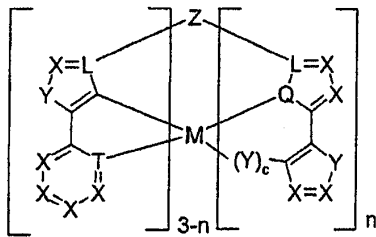
화합물 (22)



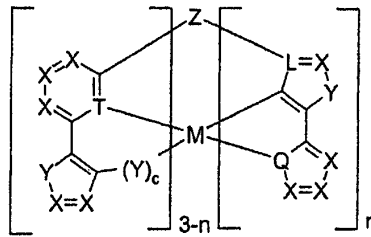
화합물 (23)



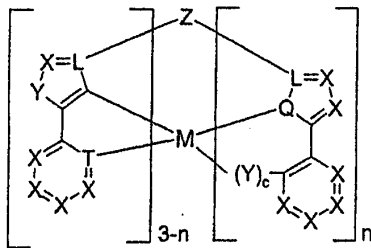
화합물 (24)



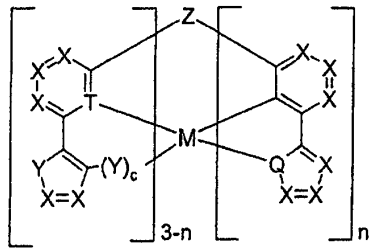
화합물 (27)



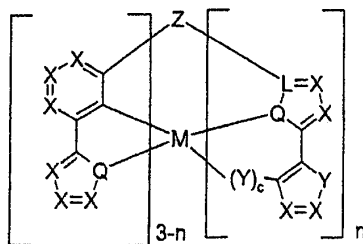
화합물 (28)



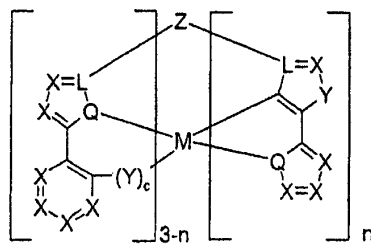
화합물 (25)



화합물 (26)



화합물 (29)



화합물 (30)

[식 중,

M은 Al, Ga, In, Tl, P, As, Sb, Bi, Sc, Y, La, V, Nb, Ta, Cr, Mo, W, Fe, Ru, Os, Co, Rh, Ir, Cu, Au, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb 또는 Lu이고;

L은 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 C, N 또는 P이고;

Q는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 O, S, Se, Te 또는 N이고;

T는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 N, P 또는 C이고;

X는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 CR, N 또는 P이고;

Y는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 NR^1 , O, S, Se, Te, SO, SeO, TeO, SO_2 , SeO_2 또는 TeO_2 이고;

Z는 B, BR, $\text{B}(\text{CR}_2)_3$, $\text{B}(\text{CR}_2\text{CR}_2)_3$, CR, COH, COR^1 , CF, CCl, CBr, C-I, CNR^1_2 , $\text{RC}(\text{CR}_2)_3$, $\text{RC}(\text{CR}_2\text{CR}_2)_3$, $\text{RC}(\text{SiR}_2)_3$, $\text{RC}(\text{SiR}_2\text{CR}_2)_3$, $\text{RC}(\text{CR}_2\text{SiR}_2)_3$, $\text{RC}(\text{SiR}_2\text{SiR}_2)_3$, cis,cis-1,3,5-시클로헥실, 1,3,5- $(\text{CR}_2)_3\text{C}_6\text{H}_3$, SiR, SiOH, SiOR^1 , $\text{RSi}(\text{CR}_2)_3$, $\text{RSi}(\text{CR}_2\text{CR}_2)_3$, $\text{RSi}(\text{SiR}_2)_3$, $\text{RSi}(\text{SiR}_2\text{CR}_2)_3$, $\text{RSi}(\text{CR}_2\text{SiR}_2)_3$, $\text{RSi}(\text{SiR}_2\text{SiR}_2)_3$, N, $\text{N}(\text{CR}_2)_3$, $\text{N}(\text{C}=\text{O})_3$, $\text{N}(\text{CR}_2\text{CR}_2)_3$, NO, P, As, Sb, Bi, PO, AsO, SbO, BiO, PSe, AsSe, SbSe, BiSe, PTe, AsTe, SbTe 또는 BiTe이고;

R은 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 H, F, Cl, Br, I, NO_2 , CN 또는 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지 또는 고리 알킬 또는 알콕시기이고, 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기가 $-\text{R}^1\text{C}=\text{CR}^1-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $\text{Si}(\text{R}^1)_2$, $\text{Ge}(\text{R}^1)_2$, $\text{Sn}(\text{R}^1)_2$, C=O, C=S, C=Se, $\text{C}=\text{NR}^1$, -O-, -S-, $-\text{NR}^1-$ 또는 $-\text{CONR}^1-$ 으로 치환될 수 있고, 하나 이상의 수소 원자가 F, 또는 1 내지 14 개의 탄소 원자를 갖는 아틸 또는 헤테로아틸기로 치환될 수 있고 하나 이상의 비방향족 R 라디칼에 의해 치환될 수 있으며, 복수의 치환체 R은 동일한 고리 상 및 두 개의 상이한 고리 상 둘 다에서, 함께 추가의 단수 또는 복수 고리, 지방 또는 방향 고리계를 차례로 형성할 수 있고;

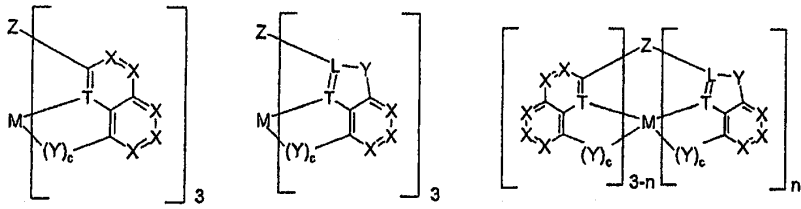
R^1 은 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 또는 방향족 탄화수소 라디칼 이고;

c는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 0 또는 1이고;

n은 1 또는 2이다].

청구항 10

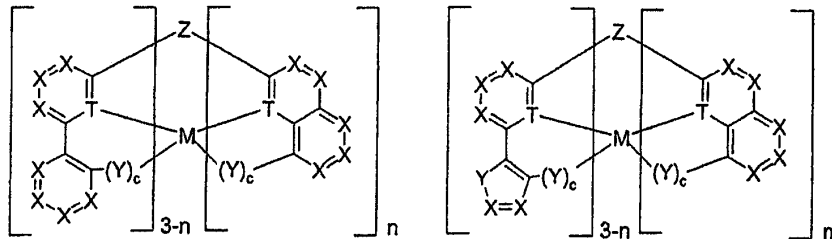
제 1 항에 있어서, 하기 화합물 (31) 내지 (41)로부터 선택되는 금속 착물인 화합물 :



화합물 (31)

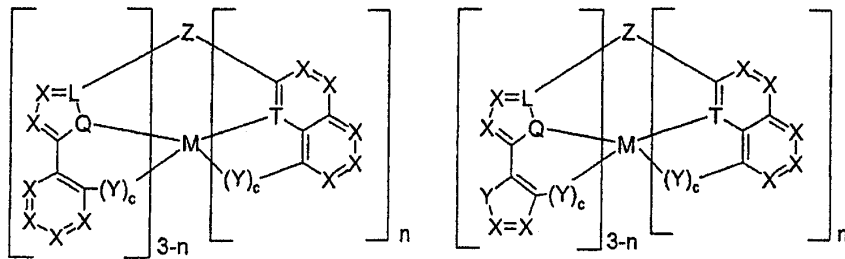
화합물 (32)

화합물 (33)



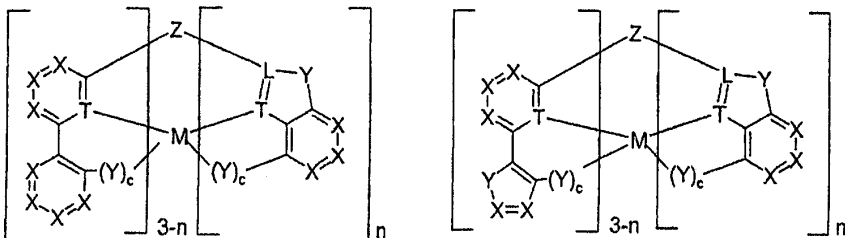
화합물 (34)

화합물 (35)



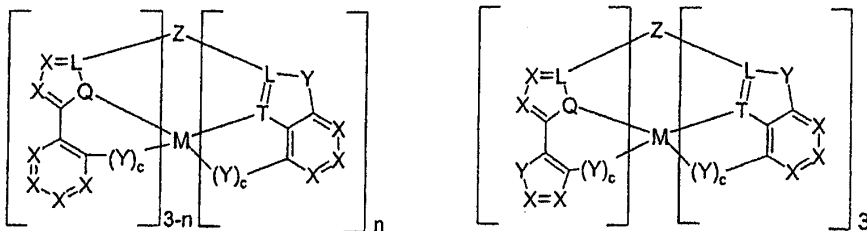
화합물 (36)

화합물 (37)



화합물 (38)

화합물 (39)



화합물 (40)

화합물 (41)

[식 중,

M은 Al, Ga, In, Tl, P, As, Sb, Bi, Sc, Y, La, V, Nb, Ta, Cr, Mo, W, Fe, Ru, Os, Co, Rh, Ir, Cu, Au, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb 또는 Lu이고;

L은 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 C, N 또는 P이고;

Q는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 O, S, Se, Te 또는 N이고;

T는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 N, P 또는 C이고;

X는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 CR, N 또는 P이고;

Y는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 NR¹, O, S, Se, Te, SO, SeO, TeO, SO₂, SeO₂ 또는 TeO₂이고;

Z는 B, BR, B(CR₂)₃, B(CR₂CR₂)₃, CR, COH, COR¹, CF, CCl, CBr, C-I, CNR¹₂, RC(CR₂)₃, RC(CR₂CR₂)₃, RC(SiR₂)₃, RC(SiR₂CR₂)₃, RC(CR₂SiR₂)₃, RC(SiR₂SiR₂)₃, cis,cis-1,3,5-시클로헥실, 1,3,5-(CR₂)₃C₆H₃, SiR, SiOH, SiOR¹, RSi(CR₂)₃, RSi(CR₂CR₂)₃, RSi(SiR₂)₃, RSi(SiR₂CR₂)₃, RSi(CR₂SiR₂)₃, RSi(SiR₂SiR₂)₃, N, N(CR₂)₃, N(C=O)₃, N(CR₂CR₂)₃, NO, P, As, Sb, Bi, PO, AsO, SbO, BiO, PSe, AsSe, SbSe, BiSe, PTe, AsTe, SbTe 또는 BiTe이고;

R은 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 H, F, Cl, Br, I, NO₂, CN 또는 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지 또는 고리 알킬 또는 알콕시기이고, 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂ 기가 -R¹C=CR¹-, -C≡C-, Si(R¹)₂, Ge(R¹)₂, Sn(R¹)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR¹, -O-, -S-, -NR¹- 또는 -CONR¹-으로 치환될 수 있고, 하나 이상의 수소 원자가 F, 또는 1 내지 14 개의 탄소 원자를 갖는 아틸 또는 헤테로아틸기로 치환될 수 있고 하나 이상의 비방향족 R 라디칼에 의해 치환될 수 있으며, 복수의 치환체 R은 동일한 고리 상 및 두 개의 상이한 고리 상 둘 다에서, 함께 추가의 단수 또는 복수 고리, 지방 또는 방향 고리계를 차례로 형성할 수 있고;

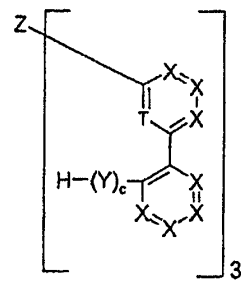
R¹은 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 또는 방향족 탄화수소 라디칼 이고;

c는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 0 또는 1이고;

n은 1 또는 2이다].

청구항 11

화합물 (42) 내지 (82)로부터 선택되는 화합물:



화합물 (42)

[식 중,

T는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 N, P 또는 C이고;

Y는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 NR¹, O, S, Se, Te, SO, SeO, TeO, SO₂, SeO₂ 또는 TeO₂이고;

Z는 B, BR, B(CR₂)₃, B(CR₂CR₂)₃, CR, COH, COR¹, CF, CCl, CBr, C-I, CNR¹₂, RC(CR₂)₃, RC(CR₂CR₂)₃, RC(SiR₂)₃, RC(SiR₂CR₂)₃, RC(CR₂SiR₂)₃, RC(SiR₂SiR₂)₃, cis,cis-1,3,5-시클로헥실, 1,3,5-(CR₂)₃C₆H₃, SiR, SiOH, SiOR¹, RSi(CR₂)₃, RSi(CR₂CR₂)₃, RSi(SiR₂)₃, RSi(SiR₂CR₂)₃, RSi(CR₂SiR₂)₃, RSi(SiR₂SiR₂)₃, N, N(CR₂)₃, N(C=O)₃,

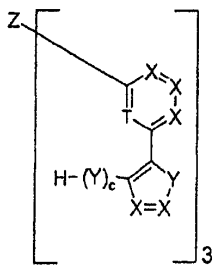
$N(CR_2CR_2)_3$, NO, P, As, Sb, Bi, PO, AsO, SbO, BiO, PSe, AsSe, SbSe, BiSe, PTe, AsTe, SbTe 또는 BiTe이고;

R은 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 H, F, Cl, Br, I, NO_2 , CN 또는 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지 또는 고리 알킬 또는 알콕시기이고, 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기가 $-R^1C=CR^1-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^1)_2$, $Ge(R^1)_2$, $Sn(R^1)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^1$, $-O-$, $-S-$, $-NR^1-$ 또는 $-CONR^1-$ 으로 치환될 수 있고, 하나 이상의 수소 원자가 F, 또는 1 내지 14 개의 탄소 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴기로 치환될 수 있고 하나 이상의 비방향족 R 라디칼에 의해 치환될 수 있으며, 복수의 치환체 R은 동일한 고리 상 및 두 개의 상이한 고리 상 둘 다에서, 함께 추가의 단수 또는 복수 고리, 지방 또는 방향 고리계를 차례로 형성할 수 있고;

R^1 은 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 또는 방향족 탄화수소 라디칼 이고;

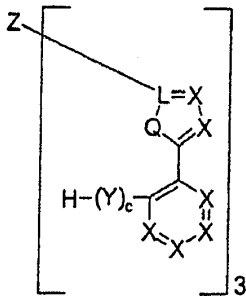
c는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 0 또는 1이고;

X는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 CR 또는 P이고;



화합물 (43)

식 중, 기호 및 표시 T, X, Y, Z, R, R^1 및 c는 상기 정의된 것과 같고;



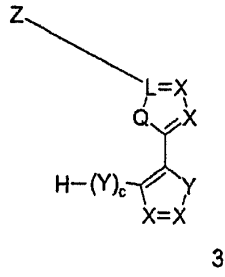
화합물 (44)

식 중,

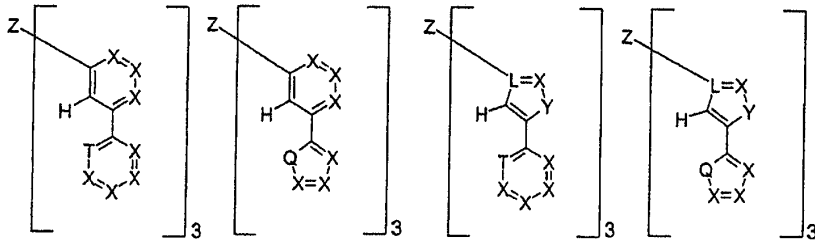
Q는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 O, S, Se, Te 또는 N이고;

기호 및 표시 T, X, Y, Z, R, R^1 및 c는 상기 정의된 것과 같고;

L은 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 C 또는 P이고;



화합물 (45)

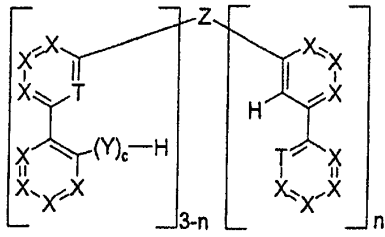


화합물 (46)

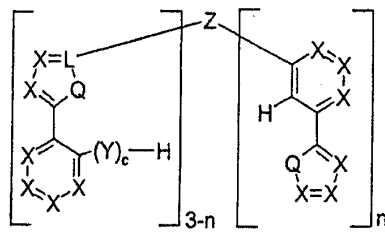
화합물 (47)

화합물 (48)

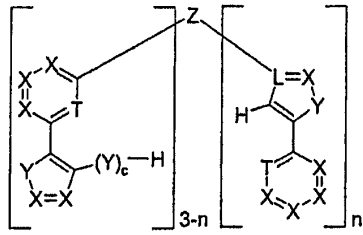
화합물 (49)



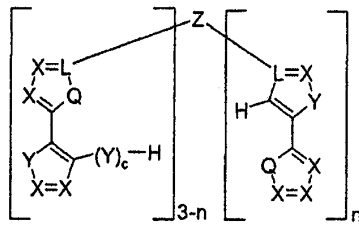
화합물 (50)



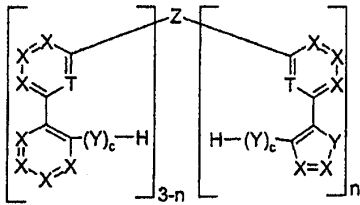
화합물 (51)



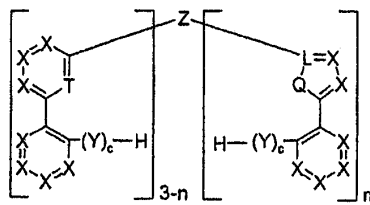
화합물 (52)



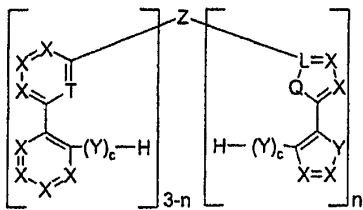
화합물 (53)



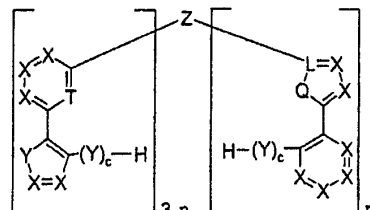
화합물 (54)



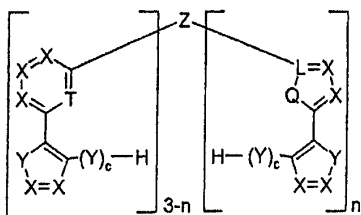
화합물 (55)



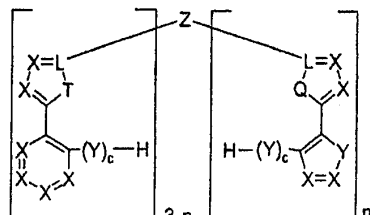
화합물 (56)



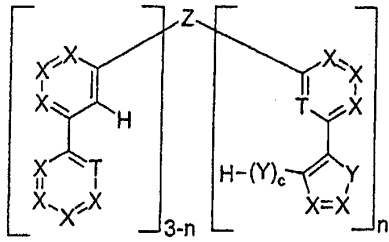
화합물 (57)



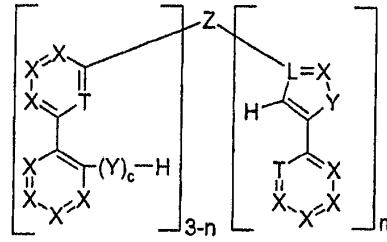
화합물 (58)



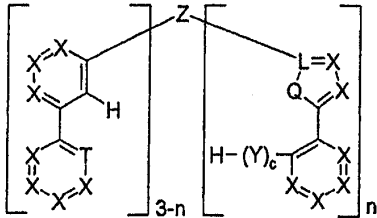
화합물 (59)



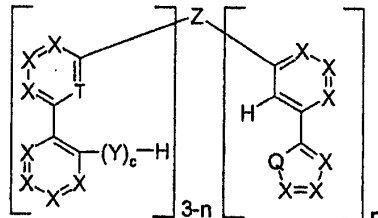
화합물 (60)



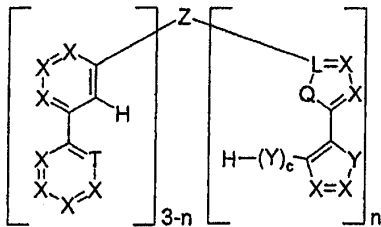
화합물 (61)



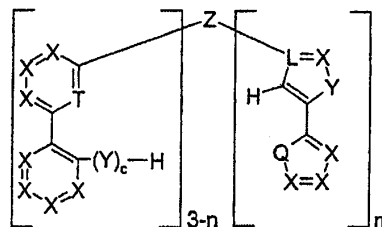
화합물 (62)



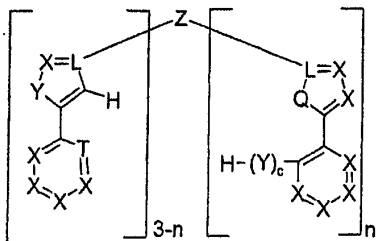
화합물 (63)



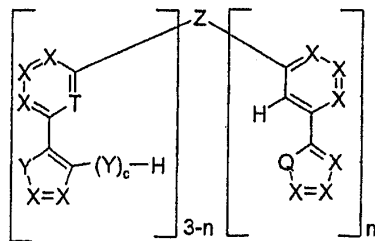
화합물 (64)



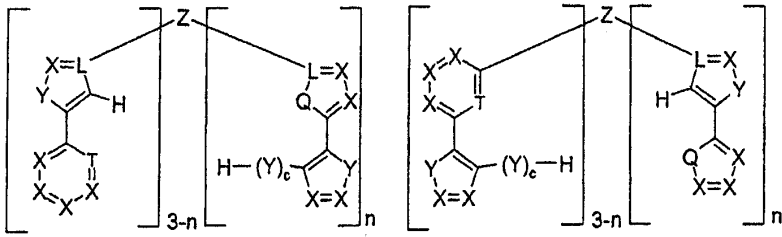
화합물 (65)



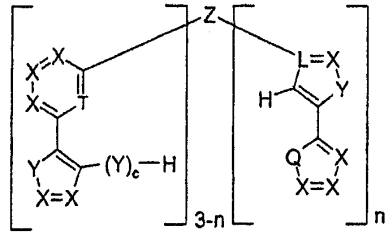
화합물 (66)



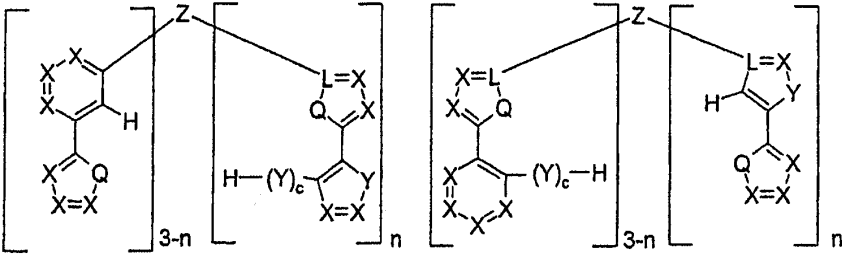
화합물 (67)



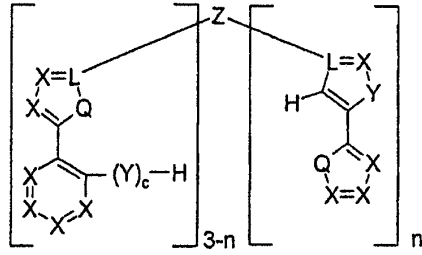
화합물 (68)



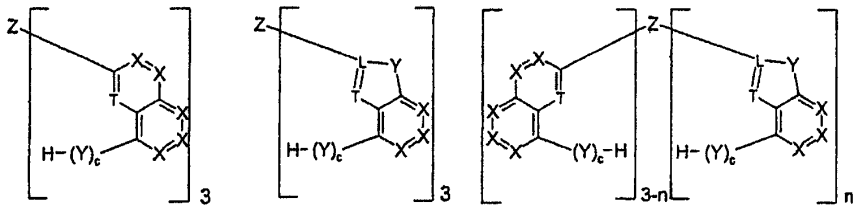
화합물 (69)



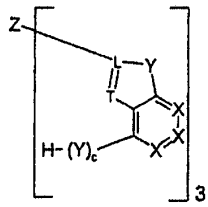
화합물 (70)



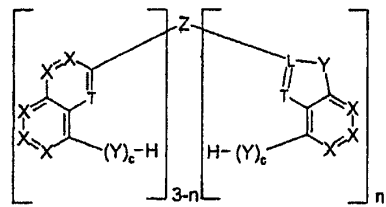
화합물 (71)



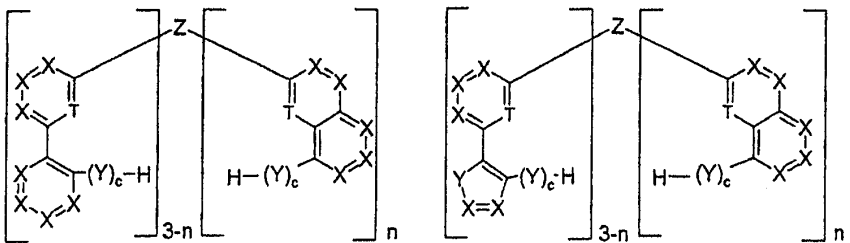
화합물 (72)



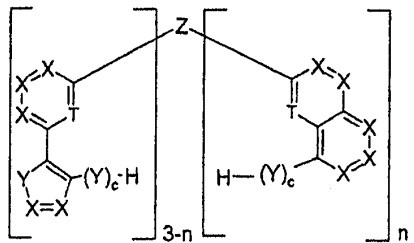
화합물 (73)



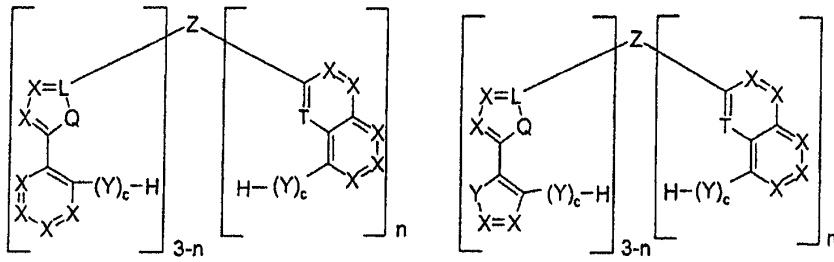
화합물 (74)



화합물 (75)

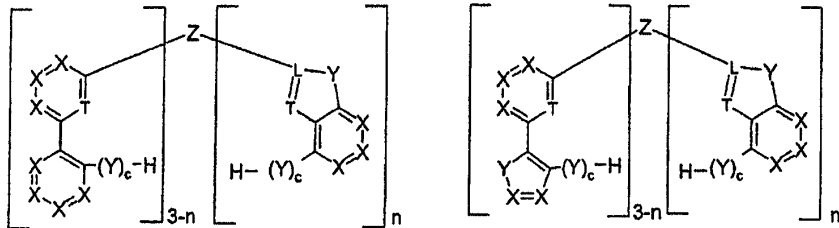


화합물 (76)



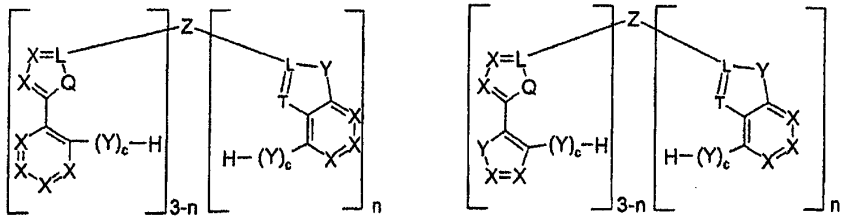
화합물 (77)

화합물 (78)



화합물 (79)

화합물 (80)



화합물 (81)

화합물 (82)

식 중, 기호 및 표시 L, Q, T, X, Y, Z, R, R¹ 및 c는 상기 정의된 것과 같고; n은 1 또는 2이다.

청구항 12

제 7 항에 있어서, 상기 기호 M = Al, Ga, In, Sc, Y, La, Ru, Os, Rh, Ir 또는 Au인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 13

제 7 항에 있어서, 상기 기호 L = C인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 14

제 7 항에 있어서, 상기 기호 Q = O 또는 S인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 15

제 7 항에 있어서, 상기 기호 T = N인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 16

제 7 항에 있어서, X = CR인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 17

제 7 항에 있어서, 상기 기호 Z = B, CH, CR¹, COR¹, CF, CCl, CBr, SiR, N, P, PO, RC(CR₂)₃, RC(CR₂CR₂)₃, cis,cis-1,3,5-시클로헥실, RSi(CR₂)₃, RSi(CR₂CR₂)₃, N(CR₂)₃, N(C=O)₃ 또는 N(CR₂CR₂)₃인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 18

제 7 항에 있어서, 상기 기호 Y = O 또는 S인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 19

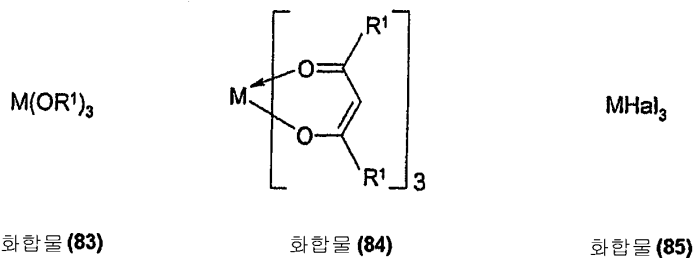
제 7 항에 있어서, 상기 기호 R = H, F, Cl, Br, I, CN 또는 1 내지 6 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지 또는 고리 알킬 또는 알콕시기이거나 또는 3 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴기이고 하나 이상의 비방향족 R 라디칼에 의해 치환될 수 있으며, 이 중 복수의 치환체 R은 동일한 고리 상 또는 두 개의 상이한 고리 상 중 하나에서, 함께 추가의 단수 또는 복수 고리, 지방 고리 또는 방향 고리계를 차례로 형성할 수 있는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 20

제 7 항에 있어서, 상기 R 라디칼(들)에 의해 임의로 형성된 복수환 고리계가 벤젠, 1- 또는 2-나프탈렌, 1-, 2- 또는 9-안트라센, 2-, 3- 또는 4-피리딘, 2-, 4- 또는 5-피리미딘, 2-피라진, 3- 또는 4-피리다진, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7- 또는 8-퀴놀린, 2- 또는 3-피롤, 3-, 4- 또는 5-피라졸, 2-, 4- 또는 5-이미다졸, 2- 또는 3-티오펜, 2- 또는 3-셀레노펜, 2- 또는 3-푸란, 2-(1,3,4-옥사디아졸), 인돌 또는 카르바졸에 부합하는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 21

제 11 항에 기재된 화합물 (42) 내지 (82)로부터 선택되는 화합물을 식 (83)의 금속 알콕사이드, 식 (84)의 금속 케토케토네이트 또는 식 (85)의 금속 할라이드와 반응시킴으로써 제 7 항에 기재된 화합물을 제조하는 방법:



[식 중, 기호 R¹은 제 7 항에 정의된 것과 같고 Hal = F, Cl, Br 또는 I이다].

청구항 22

제 1항 내지 제 10 항 및 제 12 항 내지 제 20 항 중 어느 한 항에 있어서, 이들의 순도(¹H NMR 및/또는 HPLC에 의하여 측정)가 99 % 초과인 화합물.

청구항 23

제 1 항 내지 제 10 항 및 제 12 항 내지 제 20 항 중 어느 한 항에 기재된 구조 (1) 또는 식 (1) 내지 (41)의 하나 이상의 화합물을 함유하는 접합, 반접합 또는 비접합 중합체 또는 덴드리머.

청구항 24

제 1 항 내지 제 10 항 및 제 12 항 내지 제 20 항 중 어느 한 항에 기재된 구조 (1) 또는 식 (1) 내지 (41)의 하나 이상의 화합물을 함유하는 접합, 반접합 또는 비접합 중합체 또는 덴드리머에 있어서, 제 7 항에 정의된 하나 이상의 R 라디칼이 상기 중합체 또는 덴드리머에 결합된 접합, 반접합 또는 비접합 중합체 또는 덴드리머.

청구항 25

제 23 항에 있어서, 상기 중합체가 폴리플루오렌, 폴리-스피로-비플루오렌, 폴리-파라-페닐렌, 폴리카르바졸, 폴리비닐카르바졸, 폴리티오펜, 또는 복수의 상기 단위들을 갖는 공중합체로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 중합체.

청구항 26

제 23 항에 있어서, 상기 중합체가 유기 용매 중에 용해되는 것을 특징으로 하는 중합체.

청구항 27

제 1 항 내지 제 10 항 및 제 12 항 내지 제 20 항 중 어느 한 항에 기재된 하나 이상의 화합물을 함유하는 전자 부품.

청구항 28

제 27 항에 있어서, 상기 전자 부품이 유기 광방출 다이오드(OLED), 유기 집적 회로(O-IC), 유기 마당 효과 트랜지스터(OFET), 유기 박막 트랜지스터(OTFT), 유기 태양 전지(O-SC) 또는 유기 레이저 다이오드(O-laser)인 것을 특징으로 하는 전자 부품.

청구항 29

제 23 항에 기재된 중합체 또는 덴드리머를 함유하는 전자 부품.

청구항 30

삭제

명세서

기술분야

[0001] 유기금속 화합물, 특히 d⁸ 금속의 화합물은 최광의의 전자 산업 내에서 분류될 수 있는 일련의 상이한 적용 유형에서 활성 성분(= 기능성 물질)으로서 가까운 장래에 사용될 것이다.

배경기술

[0002] 유기 성분을 기본으로 한 유기 전기발광 소자(상기 구조의 일반적인 설명에 대해서는 미국 특허공보 제 4,539,507호 및 제5,151,629호를 참조) 및 이의 개별적인 부품, 유기 발광 다이오드(OLED)는 Pioneer 사제의 유기 디스플레이가 장착된 입수 가능한 차량용 오디오에 의해 확인되는 바와 같이, 이미 시장에 도입된 바 있다. 이러한 유형의 추가의 제품들이 곧 도입될 것이다. 그럼에도 불구하고, 이러한 디스플레이가 현재 시장을 주도하고 있는 액정 디스플레이(LCD)와 실질적으로 경쟁하거나 이를 따라잡기 위해서는, 여전히 분명한 개선이 요구된다.

[0003] 이러한 방향으로의 개선은 금속 킬레이트 착물에 기초한 전자 수송 물질 및 청색 단일선 방출체의 개선이며, 본원에서는 특히 알루미늄 및 란타넘 킬레이트 착물에 주목한다.

[0004] 최근 몇 년간 나타난 추가의 개선은 형광 대신 인광을 나타내는 유기금속 착물을 사용하는 것이다[M. A. Baldo, S. Lamansky, P. E. Burrows, M. E. Thompson, S. R. Forrest, Applied Physics Letters, 1999, 75, 4-6].

[0005] 스핀 확률과 관련된 이론적인 근거로, 인광 방출체로서 유기금속 화합물을 사용하면 4배에 이르는 에너지 효율 및 전력 효율이 가능하다. 이러한 신규한 개발이 그 자체로 달성될 지의 여부는 이러한 이점 (단일선 방출=형광과 비교하여 삼중선 방출 = 인광)을 또한 OLED에 이용할 수 있는 상응하는 장치 조성물이 발견될 수 있는지의 여부에 크게 좌우된다. 실제 사용을 위한 필수 조건은 이동 운용을 가능하게 하기 위하여, 특히 긴 작동 수명, 열 응력에 대한 높은 안정성 및 낮은 사용 및 작동 전압이다.

[0006] 두 가지 경우 모두, 상응하는 킬레이트 착물 또는 유기금속 화합물에 대한 효과적인 화학적 접근이 있어야만 한다. 그러나, 루테튬, 오스뮴, 로듐, 이리듐 및 금 화합물의 경우, 상기 금속의 회박함이라는 배경에도 불구하고 특히 주목된다.

[0007] 지금까지 문헌에는 발색 성분으로서 형광 또는 인광 방출체를 포함한 OLED의 두가지 기본 설계가 기재되어 있다:

[0008] 유형 1은 일반적으로 하기 층 구조를 갖는다 [인광 방출체를 포함한 OLED의 예를 사용: M.E. Thompson 등,

Proceedings of SPIE, 31.07 - 02.08.2000, 산디에고, 미국, 4105 권, 119-124 면]:

- [0009] 1. 담체판 = 기판 (일반적으로 유리 또는 플라스틱막).
- [0010] 2. 투명 양극 (일반적으로 산화인듐주석, ITO).
- [0011] 3. 정공(hole) 수송층(HTL): 일반적으로 트리아릴아민 유도체류.
- [0012] 4. 방출층(EL): 상기 층은 형광 방출체 또는 인광 방출체, 또는 형광 방출체 또는 인광 방출체로 도핑된 매트릭스 물질 중 하나로 이루어진다.
- [0013] 5. 전자 수송층(ETL): 일반적으로 트리스(8-히드록시퀴놀리나토)알루미늄(III)류 (AlQ_3).
- [0014] 6. 음극: 여기에서는, 일반적으로 금속, 금속 배합물 또는 저작업능을 갖는 금속 합금, 예를 들어 Al-Li를 사용한다.
- [0015] 유형 2는 일반적으로 하기 층 구조를 갖는다 [인광 방출체를 포함한 OLED의 예를 사용: T. Tsutsui 등, Jpn. J. Appl. Phys., 1999, 38, L 1502- L 1504]:
- [0016] 1. 담체판 = 기판 (일반적으로 유리 또는 플라스틱막).
- [0017] 2. 투명 양극 (일반적으로 산화인듐주석, ITO).
- [0018] 3. 정공 수송층(HTL): 일반적으로 트리아릴아민 유도체류.
- [0019] 4. 매트릭스 및 방출층(EL): 상기 층은 형광 방출체 또는 인광 방출체로 도핑된 매트릭스 물질, 예를 들어 트리아릴아민 유도체류로 이루어진다.
- [0020] 5. 전자 수송/정공 차단층(HBL): 일반적으로 질소 헥테로고리류 또는 금속 착물류, 예를 들어 비스(2-메틸-8-히드록시퀴놀리나토)(4-페닐페놀라토)알루미늄(II)(B- AlQ_3).
- [0021] 6. 전자 수송층(ETL): 일반적으로 트리스(8-히드록시퀴놀리나토)알루미늄(III)류 (AlQ_3).
- [0022] 7. 음극: 여기에서는, 일반적으로 금속, 금속 배합물 또는 저작업능을 갖는 금속 합금, 예를 들어 Al이 사용되었다.
- [0023] 얇은 투명 음극을 통해 빛을 방출하는 것이 또한 가능하다. 이러한 장치들은 (적용에 따라) 적절히 구조화, 접촉화 및 최종적으로는 용접 밀폐되는데, 이는 상기 장치의 수명이 일반적으로 물 및/또는 공기의 존재 중 현저히 단축되기 때문이다.
- [0024] 상기 OLED의 특성 자료들은 하기를 포함하는 약점들을 나타낸다:
- [0025] 1. 대부분의 경우 작동 수명이 여전히 매우 짧고, 이는 OLED를 시장에 도입하는데 있어 장애물이다.
- [0026] 2. 효율-휘도 곡선으로부터, 휘도의 증가와 함께 효율이 종종 크게 감소함이 명백하다. 이는 실제로 요구되는 고휘도가 오직 고전력 소비를 통해서만 달성될 수 있다는 것을 의미한다. 그러나, 고전력 소비는 휴대 장치(휴대폰, 랩탑 등)의 고전지 전력을 요구한다. 게다가, 큰 부분이 열로 전환되는 고전력 소비는 디스플레이의 열 손상을 초래할 수 있다.
- [0027] 상기 예시된 OLED 장치에서, 상술된 기능성 물질들이 최적화되었거나 집중적으로 최적화되고 있다.
- [0028] 한동안, 최광의의 (슈도)옥타헤드랄 금속 착물이 상기 ETL(예, AlQ_3 , 참조: C.W.Tang 등, Applied Phys. Lett. 1987, 51(12), 913), HBL(예, B- AlQ_3 , 참조: R. Kwong 등, Applied Physics Letters 2002, 81(1), 162)로서, EL 내 매트릭스 물질(예, B- AlQ_3 , 참조: C.H. Chen 등, Proceedings of SPIE-The International Society for Optical Engineering 1988, 3421(Display Technologies II), 78)로서, 단일선 방출체(예, AlQ_3 및 다른 착물들, 참조: S. Tokito 등, Synthetic Metals 2000, 111-112, 393)로서, 그리고 삼중선 방출체(예, $Ir(PPy)_3$, 참조: WO 00/70655; 예, $Ir(TPy)_3$ 및 $Ir(BTPy)_3$, 참조: S. Okada 등, Proceedings of the SID, 2002, 52.2, 1360)로서 사용되어왔다. 각각의 물질에 국한적인 개별적 약점에 부가하여, 공지된 금속 착물들은 하기에 간단히 나타낼 일반적인 약점들을 갖는다:
- [0029] 1. 다수의 공지된 금속 착물, 특히 알루미늄과 같은 주족 금속을 포함하는 것들은 때때로 상기 금속 착물이 공

기에 단시간 노출된 후 조차도 현저히 분해되는 정도의 상당한 가수분해 감도를 갖는다. 반면 다른 것들, 예를 들어 전자 수송 물질로서 사용되는 AIQ₃는 물을 첨가하는 경향이 있다.

[0030] 이러한 그리고 유사한 알루미늄 착물들의 고흡습성은 중대하고 실질적인 단점이다. 표준 조건 하에서 합성되고 보관된 AIQ₃는 히드록시퀴놀린 리간드에 부가하여, 착물 분자당 한 분자의 물을 또한 포함한다[예: H.Schmidbauer 등, Z. Naturforsch. 1991, 46b, 901-911]. 이것을 제거하기는 극히 어렵다. 따라서 OLED에 사용하기 위해, AIQ₃를 고가이며 불편한 방식인 복잡한 다단계 승화 방법으로 정제하여야 하고, 그 후에 보호 기체 대기 중에 물을 배제하고 보관 및 취급하여야 한다. 게다가, 개별 AIQ₃ 배치마다 품질의 편차가 크고, 또한 보관 안정성이 부족함을 발견하였다(참조: S. Karg, E-MRS Konferenz 30.5.00-2.6.00 Strasbourg).

[0031] 2. 다수의 공지된 금속 착물은 열안정성이 낮다. 금속 착물의 진공 석출에서는, 반드시 항상 유기 열분해 산물의 방출이 초래되고, 이들 중 몇몇은 소량에서도 OLED의 작동 수명을 상당히 단축시킨다.

[0032] 3. 실질적으로 상기 문헌에 기재되고 지금까지 OLED에 적용됨이 발견된 모든 금속착물이 세 개의 두자리 리간드에 배워진 중심 금속을 포함하는 동종리간드, (슈도)옥타헤드랄 착물이다. 이러한 설계의 착물은 두 개의 이성체 형태, 자오선 및 거울상 이성체로 발생될 수 있다. 종종, 상기 두 이성체 중 하나에 대해 아주 약간의 열역학적 선호가 있다. 특정 조건, 예를 들어 특정 승화 온도 하에서, 이는 하나 또는 다른 하나의 이성체 또는 이 둘의 혼합물조차도 발생하게 한다. 이는 바람직하지 않은데, 상기 두 이성체들이 종종 그들의 물리적 특성(방출 스펙트럼, 전자 및 정공 전도성 등)에 있어 명백히 상이하고, 따라서 상기 제조 과정 중 작은 변화의 발생에서조차도 OLED의 상기 특성들이 서로 명백히 이탈할 수 있기 때문이다. 이들의 예는 각각 녹색 및 청색 광자발광을 나타내는 mer-AIQ₃ 및 fac-AIQ₃의 명백히 상이한 특성이다(M.Coelle, Chemical Communications, 2002, 23, 2908-2909 참조).

[0033] 따라서, 상술된 약점을 가지지 않지만 공지된 금속 착물에 비해 전혀 효능 및 방출 색상이 하등하지 않은 대안적인 화합물에 대한 요구가 있다.

발명의 상세한 설명

[0034] 놀랍게도, 폴리포달 리간드의 금속 착물이 ETL로서, HBL로서, EL 내 매트릭스 물질로서, 단일선 방출체 및 또한 삼중선 방출체로서 사용될 때 뛰어난 특성을 나타낸다는 것을 이제 발견하였고, 상기 특별한 구체적 기능은 금속 및 적합한 동반 리간드의 적절한 선택에 의해 결정된다.

[0035] 상기 화합물들은 본 발명의 주제 물질을 형성한다. 상기 화합물들은 하기의 일반적 특성들을 특징으로 한다:

[0036] 1. 승화 과정 중 부분적으로 또는 완전히 열분해되기 쉬운 다수의 공지된 금속 착물들과 비교하여, 본 발명의 화합물은 높은 열안정성을 특징으로 한다. 적당한 장치에 사용되었을 때, 이러한 안정성은 작동 수명을 명백히 연장시킨다.

[0037] 2. 본 발명의 화합물들은 어떠한 현저한 가수분해성 또는 흡습성도 가지지 않는다. 공기 및 수증기의 투입과 함께 며칠 또는 몇 주 동안 보관하여도 상기 물질에 어떠한 변화도 일어나지 않는다. 상기 화합물에 물이 첨가되는 것을 관찰하는 것은 불가능했다. 상기 물질들은 좀더 단순한 조건 하에서 정제, 수송, 보관 및 제조되어 사용될 수 있는 장점을 갖는다.

[0038] 3. 전기발광 소자의 ETL 물질로서 사용된 본 발명의 화합물들은 특히 사용된 전류 밀도에 독립적인 고효율을 가져온다. 이는 고전류 밀도에서조차도 매우 양호한 효율을 가능하게 한다.

[0039] 4. 전기발광 소자의 HBL 물질로서 사용된 본 발명의 화합물들은 특히 사용된 전류 밀도에 독립적인 고효율을 가져온다. 이는 고전류 밀도, 즉 고휘도에서조차도 매우 양호한 효율을 가능하게 한다. 게다가, 본 발명의 물질들은 정공에 대해 안정하나, 예를 들어, 다른 금속 착물들, 예를 들어 AIQ₃ 및 유사 화합물들(참조, 예: Z. Popovic 등, Proceedings of SPIE, 1999, 3797, 310-315)의 경우에는 충분한 정도로 그러하지 않다.

[0040] 5. 순수 형태의 EL 물질로서 또는 물들이개와 배합된 매트릭스 물질로서 전기발광 소자에 사용된 본 발명의 화합물들은 고효율을 가져오고, 상기 전기발광 소자는 가파른 전류-전압 곡선 및 특히 긴 작동수명이 주목할 만하다.

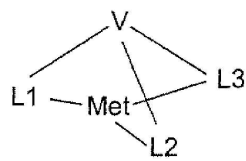
[0041] 6. 본 발명의 화합물들은 신뢰할 수 있는 고수율의 양호한 재생성을 갖도록 제조될 수 있고, 배치간 편차가 없다.

[0042] 7. 본 발명의 화합물들 중 몇몇은 유기 용매 내에서 뛰어난 용해성을 가진다. 이는 이러한 물질들을 보다 쉽게 정제하게 해주고, 또한 코팅 또는 프린팅 기술에 의해 이들을 용액으로부터 가공가능하게 만든다. 증발에 의한 상업적 공정에서도 또한, 이러한 특성이 유리한데, 이는 상기 단위들 또는 사용되는 웨도우 마스크의 정제가 상당히 쉬워졌기 때문이다.

[0043] 하기에서 좀더 자세히 설명될 폴리포달 리간드의 킬레이트 착물 및 유기금속 화합물의 분류 및 전기광학 성분에서 기능성 물질로서의 이들의 사용은 신규하고 지금까지 문헌에 기술되지 않았으나, 순물질로서의 이들의 효과적인 제조 및 이용은 이러한 목적 때문에 매우 중요하다.

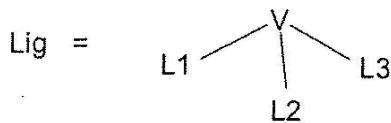
[0044] 따라서 본 발명은 화학식 2의 폴리포달 리간드 Lig에 배워된 하나 이상의 금속 Met를 포함하는 화학식 1의 금속 착물을 제공한다;

화학식 1



[0045]

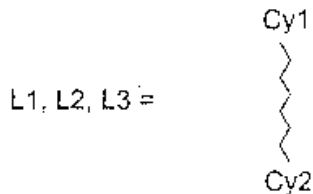
화학식 2



[0046]

[0047] [식 중, V는 1 내지 80 원자들을 포함하고 각각의 예에서 동일하거나 상이할 수 있는 세 개의 부분 리간드 L1, L2 및 L3가 서로 공유 결합되어 있는 것을 특징으로 하는 브릿지 단위이고, 상기 세 개의 부분 리간드 L1, L2 및 L3가 화학식 3을 만족시키며,

화학식 3



[0048]

[0049] 식 중, Cy1 및 Cy2는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 치환 또는 비치환, 포화, 불포화 또는 방향족 호모 또는 헤테로고리 또는 융합계의 부분 호모 또는 부분 헤테로고리에 상응하고, 각각 고리 원자를 통해 또는 호모 또는 헤테로고리에 고리밖 결합된 원자를 통해 상기 금속에 이온성, 공유성 또는 배위성 결합을 한다].

[0050] 상기 브릿지 단위 V는 주기율표 원소의 주족 III, IV 및/또는 V로부터 1 내지 80 원자를 갖는다. 이들은 상기 브릿지 단위의 기본 골격을 형성한다.

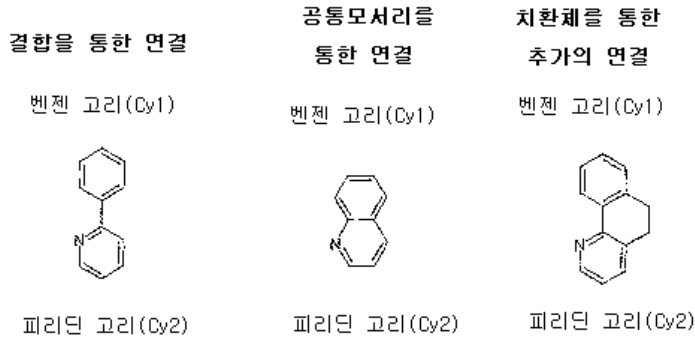
[0051] 상기에 선택된 지그재그 선 기호는 본원에서는 단지 일반적인 용어로 Cy1 과 Cy2의 연결을 나타낸다. 상기 고리들의 가능한 연결은 하기에서 좀더 자세히 설명한다.

[0052] 호모 또는 헤테로고리 Cy1 및 Cy2는 단일 결합을 통해 연결될 수 있다. 또한, 부분-호모 또는 부분-헤테로고리 Cy1 및 Cy2는 공통 모서리를 통해 연결될 수 있다. 게다가, 단일 결합 또는 공통 모서리를 통한 연결

에 부가하여, 이들은 호모 또는 헤테로고리 Cy1 및 Cy2 또는 부분-호모 또는 부분-헤테로고리 상의 치환체를 통해 서로 연결될 수 있고, 따라서 다고리, 방향 또는 지방고리계를 형성할 수 있다.

[0053] 본원에서 가능한 연결은 다수의 모든 가능한 연결을 한정하려는 의도 없이 벤젠 고리(Cy1) 및 피리딘(Cy2)의 예를 사용한 예로서 본원에 나타낼 것이다(도식 A 참조).

[0054] [도식 A]



[0055]

[0056] 하전되지 않은, 즉 외부적으로 전기적 중성인 것을 특징으로 하는 화학식 1의 본 발명의 화합물들이 바람직하다.

[0057] 하나 이상의 부분 리간드 L1, L2 및 L3, 바람직하게는 두 개 이상의 부분 리간드 L1, L2 및 L3, 더욱 바람직하게는 세 개의 부분 리간드 모두가 하나씩 음으로 하전된 것을 특징으로 하는 화학식 1의 본 발명의 화합물들이 바람직하다.

[0058] L1=L2=L3인 것을 특징으로 하는 화학식 1의 본 발명의 화합물들이 바람직하다.

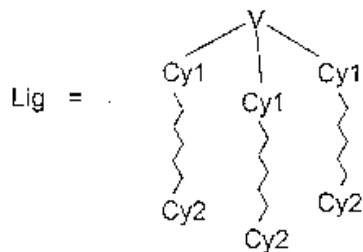
[0059] L1≠L2인 것을 특징으로 하는 화학식 1의 본 발명의 화합물들이 또한 바람직하다.

[0060] Cy1이 Cy2와 상이한 것을 특징으로 하는 화학식 1의 본 발명의 화합물들이 더욱 바람직하다.

[0061] 연결 단위 V가 연결 원자로서 주족 3, 4 또는 5의 원소, 또는 3 내지 6원자 호모 또는 헤테로고리를 포함하는 것을 특징으로 하는 화학식 1의 본 발명의 화합물들이 바람직하다.

[0062] 화학식 4의 폴리포달 리간드 Lig가 금속 Met에 거울상 배위 모양을 발생시키는 것을 특징으로 하는 화학식 1의 본 발명의 화합물들이 바람직하다.

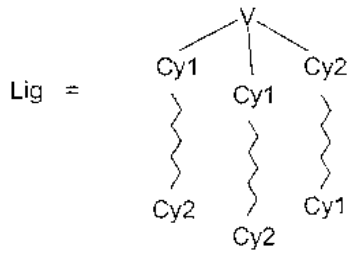
화학식 4



[0063]

[0064] 화학식 5의 폴리포달 리간드 Lig가 금속 Met에 자오선 배위 모양을 발생시키는 것을 특징으로 하는 화학식 1의 본 발명의 화합물들이 또한 바람직하다.

화학식 5



[0065]

[0066]

본 출원과의 관계에 있어, 거울상 및 자오선 배위는 6 개의 공여(donor)원자를 갖는 금속 Met의 환경을 나타낸다. 거울상 배위는 3 개의 동일한 공여원자가 (슈도)옥타헤드랄 배위 폴리헤드론의 삼각형면을 채우고, 첫 번째 3 개 외의 다른 3 개의 동일한 공여원자가 (슈도)옥타헤드랄 배위 폴리헤드론의 또다른 삼각형면을 채울 때 존재한다. 유사하게, 자오선 배위는 3 개의 동일한 공여원자가 (슈도)옥타헤드랄 배위 폴리헤드론의 한 자오선을 채우고, 첫 번째 3 개 외의 다른 3 개의 동일한 공여원자가 (슈도)옥타헤드랄 배위 폴리헤드론의 또다른 자오선을 채우는 것으로 이해된다. 이것은 3 개의 질소 공여원자 및 3 개의 탄소 공여원자의 배위의 예에 관련된 예로서 하기에 나타낼 것이다(도식 B 참조). 이러한 설명은 공여원자에 관한 것이고 이러한 공여원자를 제공하는 고리 Cy1 및 Cy2에 관한 것이 아니기 때문에, 상기 세 개의 고리들 Cy1 및 세 개의 고리들 Cy2는 각각의 예에서 동일하거나 상이할 수 있고 그럼에도 불구하고 본 출원과의 관계에 있어 거울상 또는 자오선 배위에 부합한다.

[0067]

동일한 공여원자는 동일한 원소(예를 들어, 질소)로 이루어진 것들로 이해되고, 이러한 원소들이 상이한 구조들 또는 고리 구조들 내에 혼입되었는지와는 상관없다.

[0068]

[도식 B]

[0069]

3 개의 질소 공여원자 및 3 개의 탄소 공여원자의 예를 사용한 거울상 및 자오선 배위



거울상 배위

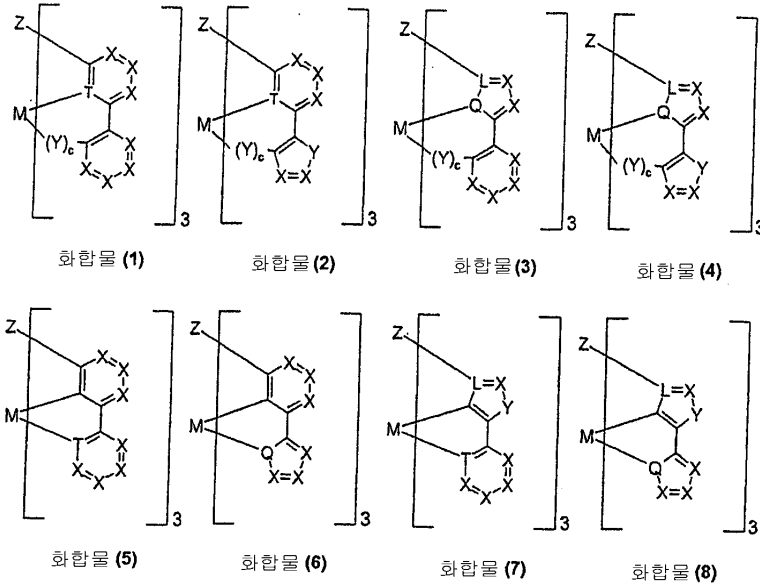
자오선 배위

[0070]

[0071]

특히 도식 1에 기재된 금속의 거울상 배위 형태를 갖는 화합물들 (1) 내지 (8)에 따른 금속 착물들이 바람직하다.

[0072] 도식 1:



[0073]

[0074] [식 중 기호 및 표시는 각각 하기와 같이 정의된다:

[0075] M은 Al, Ga, In, Tl, P, As, Sb, Bi, Sc, Y, La, V, Nb, Ta, Cr, Mo, W, Fe, Ru, Os, Co, Rh, Ir, Cu, Au, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu이고;

[0076] L은 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 C, N, P이고;

[0077] Q는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 O, S, Se, Te, N이고;

[0078] T는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 N, P, C이고;

[0079] X는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 CR, N, P이고;

[0080] Y는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 NR¹, O, S, Se, Te, SO, SeO, TeO, SO₂, SeO₂, TeO₂이고;

[0081] Z는 B, BR, B(CR₂)₃, B(CR₂CR₂)₃, CR, COH, COR¹, CF, CCl, CBr, C-I, CNR¹₂, RC(CR₂)₃, RC(CR₂CR₂)₃, RC(SiR₂)₃, RC(SiR₂CR₂)₃, RC(CR₂SiR₂)₃, RC(SiR₂SiR₂)₃, cis,cis-1,3,5-시클로헥실, 1,3,5-(CR₂)₃C₆H₃, SiR, SiOH, SiOR¹, RSi(CR₂)₃, RSi(CR₂CR₂)₃, RSi(SiR₂)₃, RSi(SiR₂CR₂)₃, RSi(CR₂SiR₂)₃, RSi(SiR₂SiR₂)₃, N, N(CR₂)₃, N(C=O)₃, N(CR₂CR₂)₃, NO, P, As, Sb, Bi, PO, AsO, SbO, BiO, PSe, AsSe, SbSe, BiSe, PTe, AsTe, SbTe, BiTe이고;

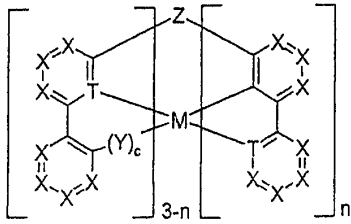
[0082] R은 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 H, F, Cl, Br, I, NO₂, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지 또는 고리 알킬 또는 알콕시기이고, 이 중 하나 이상의 인접하지 않은 CH₂ 기가 -R¹C=CR¹, -C≡C-, Si(R¹)₂, Ge(R¹)₂, Sn(R¹)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR¹, -O-, -S-, -NR¹- 또는 -CONR¹-으로 치환될 수 있고, 하나 이상의 수소 원자가 F, 또는 1 내지 14 개의 탄소 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴기로 치환될 수 있고 하나 이상의 비방향족 R 라디칼에 의해 치환될 수 있으며, 복수의 치환체 R은 동일한 고리 상 및 두 개의 상이한 고리 상 둘 다에서, 함께 추가의 단수 또는 복수 고리, 지방 또는 방향 고리계를 차례로 형성할 수 있고;

[0083] R¹은 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 또는 방향족 탄화수소 라디칼이고;

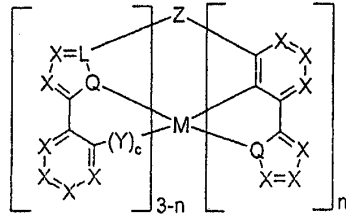
[0084] c는 각각의 예에서 동일하거나 상이하고 0 또는 1이다.

[0085] 게다가, 도식 2에 따른 금속의 자오선 배위 형태를 갖는 화합물들 (9) 내지 (12)도 또한 바람직하다.

[0086] 도식 2:

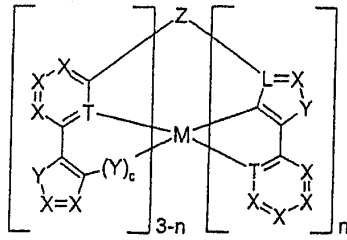


화합물 (9)

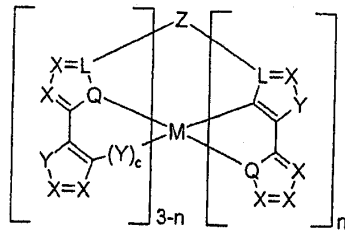


화합물 (10)

[0087]



화합물 (11)



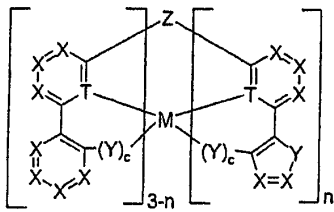
화합물 (12)

[0088]

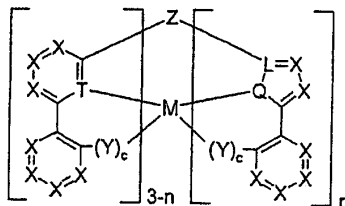
[0089] [식 중, 기호 및 표시 M, L, Q, T, X, Y, Z, R, R¹ 및 c는 각각 도식 1에 정의된 것과 같고, 식 중 n은 1 또는 2이다].

[0090] 본 발명은 추가로 화합물 (1), (2), (3) 및/또는 (4)와 같은 유형의 부분 리간드를 동시에 갖는 화합물들, 즉 혼합 리간드계를 또한 제공한다. 이들은 도식 3에 기재된 식(13) 내지 (30)에 의해 설명된다.

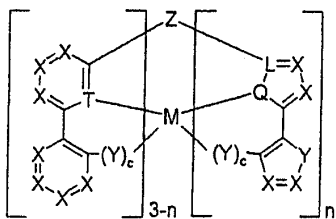
[0091] 도식 3:



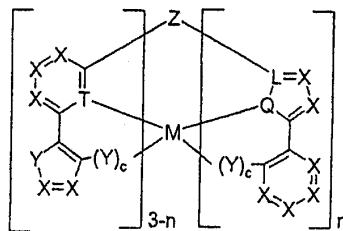
화합물 (13)



화합물 (14)

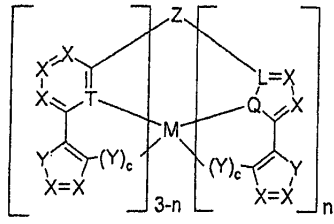


화합물 (15)

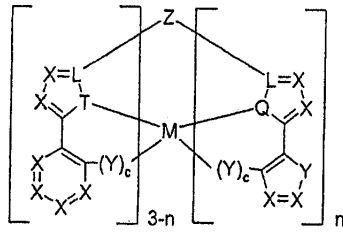


화합물 (16)

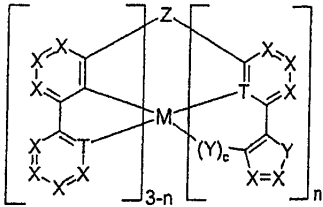
[0092]



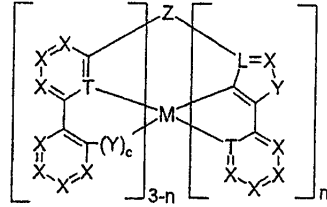
화합물 (17)



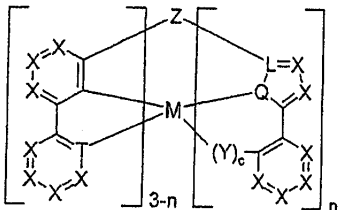
화합물 (18)



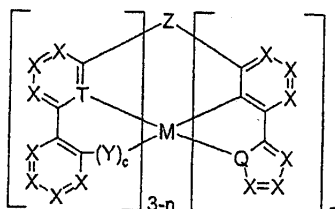
화합물 (19)



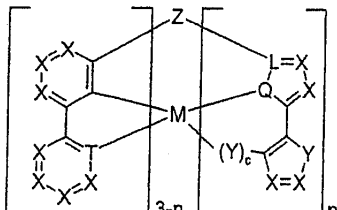
화합물 (20)



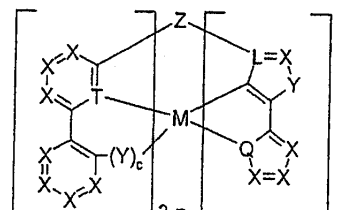
화합물 (21)



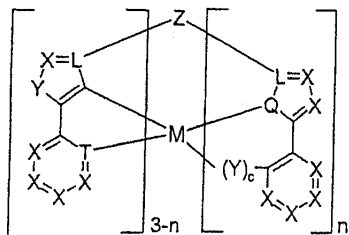
화합물 (22)



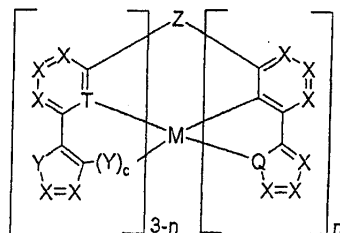
화합물 (23)



화합물 (24)

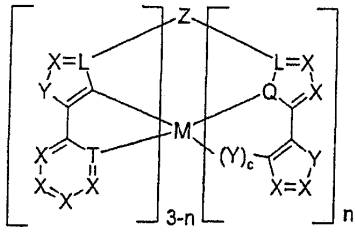


화합물 (25)

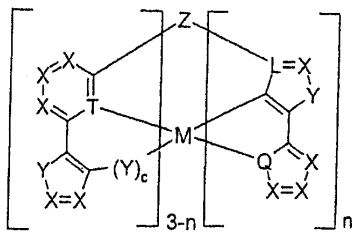


화합물 (26)

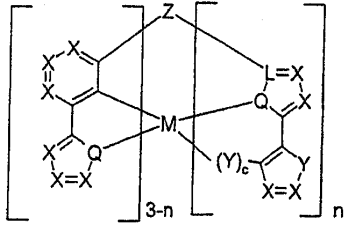
[0093]



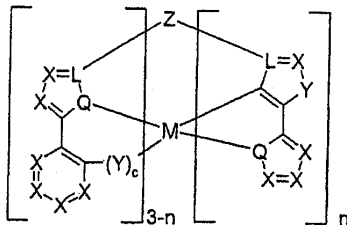
화합물 (27)



화합물 (28)



화합물 (29)



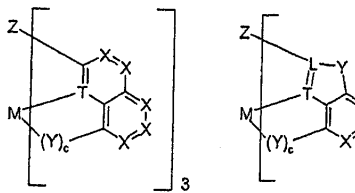
화합물 (30)

[0094]

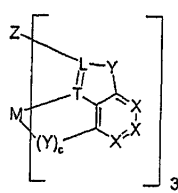
[0095] [식 중, 기호 및 표시 M, L, Q, T, X, Y, Z, R, R¹, c 및 n은 각각 도식 1 및 2에 정의된 것과 같다].

[0096] 본 발명은 추가로 도식 4에 기재된 융합된 방향족 리간드계를 포함하는 화합물들 (31) 내지 (41)을 또한 제공한 다:

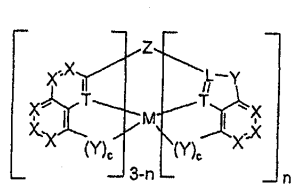
[0097] 도식 4:



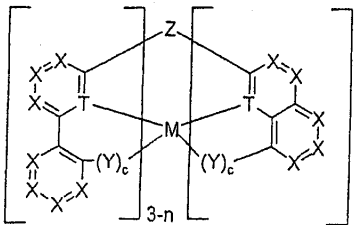
화합물 (31)



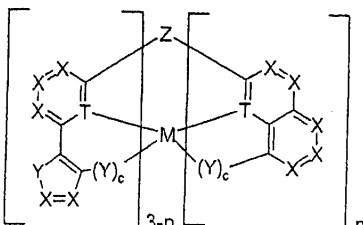
화합물 (32)



화합물 (33)

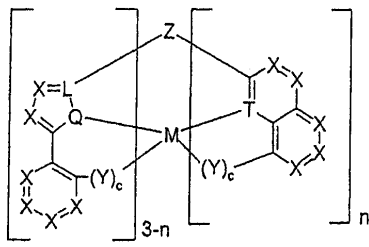


화합물 (34)

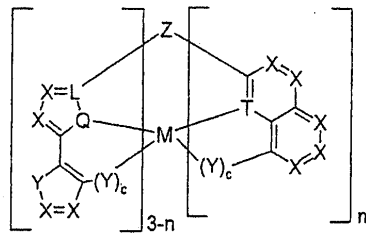


화합물 (35)

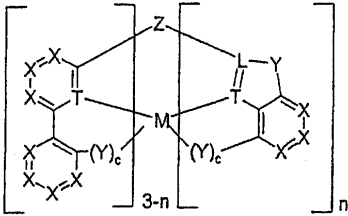
[0098]



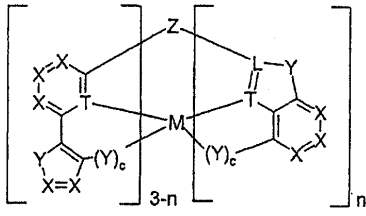
화합물 (36)



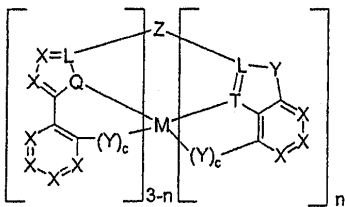
화합물 (37)



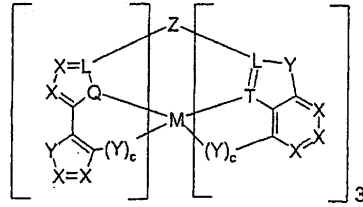
화합물 (38)



화합물 (39)



화합물 (40)



화합물 (41)

[0099]

[식 중, 기호 및 표시 M, L, Q, T, X, Y, Z, R, R¹, c 및 n은 각각 도식 1 및 2에 정의된 것과 같다].

[0100]

기호 M = Al, Ga, In, Sc, Y, La, Ru, Os, Rh, Ir, Au인 본 발명의 화합물들 (1) 내지 (41)이 바람직하다.

[0101]

기호 L = C, N인 본 발명의 화합물들 (1) 내지 (41)이 또한 바람직하다.

[0102]

기호 Q = O, S인 본 발명의 화합물들 (1) 내지 (41)이 또한 바람직하다.

[0103]

기호 T = N인 본 발명의 화합물들 (1) 내지 (41)이 또한 바람직하다.

[0104]

기호 X = CR, N인 본 발명의 화합물들 (1) 내지 (41)이 또한 바람직하다.

[0105]

기호 Z = B, CH, CR¹, COR¹, CF, CCl, CBr, SIR, N, P, PO, RC(CR₂)₃, RC(CR₂CR₂)₃, cis,cis-1,3,5-시클로헥실, RSi(CR₂)₃, RSi(CR₂CR₂)₃, N(CR₂)₃, N(C=O)₃, N(CR₂CR₂)₃인 본 발명의 화합물들 (1) 내지 (41)이 또한 바람직하다.

[0106]

기호 Y = O, S인 본 발명의 화합물들 (1) 내지 (41)이 또한 바람직하다.

[0107]

기호 R이 H, F, Cl, Br, I, CN, 1 내지 6 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지 또는 고리 알킬 또는 알콕시기, 또는 3 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴기를 나타내고 하나 이상의 비방향족 R 라디칼에 의해 치환될 수 있으며, 이 중 복수의 치환체 R은 동일한 고리 상 또는 두 개의 상이한 고리 상 중 하나에서, 함께 추가의 단수 또는 복수 고리, 지방 또는 방향 고리계를 차례로 형성할 수 있는 본 발명의 화합물들 (1) 내지 (41)이 또한 바람직하다.

[0108]

화합물 (1) 내지 (41)에서 R 라디칼에 의해 고리계가 형성될 때, 이들은 바람직하게는 벤젠, 1- 또는 2-나프탈렌, 1-, 2- 또는 9-안트라센, 2-, 3- 또는 4-피리딘, 2-, 4- 또는 5-피리미딘, 2-피라진, 3- 또는 4-피리다진, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7- 또는 8-퀴놀린, 2- 또는 3-피롤, 3-, 4- 또는 5-피라졸, 2-, 4- 또는 5-이미다졸, 2- 또는 3-티오펜, 2- 또는 3-셀레노펜, 2- 또는 3-푸란, 2-(1,3,4-옥사디아졸), 인돌 또는 카르바졸이다.

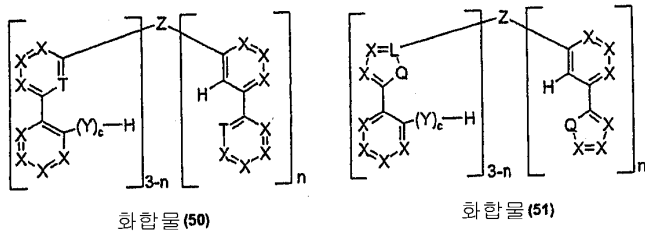
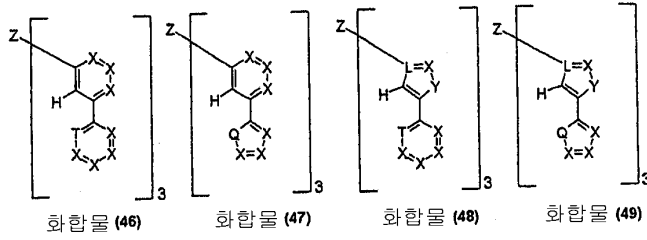
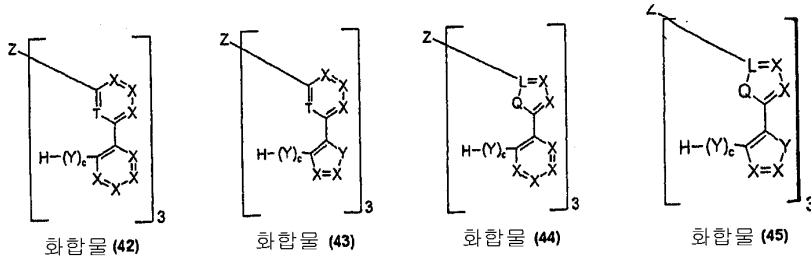
[0109]

본 발명은 도식 5에 기재된 화합물 (42) 내지 (82)에 따른 폴리포달 리간드를 또한 제공한다:

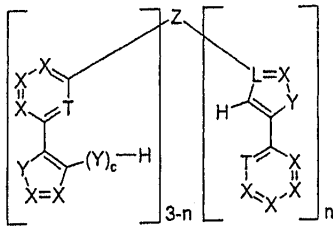
[0110]

[0111]

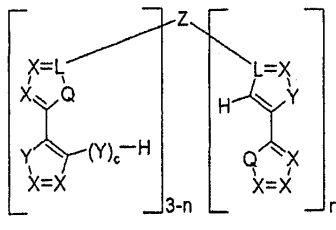
도식 5:



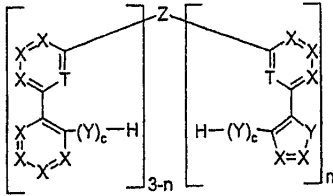
[0112]



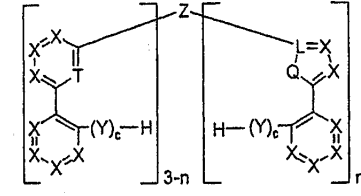
화합물 (52)



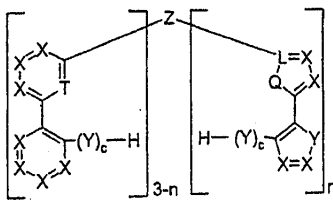
화합물 (53)



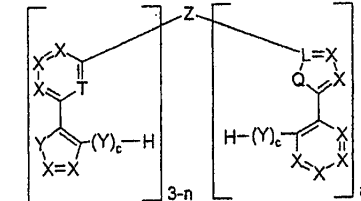
화합물 (54)



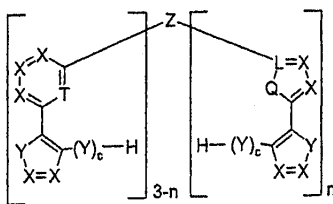
화합물 (55)



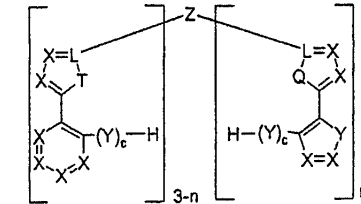
화합물 (56)



화합물 (57)

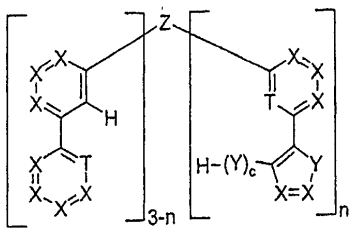


화합물 (58)

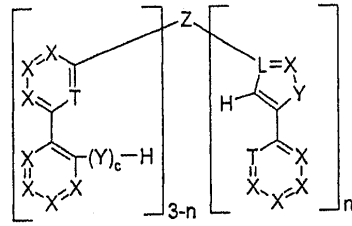


화합물 (59)

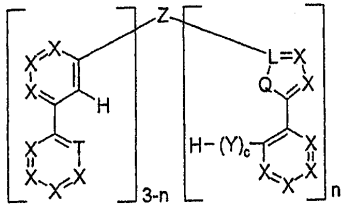
[0113]



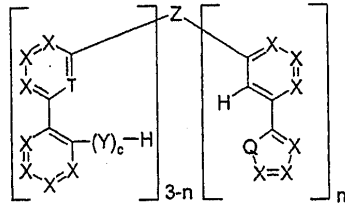
화합물 (60)



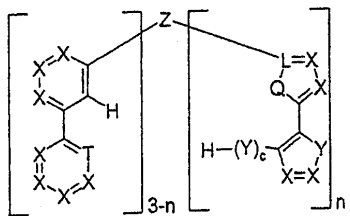
화합물 (61)



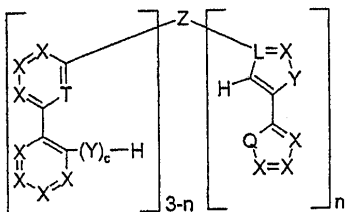
화합물 (62)



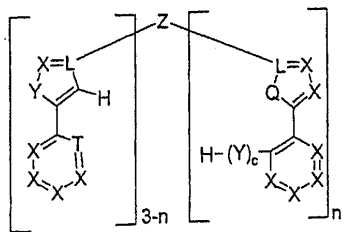
화합물 (63)



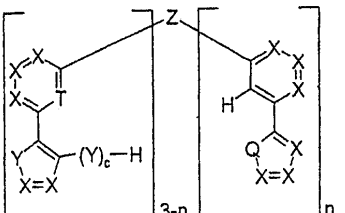
화합물 (64)



화합물 (65)

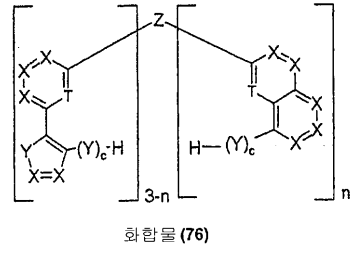
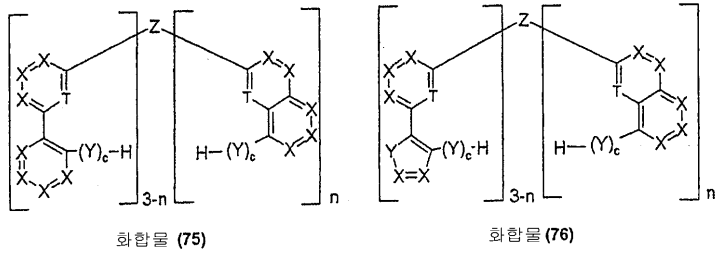
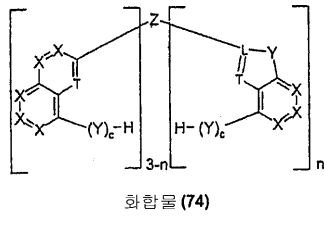
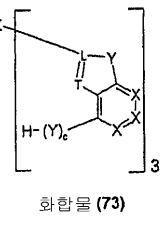
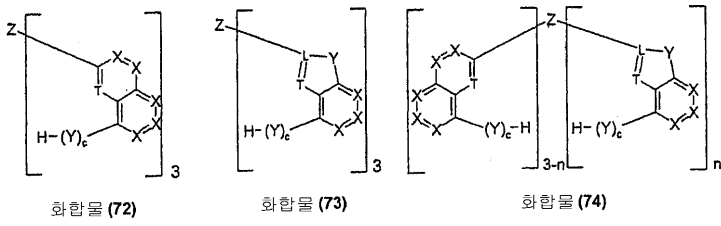
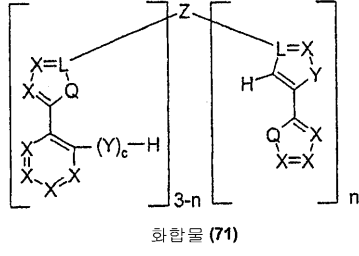
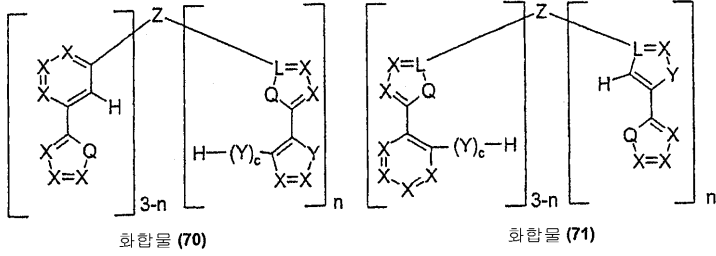
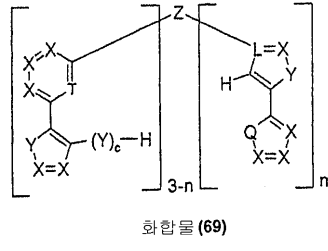
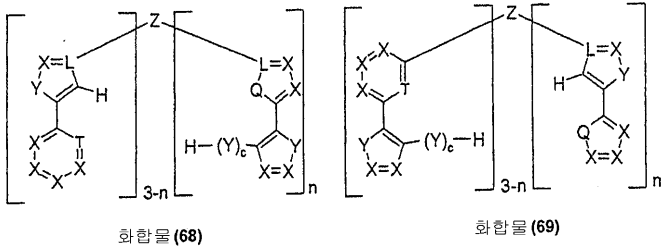


화합물 (66)

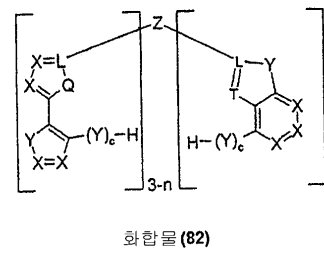
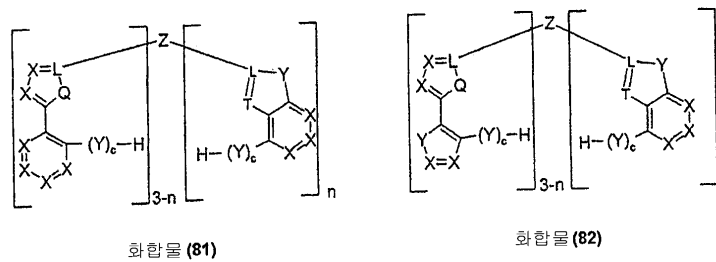
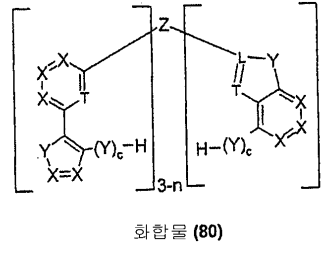
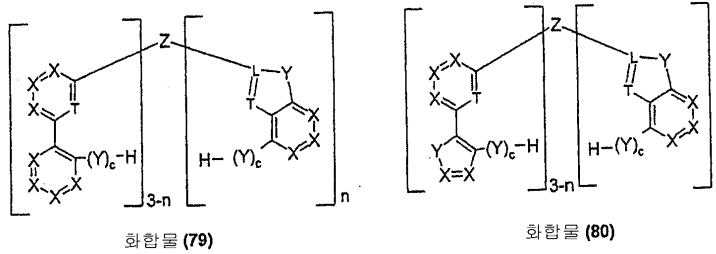
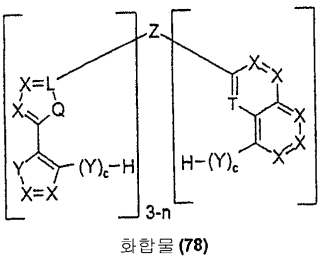
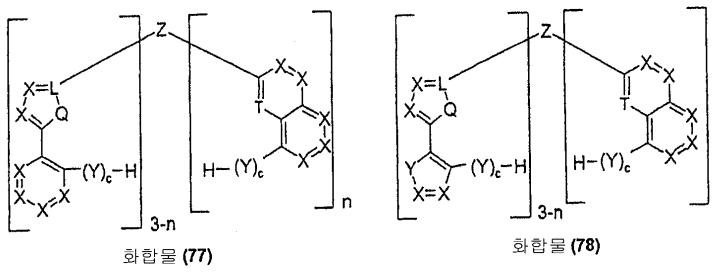


화합물 (67)

[0114]



[0115]

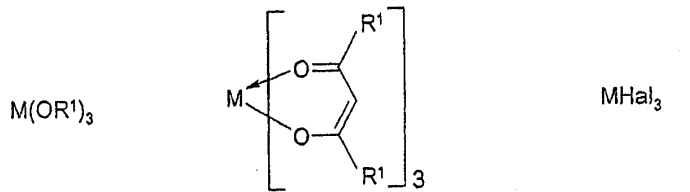


[0116]

[0117] [식 중, 기호 및 표시 Q, L, T, X, Y, Z, R, R¹, c 및 n은 각각 도식 1 및 2에 정의된 것과 같다].

[0118] 본 발명의 화합물 (1) 내지 (41)은 본원에서 다양한 방법에 의해 제조될 수 있으나, 하기에 기재된 방법이 특히 적합한 것으로 발견되었다.

[0119] 따라서 본 발명은 추가로 화합물 (42) 내지 (82)의 폴리포달 리간드를 식 (83)의 금속 알콕시드, 식 (84)의 금속 케토케토네이트 및 식 (85)의 금속 할라이드와 반응시킴으로써 화합물 (1) 내지 (41)을 제조하는 방법을 제공한다,



화합물 (83)

화합물 (84)

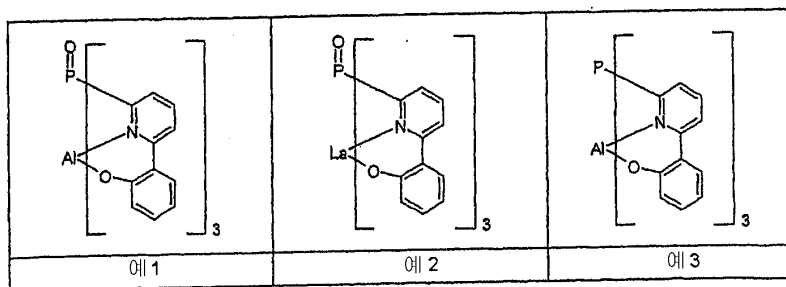
화합물 (85)

[0120]

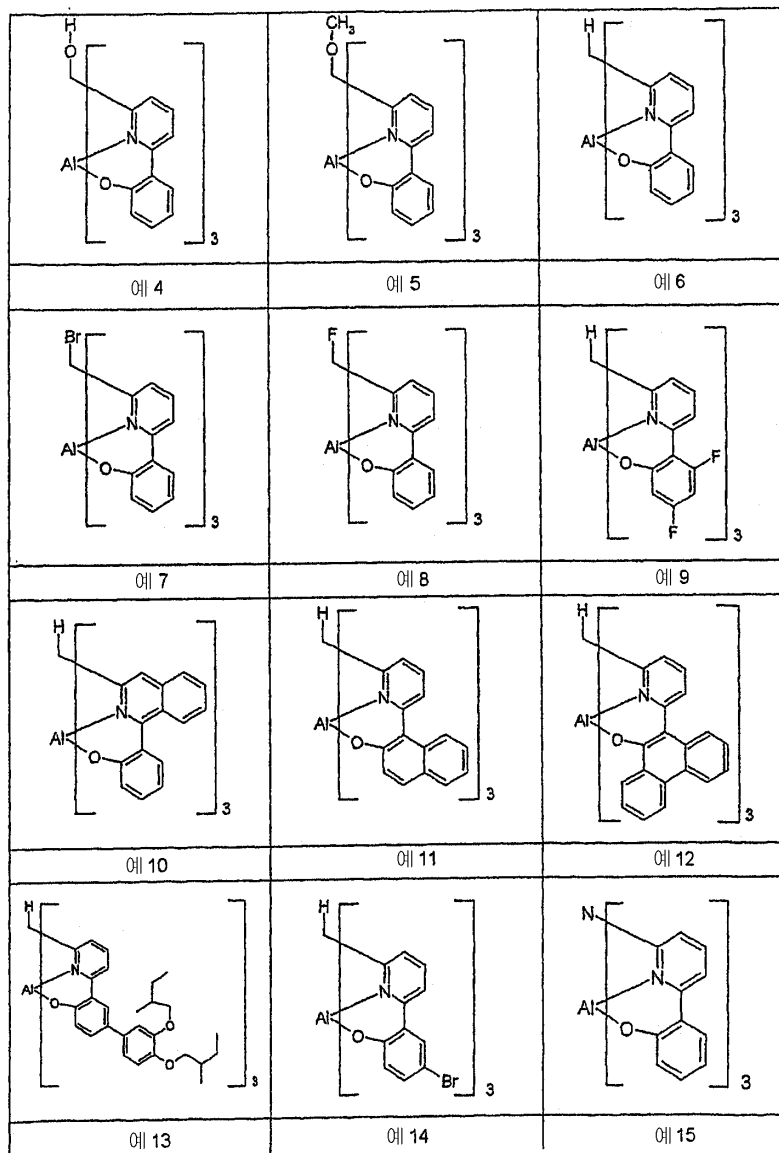
[0121] [식 중, 기호 R¹은 도식 1에 정의된 것과 같고 Hal = F, Cl, Br, I이다].

[0122] 상기 방법은 상기 착물을 ¹H NMR 또는 HPLC에 의해 고순도, 바람직하게는 99 % 초과 순도로 쉽게 수득하도록 한다.

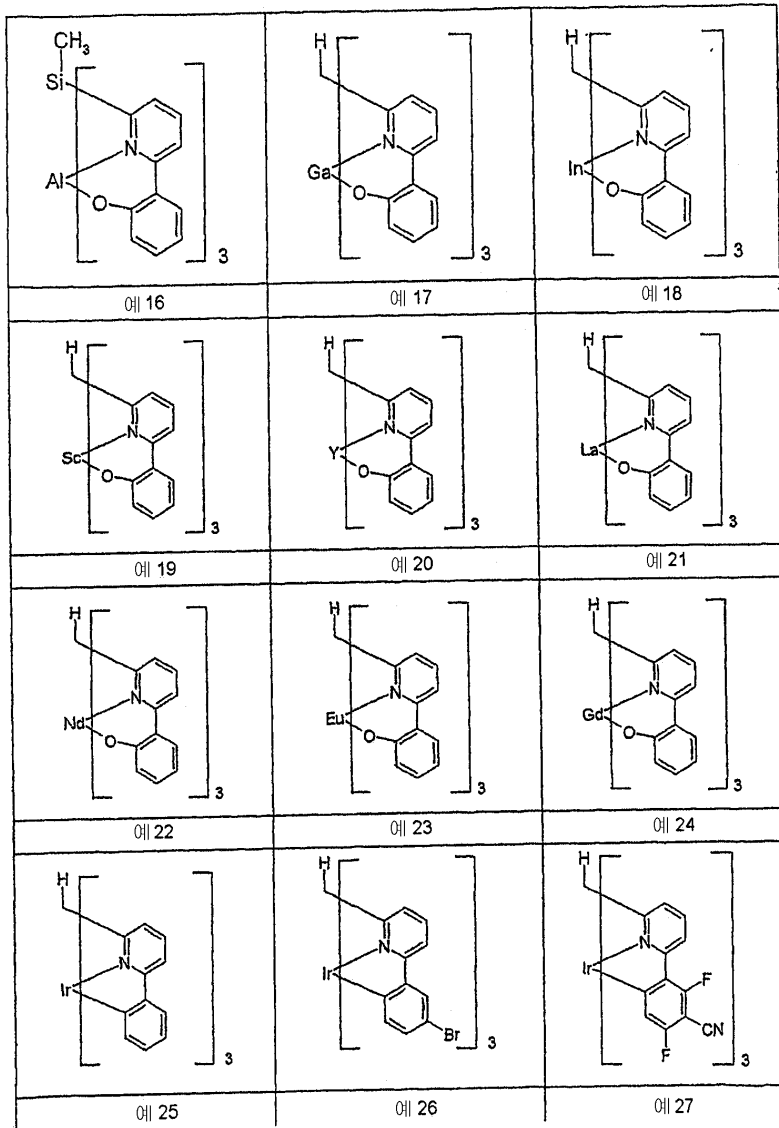
[0123] 본원에 예시된 합성 방법은 하기에 나타낸 화합물 (1) 내지 (41)의 예들을 포함한 예들이 제조되도록 한다.



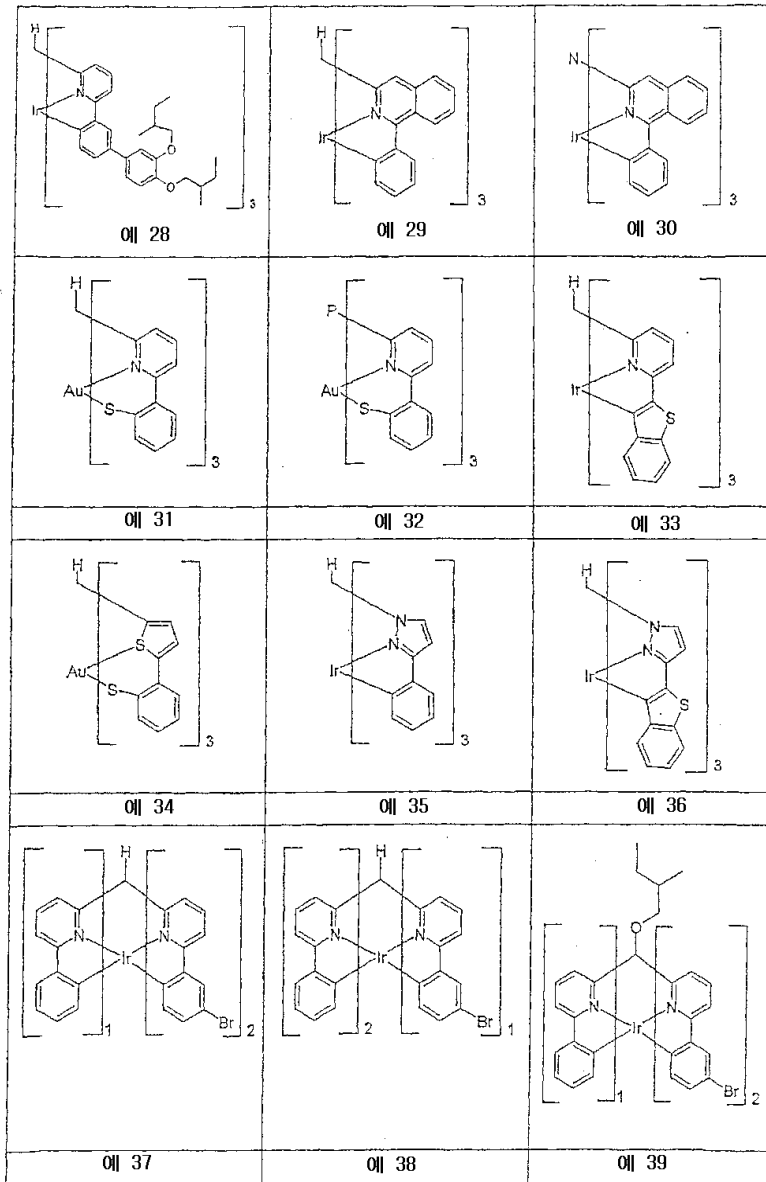
[0124]



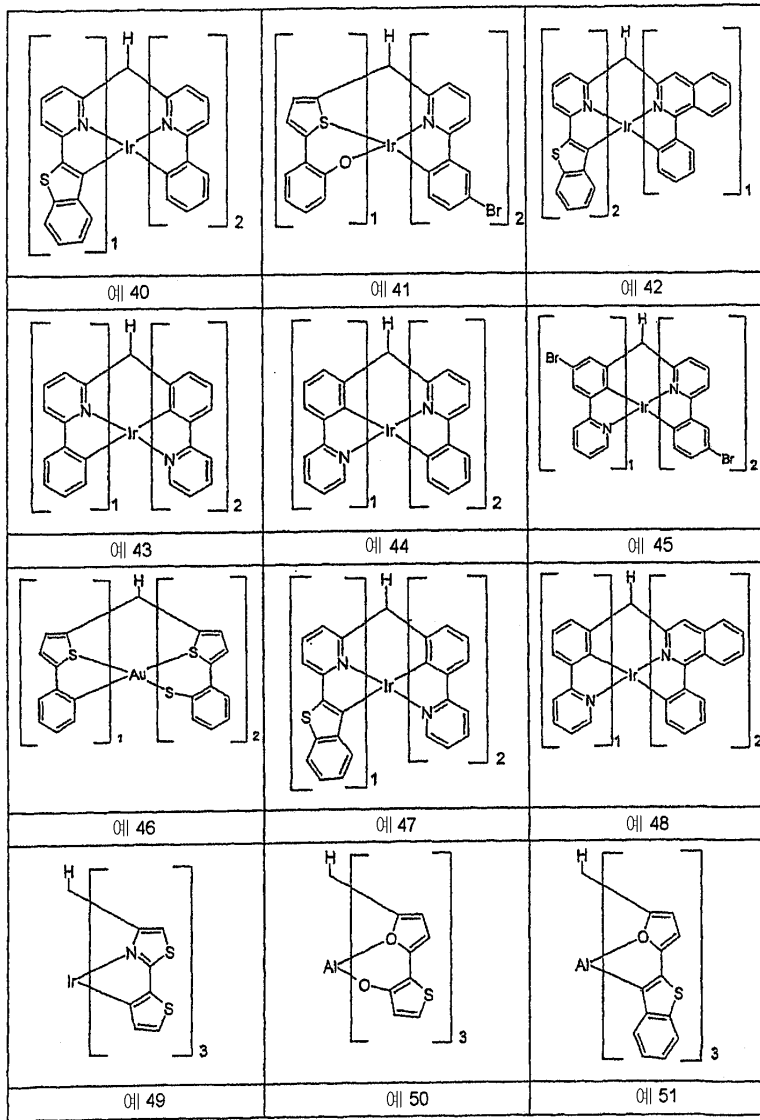
[0125]



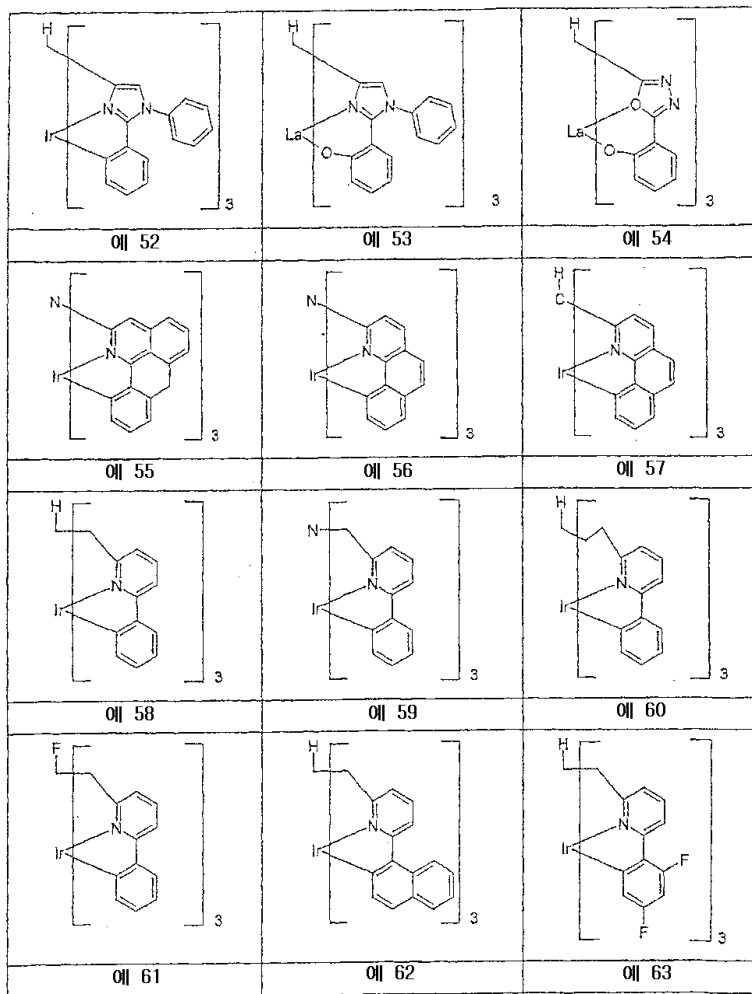
[0126]



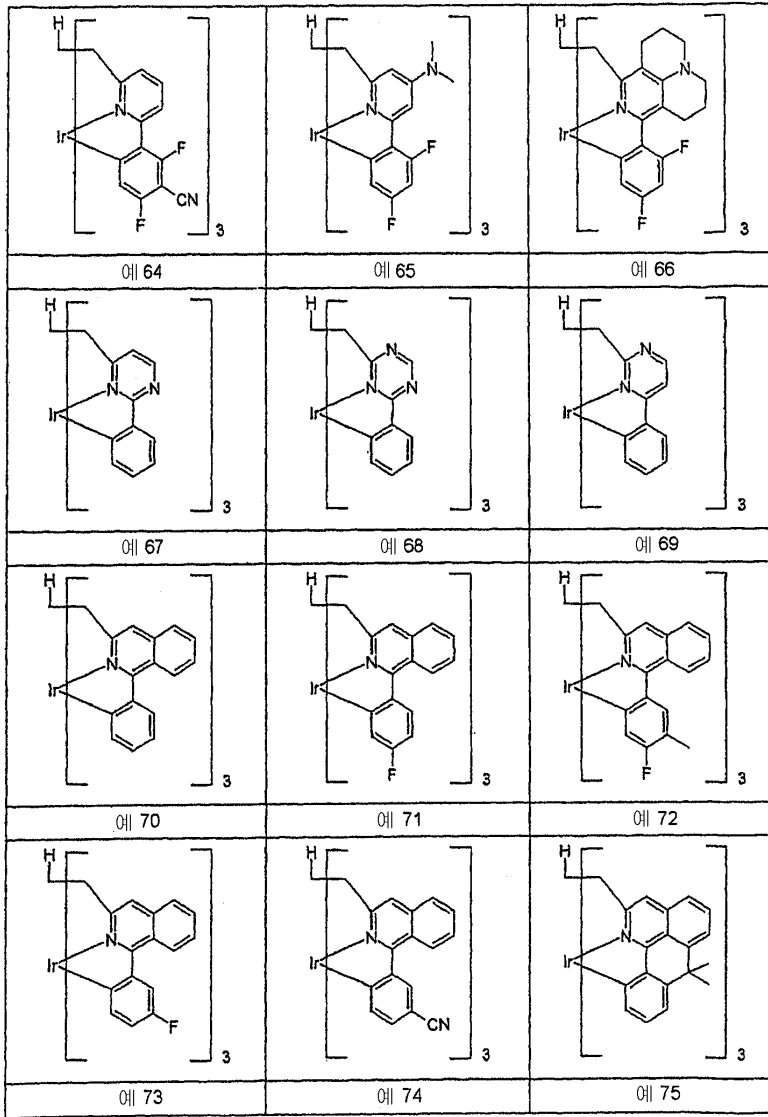
[0127]



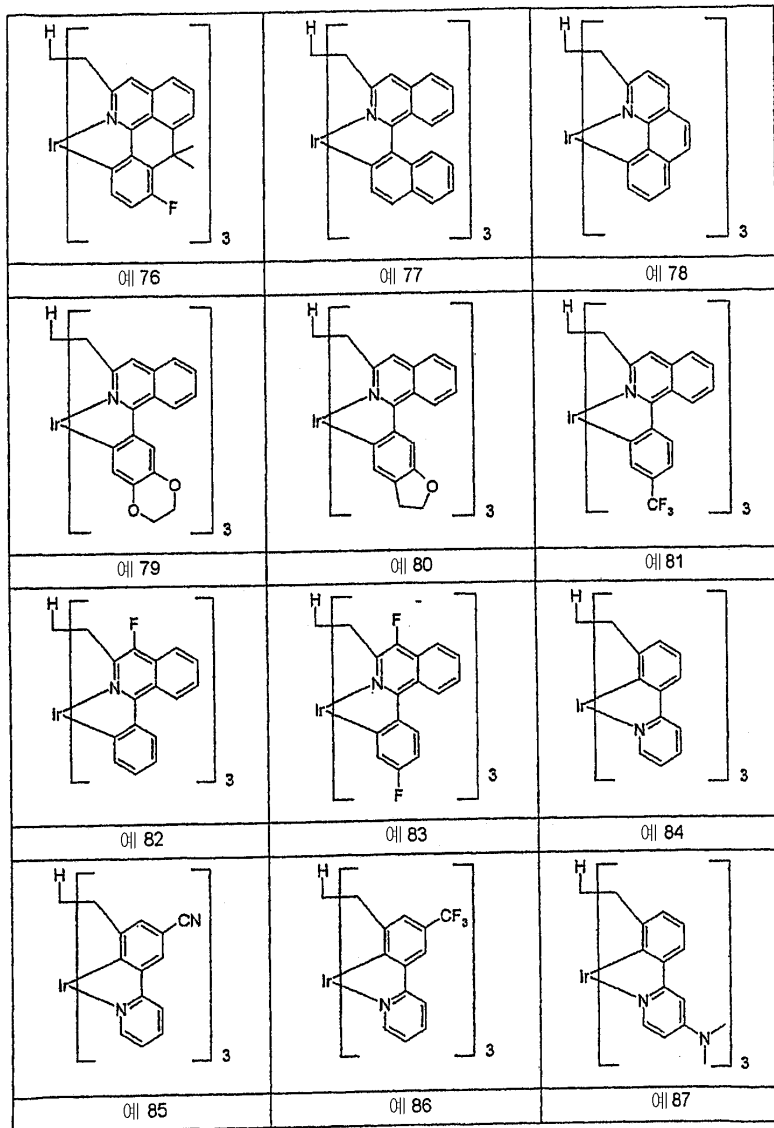
[0128]



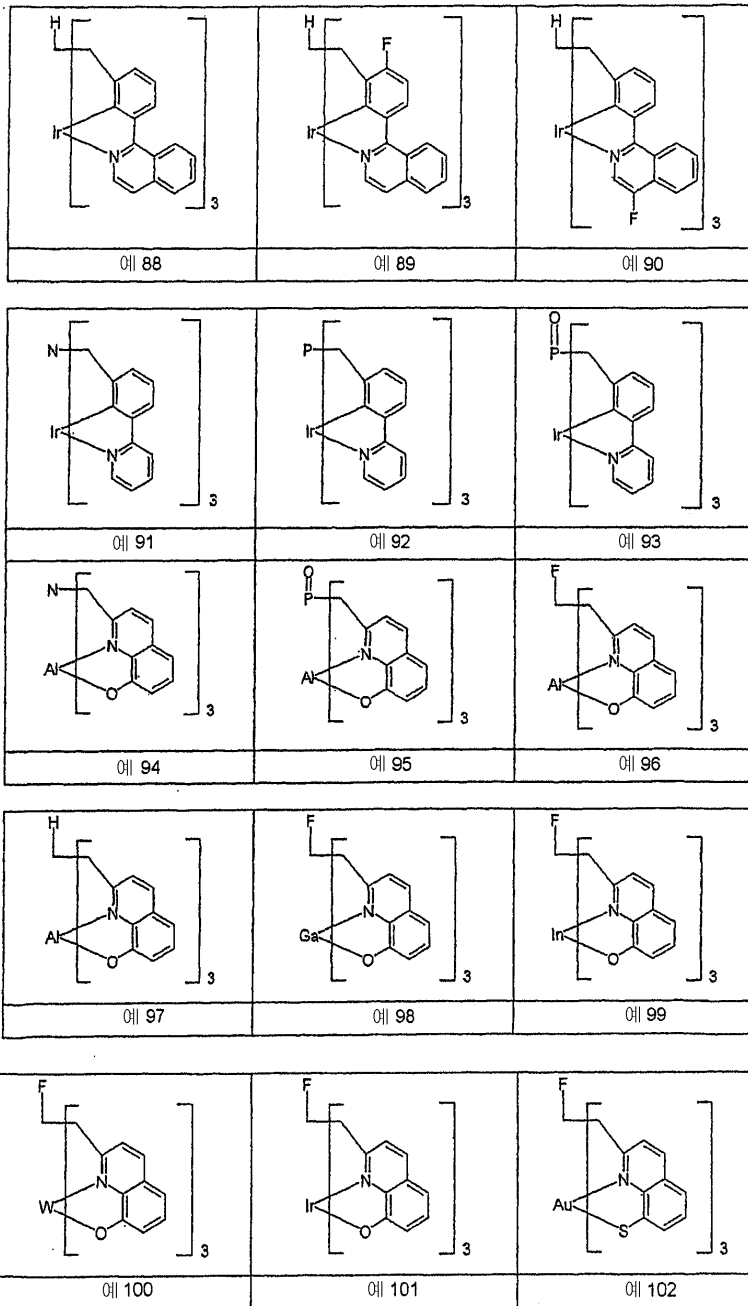
[0129]



[0130]



[0131]



[0132]

[0133]

상기 기술된 본 발명의 화합물들, 예를 들어 예 7, 14, 26, 27, 37, 38, 39 및 41에 기재된 화합물들이 예를 들어, 상응하는 접합, 반접합 그렇지 않으면 비접합 중합체를 획득하기 위한 공단량체, 그렇지 않으면 덴드리머(dendrimer)의 중심, 예를 들어 예 14 및 26에 기재된 화합물들로서 사용됨을 발견할 수 있다. 적절한 중합은 바람직하게는 할로젠 기능을 통해 달성된다.

[0134]

예를 들어, 이들은 특히 가용성 폴리플루오렌(예를 들어 EP-A-842208 또는 WO 00/22026에 기재), 폴리-스피로-비플루오렌(예를 들어 EP-A-707020 또는 EP-A-894107에 기재), 폴리-파라-페닐렌(예를 들어 WO 92/18552에 기재), 폴리카르바졸(예를 들어 출원 DE 10304819.7 및 DE 10328627.6에 기재), 폴리비닐카르바졸 그렇지 않으면 폴리티오펜(예를 들어 EP-A-1028136에 기재), 그렇지 않으면 복수의 상기 단위들의 공중합체로 중합될 수 있다.

[0135]

따라서 본 발명은 추가로 식 (1) 내지 (41)의 화합물 하나 이상을 포함하는 접합, 반접합 및 비접합된 중합체 또는 덴드리머를 제공하고, 이 중 하나 이상의 상기 정의된 R 라디칼은 상기 중합체 또는 덴드리머에 결합한다.

[0136]

게다가, 본 발명의 금속 착물들은 물론 또한 추가로 기능화될 수 있고 따라서 확장된 금속 착물로 전환될 수 있다. 본원에서, SUZUKI에 따른 아릴붕산 또는 HARTWIG-BUCHWALD에 따른 아민을 사용한 기능화를 예로 들 수 있다.

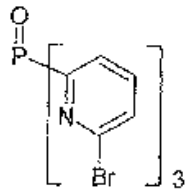
- [0137] 상기 기술된 본 발명의 화합물, 중합체, 덴드리머, 또는, 상기 기술된 바와 같이, 추가로 기능화된 화합물은 전자 부품, 예를 들어 유기 광방출 다이오드(OLED), 유기 집적 회로(O-IC), 유기 마당 효과 트랜지스터(OFET), 유기 박막 트랜지스터(OTFT), 유기 태양 전지(O-SC) 또는 유기 레이저 다이오드(O-laser)에 활성 성분으로서 사용됨이 발견된다.
- [0138] 활성 성분들은, 예를 들어, 전하 주입 또는 전하 수송 물질, 전하 차단 물질 및 방출 물질이다. 이러한 기능에 있어, 본 발명의 화합물들은 이미 상기에 예시된 것처럼 그리고 이하 더욱 자세히 추가로 설명될 것처럼 특히 양호한 특성들을 나타낸다.
- [0139] 따라서 본 발명은 추가로 전자 부품에서의 이러한 화합물들의 용도를 제공한다.
- [0140] 본 발명은 추가로 전자 부품들, 예를 들어 유기 집적 회로(O-IC), 유기 마당 효과 트랜지스터(OFET), 유기 박막 트랜지스터(OTFT), 유기 태양 전지(O-SC) 또는 유기 레이저 다이오드(O-laser), 특히 하나 이상의 본 발명의 화합물, 중합체 또는 덴드리머를 포함하는 유기 광방출 다이오드(OLED)를 제공한다.
- [0141] 본 발명은 전하 수송 및 정공 차단 물질에 이은 실시예에 의해 자세히 예시되지만, 발명을 이들에 한정할 의도는 전혀 없다. 당해 기술의 숙련자들은, 발명적 활동 없이도, 본 명세서에 언급된 것들을 사용하여 추가의 본 발명 작물, 예를 들어 방출 물질을 제조할 수 있거나, 또는 본 발명에 따른 방법을 사용할 수 있다.

실시예

[0142] 헥사포달(hexapodal) 리간드를 갖는 동종리간드 알루미늄, 철 및 탄탈 킬레이트 착물의 합성:

[0143] 다른 언급이 없는 한, 이하의 합성은 건조 용매 중 보호 기체 분위기 하에서 수행되었다. 반응물은 ALDRICH 또는 ABCR로부터 구입하였다 [2-메톡시벤젠붕산, 2-브로모-4-플루오로페놀, 2-브로모-5-플루오로페놀, 불화칼륨(분사건조됨), 삼불화 디에틸아미노황(DAST), 트리-tert-부틸포스핀, 팔라듐(II) 아세테이트, 염산 피리디늄, 알루미늄 트리이소프로폭시드, 2-메톡시에탄올 중 트리스(2-메톡시에탄올라토)탄탈(III)의 10 중량% 용액]. 트리스(2-브로모-6-피리딜)포스핀 및 트리스(2-브로모-6-피리딜)메탄올은 WO 98/22148에 기재된 대로 제조하였다.

[0144] **실시예 1:** 트리스(2-브로모-6-피리딜)포스핀 옥시드



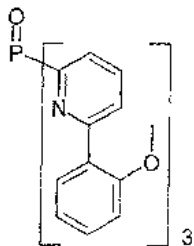
[0145]

[0146] 끓을 때까지 가열된 500 ml의 클로로포름 중 50.2 g(100.0 mmol)의 트리스(2-브로모-6-피리딜)포스핀의 현탁액을 11 ml의 35 중량% H₂O₂ 및 50 ml의 물의 혼합액과 격렬하게 교반하면서 적가 혼합하여, 투명한 용액을 산출하였다. 5 시간 동안 환류하 교반한 후, 상기 용액을 실온까지 냉각시켰다. 상기 용액을 500 ml의 물로 세정하고, 유기상을 제거하고 감압 하에서 50 ml까지 농축시켰다. 2 시간 동안 방치한 후, 침전된 결정을 여과해내고, 100 ml의 n-헥산으로 세 번 세정한 다음 감압 하 70 °C에서 건조하였다. 99.0%의 순도에서 수율은 47.1 g(90.9%)였다.

[0147] ¹H NMR (CDCl₃): δ [ppm] = 8.14 (ddd, ³J_{HP} = 5.4 Hz, ³J_{HH} = 7.8 Hz, ⁴J_{HH} = 1.0 Hz, 3H, H-3), 7.69 (ddd, ⁴J_{HP} = 4.6 Hz, ³J_{HH} = 7.9 Hz, ³J_{HH} = 7.9 Hz, 3H, H-4), 7.61 (ddd, ⁵J_{HP} = 2.1 Hz, ³J_{HH} = 7.9 Hz, ⁴J_{HH} = 1.0 Hz, 3H, H-5).

[0148] ³¹P{¹H} NMR (CDCl₃): δ [ppm] = 11.8 (s).

[0149] **실시예 2:** 트리스(6-(2-메톡시페닐)-2-피리딜)포스핀 옥시드



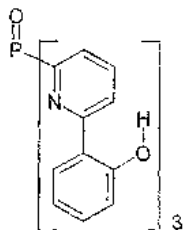
[0150]

[0151] 750 ml의 무수 THF 중 38.8 g(75.0 mmol)의 트리스(2-브로모-6-피리딜)포스핀 옥시드, 51.3 g(337.5 mmol)의 2-메톡시벤젠부산 및 43.1 g(742.5 mmol)의 불화칼륨의 효과적으로 교반된 현탁액을 593 mg(2.93 mmol)의 트리-tert-부틸포스핀, 그 다음 505 mg(2.25 mmol)의 팔라듐(II) 아세테이트와 혼합하고, 이어서 16 시간 동안 환류 하 가열하였다. 냉각 후, 상기 반응 혼합물을 1500 ml의 에틸 아세테이트 및 1000 ml의 물과 혼합하였다. 유기상을 제거하고, 500 ml의 물로 두 번, 500 ml의 포화 염화나트륨 용액으로 한 번 세정하고, 이어서 황산 마그네슘으로 건조시켰다. 상기 유기상을 감압 하 농축시킨 후(최종 압력 1 mbar, 온도 90 °C), 44.3 g(98.5 %)의 담황색 고점성 오일이 잔류하였고, 이것은 정제 없이 추가로 반응하였다.

[0152] ¹H NMR (CDCl₃): δ [ppm] = 8.14 (ddd, 3H), 8.02 (ddd, 3H), 7.85 (dd, 3H), 7.76 (ddd, 3H), 7.30 (ddd, 3H), 6.94 (dd, 3H), 6.87 (ddd, 3H), 3.10 (s, 9H CH₃).

[0153] ³¹P{¹H} NMR (CDCl₃): δ [ppm] = 14.0 (s).

[0154] **실시예 3:** 트리스(6-(2-히드록시페닐)-2-피리딜)포스핀 옥시드, (PPL-01)



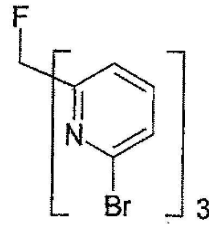
[0155]

[0156] 30.0 g(50 mmol)의 트리스(6-(2-메톡시페닐)-2-피리딜)포스핀 옥시드 및 104.0 g(900 mmol)의 염산 피리디늄의 혼합물을 130 °C에서 12 시간 동안 교반하였다. 상기 용융된 것을 80 °C까지 냉각시킨 후, 300 ml의 물, 그 다음 100 ml의 물 중 44.9 g(800 mmol)의 수산화칼륨 용액과 혼합하였다. 수상을 500 ml의 디클로로메탄으로 세 번 추출하였다. 합쳐진 유기상을 500 ml의 물로 세번 세정하였다. 상기 유기상을 황산 마그네슘으로 건조시키고 디클로로메탄을 제거한 후, 오일상 잔류물을 100 ml의 메틸 tert-부틸 에테르 내에 흡수시키고 100 ml의 n-헵탄과 혼합하였다. 12 시간 동안 방치한 후, 무색의 결정을 흡입과 함께 여과해내고 메틸 tert-부틸 에테르/n-헵탄으로부터 재결정하였다. 수율은 ¹H NMR에 의해 99.0 % 초과 순도에서 10.9 g(39.1 %)였다.

[0157] ¹H NMR (CDCl₃): δ [ppm] = 14.33 (s, 3H, OH), 8.45 (m, 3H), 8.13 (m, 3H), 7.88 (m, 3H), 7.61 (m, 3H), 7.23 (m, 3H), 7.01 (m, 3H), 6.90 (m, 3H).

[0158] ³¹P{¹H} NMR (CDCl₃): δ [ppm] = 10.3(s).

[0159] **실시예 4:** 트리스(2-브로모-6-피리딜)플루오로메탄



[0160]

[0161]

750 ml의 디클로로메탄 중 50.0 g(100 mmol)의 트리스(2-브로모-6-피리딜)메탄올의 용액을 47.3 ml(400 mmol)의 삼불화 디에틸아미노황과 잘 교반하면서 적가 혼합하였다. 이어서, 상기 반응 혼합물을 30 분 동안 환류하 가열하고, 그 다음 5 °C까지 냉각시키고, 300 ml의 물, 그 다음 600 ml의 물 중 64.0 g(1600 mmol)의 수산화 나트륨의 용액(매우 발열성임!!!)과 잘 교반하면서(매우 발열성임!!!) 혼합하였다. 유기상을 제거하고, 수상을 200 ml의 디클로로메탄으로 두 번 세정하고, 합쳐진 유기상을 염화칼슘으로 건조하고 이어서 디클로로메탄을 제거하였다. 잔류하는 적갈색 결정 슬러리를 100 ml의 메탄올에 흡수시키고 여과해냈다. 메탄올로 세정한 후, 무색 내지 베이지색의 결정을 감압 하에서 건조시켰다. 수율은 ¹H NMR에 의해 99.0 % 초과 순도에서 47.4 g(91.3 %)였다.

[0162]

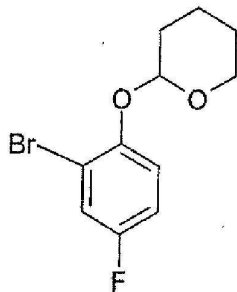
¹H NMR (CDCl₃): δ [ppm] = 7.58 (ddd, ³J_{HH} = 7.7 Hz, ³J_{HH} = 7.7 Hz, ⁵J_{FH} = 0.7 Hz, 1H, H-4), 7.53 (dd, ³J_{HH} = 7.7 Hz, ⁴J_{HH} = 0.7 Hz, 1H, H-3), 7.45 (ddd, ³J_{HH} = 7.7 Hz, ⁴J_{HH} = 0.7 Hz, ⁴J_{FH} = 0.9 Hz, 1H, H-5).

[0163]

¹⁹F{¹H} NMR (CDCl₃): δ [ppm] = -146.2 (s).

[0164]

실시예 5: 2-브로모-4-플루오로-1-(테트라히드로피란-2-일옥시)벤젠



[0165]

[0166]

478.0 ml(5.24 mol)의 3,4-디히드로피란 및 750 ml의 디클로로메탄의 혼합물을 65.4 g(260 mmol)의 피리디늄 p-톨루엔설퍼네이트와 혼합하였다. 이어서, 500 ml의 디클로로메탄 중 500.0 g(2.62 mmol)의 2-브로모-4-플루오로페놀의 용액을 적가하였다. 24 시간동안 교반한 후, 상기 반응 혼합물을 500 ml의 물 중 50 g의 탄산 칼륨의 용액, 그다음 500 ml의 포화 염화나트륨 용액과 혼합하였다. 유기상을 제거하고, 탄산 칼륨으로 건조하고, 용매 및 탄산 칼륨을 제거한 후, 비그뤼스 컬럼(Vigreux column)(40 cm)을 사용하여 분별 증류(약 1 mbar, 최고 온도 79 내지 82 °C)하였다. 생성물을 무색, 저점도 오일로서 수득하였다. 수율은 ¹H NMR에 의해 98.0 % 초과 순도에서 520.5 g(72.2 %)였다.

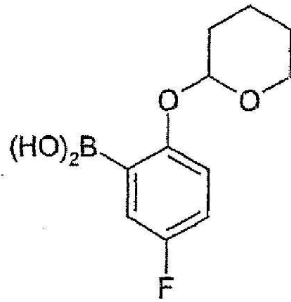
[0167]

¹H NMR (CDCl₃): δ [ppm] = 7.27 (dd, ³J_{FH} = 8.0 Hz, ⁴J_{HH} = 3.0 Hz, 1H, H-3), 7.10 (dd, ³J_{HH} = 9.7 Hz, ⁴J_{FH} = 5.0 Hz, 1H, H-6), 6.93 (ddd, ³J_{HH} = 9.7 Hz, ³J_{FH} = 8.0 Hz, ⁴J_{HH} = 3.2 Hz, 1H, H-5), 5.39 (m, 1H, CH), 3.88 (m, 1H, CH₂O), 3.59 (m, 1H, CH₂O), 2.12-1.53 (m, 6H, CH₂).

[0168]

¹⁹F{¹H} NMR (CDCl₃): δ [ppm] = -121.1 (s).

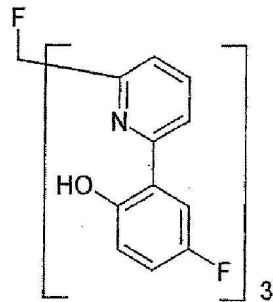
[0169] 실시예 6: 5-플루오로-2-(테트라히드로피란-2-일옥시)벤젠붕산



[0170]

[0171] 48.6 g(2.00 mol)의 마그네슘 및 1250 ml의 THF 중 510 g(1.85 mol)의 2-브로모-4-플루오로-1-(테트라히드로피란-2-일옥시)벤젠을 사용하여 그리냐드(Grignard) 시약을 제조하였다. 상기 그리냐드 시약을 500 ml의 THF 중 241.6 ml(2.00 mol)의 트리메틸 붕산염의 혼합액에 -78 °C에서 천천히 적가하였다. 적가가 완료되자마자, 상기 반응 혼합액을 실온까지 가온시키고 100 ml의 포화 탄산칼륨 용액 및 1000 ml의 물의 첨가에 의해 가수분해시켰다. 유기상을 포화 염화나트륨 용액(1 x 500 ml)로 세정하고, 이어서 건조 상태까지 농축시켰다. 수율은 428.2 g(1.78 mol)이었고, 상기 생성물은 다양한 비율의 붕소 무수물 및 붕산을 포함하는 왁스상의 고체로서 수득하였고, 이후 단계에서는 추가의 정제 없이 사용하였다.

[0172] 실시예 7: 트리스(6-(5-플루오로-2-히드록시페닐)-2-피리딜)플루오로메탄, (PPL-02)



[0173]

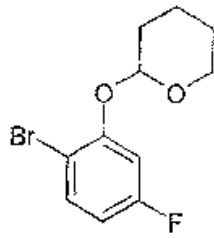
[0174] 실시예 2와 유사한 스즈키(Suzuki) 커플링의 방법, 이를 위해 51.9 g(100 mmol)의 트리스(2-브로모-6-피리딜)플루오로메탄(실시예 4), 108.0 g(450 mmol)의 5-플루오로-2-(테트라히드로피란-2-일옥시)벤젠붕산(실시예 6), 57.5 g(990 mmol)의 불화칼륨, 1.35 g(6 mmol)의 팔라듐(II) 아세테이트 및 1000 ml의 THF 중 1.8 ml(8 mmol)의 트리-tert-부틸포스핀을 사용하였다.

[0175] 환류 하 6 시간 후, 회전 증발기에서 상기 반응 혼합물로부터 THF를 제거하고, 슬러리상 잔류물을 1000 ml의 메탄올 중에 흡수시키고, 300 ml의 물 및 55 ml의 5N HCl의 혼합물과 혼합하고, 이어서 50 °C에서 추가의 3 시간 동안 교반하였다. 생성된 결정 슬러리를 흡입(P3)과 함께 여과해내고, 메탄올로 세정하고 건조하였다. 메탄올의 첨가와 함께 약간의 클로로포름으로부터의 재결정으로 ¹H NMR에 의해 99.0 % 초과 순도를 갖는 무색 결정의 형태로 53.2 g(89.0 %)의 생성물을 수득하였다.

[0176] ¹H NMR (CDCl₃): δ [ppm] = 12.34 (s, 3H, OH), 7.99 (dd, ³J_{HH} = 8.4 Hz, ³J_{HH} = 8.4 Hz, 3H, H-4-Py), 7.86 (d, ³J_{HH} = 8.4 Hz, 3H, H-5-Py), 7.79 (d, ³J_{HH} = 8.4 Hz, 3H, H-3-Py), 7.45 (dd, ³J_{HH} = 9.4 Hz, ⁴J_{FH} = 3.0 Hz, 3H, H-3), 6.95 (ddd, ³J_{HH} = 9.4 Hz, ³J_{FH} = 8.0 Hz, ⁴J_{HH} = 3.0 Hz, 3H, H-4), 6.76 (dd, ³J_{FH} = 9.0 Hz, ⁴J_{HH} = 3.0 Hz, 3H, H-6).

[0177] ¹⁹F{¹H} NMR (CDCl₃): δ [ppm] = -144.9 (s, 1F), -125.9 (s, 3F).

[0178] 실시예 8: 2-브로모-5-플루오로-1-(테트라히드로피란-2-일옥시)벤젠



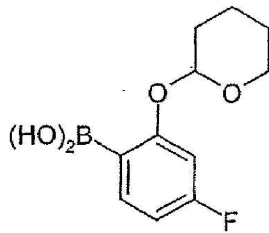
[0179]

[0180] 실시예 5와 유사한 방법. 478.0 ml(5.24 mol)의 3,4-디히드로피란, 65.4 g(260 mmol)의 피리디늄 p-톨루엔 술포네이트 및 500.0 g(2.62 mmol)의 2-브로모-5-플루오로페놀의 사용. 수율은 ^1H NMR에 의해 98.0 % 초과 의 순도에서 562.2 g(78.0 %)이었다.

[0181] ^1H NMR (CDCl_3): δ [ppm] = 7.45 (dd, $^3J_{\text{HH}} = 9.1$ Hz, $^4J_{\text{FH}} = 6.4$ Hz, 1H, H-3), 6.92 (dd, $^3J_{\text{FH}} = 10.7$ Hz, $^4J_{\text{FH}} = 2.7$ Hz, 1H, H-6), 6.60 (ddd, $^3J_{\text{HH}} = 9.1$ Hz, $^3J_{\text{FH}} = 8.7$ Hz, $^4J_{\text{HH}} = 2.7$ Hz, 1H, H-4), 5.46 (m, 1H, CH), 3.84 (m, 1H, CH_2O), 3.62 (m, 1H, CH_2O), 2.14-1.56 (m, 6H, CH_2).

[0182] $^{19}\text{F}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl_3): δ [ppm] = -112.7 (s).

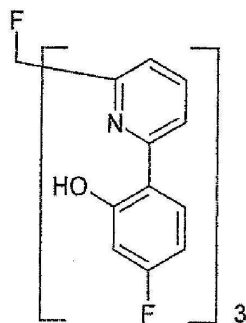
[0183] 실시예 9: 4-플루오로-2-(테트라히드로피란-2-일옥시)벤젠붕산



[0184]

[0185] 실시예 6과 유사한 방법. 48.6 g(2.00 mol)의 마그네슘, 510 g(1.85 mol)의 2-브로모-5-플루오로-1-(테트라히드로피란-2-일옥시)벤젠 및 241.6 ml(2.00 mol)의 붕산 트리메틸의 사용. 수율은 434.5 g(1.81 mol)이었고, 상기 생성물은 다양한 비율의 붕소 무수물 및 붕산을 포함하는 왁스상의 고체로서 수득하였고, 이후 단계에서는 추가의 정제 없이 사용되었다.

[0186] 실시예 10: 트리스(6-(4-플루오로-2-히드록시페닐)-2-피리딜)플루오로메탄, (PPL-03)



[0187]

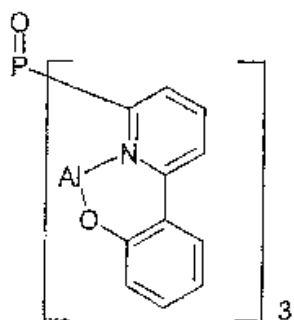
[0188] 실시예 7과 유사한 방법. 51.9 g(100 mmol)의 트리스(2-브로모-6-피리딜)플루오로메탄(실시예 4), 108.0 g(450 mmol)의 4-플루오로-2-(테트라히드로피란-2-일옥시)벤젠붕산(실시예 9), 57.5 g(990 mmol)의 불화칼륨, 1.35 g(6 mmol)의 팔라듐(II) 아세테이트 및 1.8 ml(8 mmol)의 트리-tert-부틸포스핀의 사용. ^1H NMR에 의

해 99.0 % 초과 순도를 갖는 무색 결정형으로 생성물의 수율은 56.9 g(95.5 %)였다.

[0189] ^1H NMR (CDCl_3): δ [ppm] = 13.01 (s, 3H, OH), 7.96 (dd, $^3J_{\text{HH}} = 8.2$ Hz, $^3J_{\text{HH}} = 8.2$ Hz, 3H, H-4-Py), 7.86 (d, $^3J_{\text{HH}} = 8.2$ Hz, 3H, H-5-Py), 7.75 (dd, $^3J_{\text{HH}} = 9.4$ Hz, $^4J_{\text{FH}} = 6.4$ Hz, 3H, H-6), 7.52 (d, $^3J_{\text{HH}} = 8.2$ Hz, 3H, H-3-Py), 6.59 (ddd, $^3J_{\text{HH}} = 9.4$ Hz, $^3J_{\text{FH}} = 8.0$ Hz, $^4J_{\text{HH}} = 2.7$ Hz, 3H, H-5), 6.51 (dd, $^3J_{\text{FH}} = 10.7$ Hz, $^4J_{\text{HH}} = 2.7$ Hz, 3H, H-3).

[0190] $^{19}\text{F}\{^1\text{H}\}$ NMR (CDCl_3): δ [ppm] = -144.7 (s, 1F), -108.6 (s, 3F).

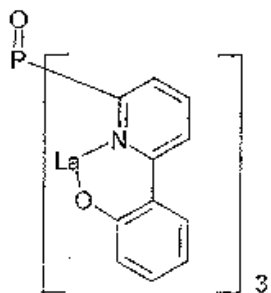
[0191] 실시예 11: 모노[트리스(6-(2-옥시페닐)-2-피리딜)포스핀옥시드]알루미늄(III); Al-PPL-01



[0192]

[0193] 100 ml의 톨루엔 중 5.58 g(10 mmol)의 트리스(6-(2-히드록시페닐)-2-피리딜)포스핀 옥시드(실시예 3)의 용액을 50 ml의 톨루엔 중 2.04 g(10 mmol)의 트리스(이소프로판올라토)알루미늄(III)의 용액과 80 °C에서 30 분에 걸쳐 혼합하였다. 상기 반응 혼합물을 추가의 3 시간 동안 환류하 가열하였다. 실온까지 냉각시킨 후, 흡입과 함께 무색의 침전물을 여과해내고, 톨루엔(1 x 25 ml)로 세정하고 건조시켰다. DMSO로부터의 반복된 재결정으로 HPLC에 의해 99.8 %의 순도로 5.03 g(86.5 %)의 착물을 수득하였다.

[0194] 실시예 12: 모노[트리스(6-(2-옥시페닐)-2-피리딜)포스핀옥시드]란탄(III); La-PPL-01

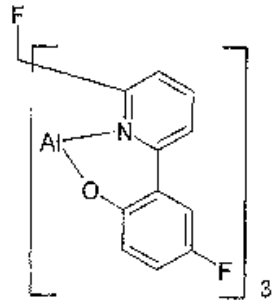


[0195]

[0196] 100 ml의 톨루엔 중 5.58 g(10 mmol)의 트리스(6-(2-히드록시페닐)-2-피리딜)포스핀 옥시드(실시예 3)의 용액을 2-메톡시에탄올 중 트리스(2-메톡시에탄올라토)란탄(III)의 10 중량% 용액 36.4 ml(10 mmol)와 80 °C에서 30 분에 걸쳐 혼합하였다. 상기 반응 혼합물을 추가의 3 시간 동안 환류 하 가열하였다. 실온까지 냉각 후, 무색 침전물을 흡입과 함께 여과해내고, 톨루엔(1 x 25ml)으로 세정하고 건조하였다. DMSO로부터의 반복된 재결정으로 HPLC에 의해 99.8 %의 순도로 5.68 g(81.7 %)의 착물을 수득하였다.

[0197] MS(FAB): $m/e = 693$.

[0198] 실시예 13: 모노[트리스(6-(5-플루오로-2-옥시페닐)-2-피리딜)플루오로메타나토]알루미늄(III); Al-PPL-02



[0199]

[0200]

200 ml의 THF 중 5.96 g(10 mmol)의 트리스(6-(5-플루오로-2-히드록시페닐)-2-피리딜)플루오로메탄(실시예 7)의 용액을 먼저 19.4 ml(240 mmol)의 피리딘과 혼합하고, 그다음 실온에서 30 분에 걸쳐 에탄올 중 0.5 N 염화 알루미늄의 용액 20 ml와 적가 혼합하였다. 상기 반응 혼합물을 추가 3 시간 동안 가열하여 환류시켰다. 실온까지 냉각 후, 무색의 침전물을 흡입과 함께 여과해내고, THF(3 x 50 ml) 및 에탄올(3 x 50 ml)로 세정한 다음 건조하였다. DMSO(200 ml)로부터의 반복된 재결정으로 ¹H NMR에 의해 99.9 %의 순도로 5.59 g(90.3 %)의 담황색 착물을 수득하였다.

[0201]

¹H NMR (DMSO-d₆): δ [ppm] = 8.23 (dd, ³J_{HH} = 8.0 Hz, ³J_{HF} = 8.0 Hz, 3H, H-4-Py), 8.17 (d, ³J_{HH} = 8.0 Hz, 3H, H-5-Py), 7.99 (dd, ³J_{HH} = 8.0 Hz, ⁴J_{FH} = 3.4 Hz, 3H, H-3-Py), 7.69 (dd, ³J_{HH} = 9.0 Hz, ⁴J_{FH} = 3.0 Hz, 3H, H-3), 7.03 (ddd, ³J_{HH} = 9.0 Hz, ³J_{FH} = 9.0 Hz, ⁴J_{HH} = 3.4 Hz, 3H, H-4), 6.19 (dd, ³J_{FH} = 9.0 Hz, ⁴J_{HH} = 3.4 Hz, 3H, H-6).

[0202]

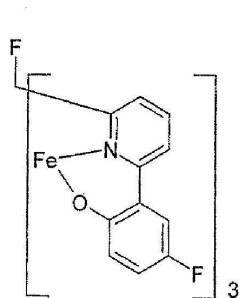
¹⁹F{¹H} NMR (DMSO-d₆): δ [ppm] = -177.5 (s, 1F), -128.6 (s, 3F).

[0203]

T_g: 178 °C.

[0204]

실시예 14: 모노[트리스(6-(5-플루오로-2-옥시페닐)-2-피리딜)플루오로메타나토]철(III); Fe-PPL2



[0205]

[0206]

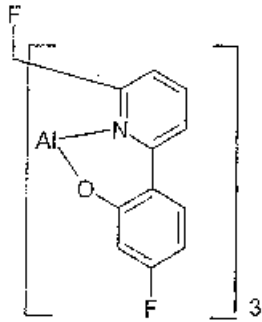
실시예 13과 유사한 방법. 5.96 g(10 mmol)의 트리스(6-(5-플루오로-2-히드록시페닐)-2-피리딜)플루오로메탄(실시예 10) 및 에탄올 중 0.5 N 염화철(III)·6H₂O 용액 20 ml를 사용. 상기 용액을 120 °C까지 냉각시킨 후 100 ml의 에탄올의 첨가와 함께 DMSO(200 ml)로부터의 반복된 재결정으로 5.39 g(83.1 %)의 흑색 착물을 수득하였다.

[0207]

MS(FAB): m/e=648.

[0208]

실시예 15: 모노[트리스(6-(4-플루오로-2-옥시페닐)-2-피리딜)플루오로메타나토]알루미늄(III); Al-PPL3



[0209]

[0210]

실시에 13과 유사한 방법. 5.96 g(10 mmol)의 트리스(6-(4-플루오로-2-히드록시페닐)-2-피리딜)플루오로메탄(실시에 10) 및 20 ml의 에탄올 중 0.5 N 염화알루미늄 용액 사용. DMSO(200 ml)로부터의 반복된 재결정으로 ¹H NMR에 의해 99.9 %의 순도로 5.32 g(86.0 %)의 담황색 착물을 수득하였다.

[0211]

¹H NMR (DMSO-d₆): δ [ppm] = 8.24 (dd, ³J_{HH} = 8.0 Hz, ³J_{HH} = 8.0 Hz, 3H, H-4-Py), 8.15 (d, ³J_{HH} = 8.0 Hz, 3H, H-5-Py), 7.97 (dd, ³J_{HH} = 8.0 Hz, ⁴J_{FH} = 3.4 Hz, 3H, H-3-Py), 7.92 (dd, ³J_{HH} = 9.0 Hz, ⁴J_{FH} = 7.0 Hz, 3H, H-6), 6.53 (ddd, ³J_{HH} = 8.7 Hz, ³J_{FH} = 8.7 Hz, ⁴J_{HH} = 2.7 Hz, 3H, H-5), 5.92 (dd, ³J_{FH} = 11.4 Hz, ⁴J_{HH} = 2.7 Hz, 3H, H-3).

[0212]

¹⁹F{¹H} NMR (DMSO-d₆): δ [ppm] = -178.4 (s, 1F), -109.5 (s, 3F).

[0213]

T_g: 197°C.

[0214]

가수분해 안정성에 대한 비교 실험

[0215]

실시에 16:

[0216]

비교 실험에서, 실시에 13에 따른 폴리포달 알루미늄 착물 모노[트리스(6-(5-플루오로-2-옥시페닐)-2-피리딜)플루오로메타나토]알루미늄(III)(Al-PPL-2)의 가수분해 안정성을 구조 유사물이지만 폴리포달 변형 트리스[(5-플루오로-2-옥시페닐)-2-피리딜라토]알루미늄(III)이 아닌, 일본 특허 공보 09176629 호에 OLED 물질로서 기재되어 있는 것과 비교하였다. 이를 위하여, 건조 DMSO-d₆ 중 두 착물의 10 mmolar 용액을 불활성 기체 대기 하에서 제조하였다. 상기 용액을 ¹H NMR 및 ¹⁹F NMR 스펙트로스코피를 사용하여 특성화하였다. 이어서, 상기 용액을 실온에서 1000 molar 양의 물과 혼합하고, 10 분 동안 방치한 후, ¹H NMR 및 ¹⁹F NMR 스펙트로스코피를 사용하여 다시 특성화하였다. 실시에 13에 따른 폴리포달 알루미늄 착물 모노[트리스(6-(5-플루오로-2-옥시페닐)-2-피리딜)플루오로메타나토]알루미늄(III)(Al-PPL-2)의 경우, NMR상에 어떤 변화도 발견되지 않았다. 반면에, 비폴리포달 트리스(5-플루오로-2-옥시페닐)-2-피리딜라토]알루미늄(III)의 경우, 비배위 리간드의 양성자 및 불소 신호의 출현으로 인지 가능한 상기 착물의 완전한 분해가 관찰되었다. 상기 기재된 가수분해 혼합물을 180 °C까지 5 시간 동안 가열한 후에도, 실시에 13에 따른 폴리포달 알루미늄 착물 Al-PPL-2의 분해의 어떠한 신호도 관찰되지 않았다. 상기 비교 실험은 본 발명의 폴리포달 착물들의 뛰어난 가수분해 안정성을 명백히 증명한다.

[0217]

본 발명의 화합물을 함유하는 유기 전기발광 소자의 제조 및 특성화

[0218]

OLED가 특수한 환경에 대한 개별 경우(예를 들어 효율 및 색상을 최적화한 층두께 변화)에 최적화된 통상적 방법에 의해 제조되었다. 본 발명의 전기발광 소자는, 예를 들어 DE 10330761.3 그렇지 않으면 DE 10261545.4에 기재된 대로 제조할 수 있다.

[0219]

실시에 17: 소자 구조

[0220]

하기의 실시예들은 둘다 인광 방출체 및 형광 방출체를 갖는, 다양한 OLED들의 결과를 나타내고, 여기에서 본 발명의 화합물들은 첫번째 경우로 정공 차단 물질로서 사용되었고, BCP 및 BA1q가 비교 물질로서 사용되었다(표 1 참조). 두번째 경우, 본 발명의 화합물은 전자 수송 물질로서 사용되었고, AlQ₃는 상응하는 비교 물질로

서 사용되었다(표 2 참조). 사용된 기본 구조, 물질들 및 층 두께(HBL은 별문제로 함)는 보다 나은 비교를 위해 동일하게 하였다.

[0221] 전술된 일반적 방법에 따라서, 하기 구조를 갖는 인광 OLED를 수득하였다:

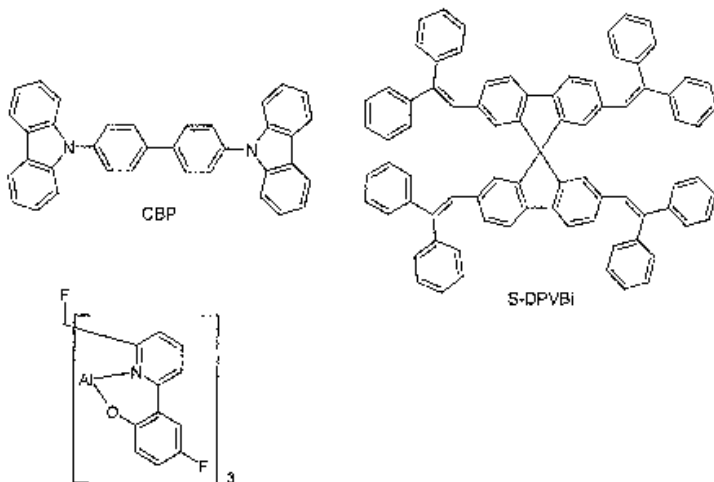
[0222] PEDOT(HIL)	60 nm(물로부터 회전 코팅됨; H.C. Starck로부터 Baytron P로서 구입; 폴리(3,4-에틸렌디옥시-2,5-티오펜))
NaphDATA(HTL)	20 nm(증기 증착에 의해 적용; SynTec으로부터 구입; 4,4',4"-트리스(N-1-나프틸-N-페닐아미노)트리페닐아민)
S-TAD(HTL)	20 nm(증기 증착에 의해 적용; WO 99/12888에 따라 제조; 2,2',7,7'-테트라키스(디페닐아미노)스피로비플루오렌)
(EML)	재료 및 층 두께: 표 1 또는 2 참조
(HBL)	존재한다면, 재료 및 층 두께: 표 1 참조
(ETL)	재료 및 층 두께: 표 1 또는 2 참조
Ba-AI(음극)	3 nm의 Ba, 그 위에 150 nm의 Al

[0223] 여전히 최적화하기 위하여 상기 OLED를 표준 방식으로 특성화하였고; 이를 위하여, 전자발광 스펙트럼들, 효율(cd/A로 측정), 전력 효율(1m/W로 측정)이 휘도 및 수명의 함수로서 결정되었다. 상기 수명은 10 mA/cm²의 일정 전류 밀도에서 OLED의 개시 휘도가 반까지 감소한 후의 시간으로서 정의된다.

[0224] 표 1은 10 % 정도로 CBP(4,4'-비스(카르바졸-9-일)비페닐) 중 도핑된 인광 방출체 Ir(PPY)₃를 사용하고 정공 차단 물질로서 실시예 13에 따른 착물 Al-PPL2를 사용한 본 발명의 OLED, 및 비교예(BAlq 사용)의 결과를 수집한 것이다. 표 1은 단지 정공 차단층 및 전자 수송층(조성 및 층 두께)을 나타낸다. 사용된 전자 수송물질은 SynTec으로부터 구입한 AlQ₃ (트리스(8-히드록시퀴놀리나토)알루미늄(III))이었다. 다른 층들은 전술된 구조에 부합한다.

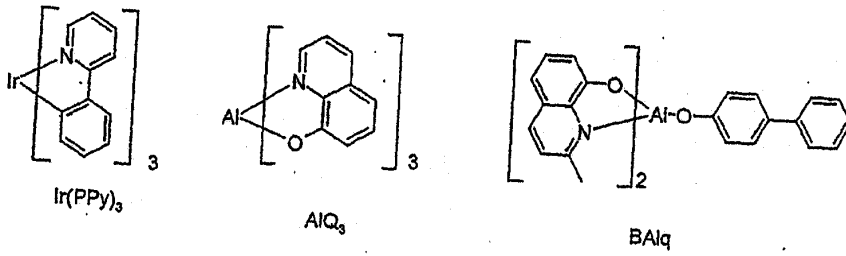
[0225] 표 2는 형광 방출체를 사용하고 실시예 13에 따른 착물 Al-PPL2를 전자 수송 물질로서 사용한 본 발명의 OLED 및 몇가지 비교예들(전자 수송 물질 AlQ₃ 사용)의 결과를 수집한 것이다. 표 2는 단지 방출층 및 전자 수송층(조성 및 층 두께)를 나타낸다. 다른 층들은 전술된 구조에 부합한다.

[0226] 상기 및 표 1 및 2에 사용된 약어는 하기 화합물들에 부합한다:



Al-PPL02, 실시예 13에 따름

[0227]



[0228]

표 1

[0229]

예	HBL	ETL	최대 효율 (cd/A)	100 cd/m ² 에서 전압(V)	최대 효율에서 전 력 효율(lm/W)	CIE (x, y)	10 mA/cm ₂ 에서 수명 (시간)
예 T1	A1-PPL2 (10 nm)	AlQ ₃ (20 nm)	30.0	5.1	16.5	0.32/0.62	600
예 T2 (비교)	BA1q (10 nm)	AlQ ₃ (20 nm)	18.3	5.1	8.5	0.32/0.62	250
예 T3	A1-PPL2 (20 nm)	--	22.9	3.2	23.2	0.32/0.62	290
예 T4 (비교)	BA1q (20 nm)	--	16.5	5.3	8.8	0.32/0.62	180

표 2

[0230]

예	EML	ETL	최대 효율 (cd/A)	100 cd/m ² 에서 전압(V)	최대 효율에서 전력 효율(lm/W)	CIE (x, y)	10 mA/cm ₂ 에 서 수명 (시간)
예 S1	S-DPVBi (30 nm)	A1-PPL2 (10 nm)	4.7	3.6	3.8	0.16/0.20	800
예 S2 (비교)	S-DPVBi (30 nm)	Al-Q ₃ (10 nm)	3.9	4.9	2.4	0.16/0.20	640

[0231]

표 1은 인광 OLED에 A1-PPL2를 정공 막음 물질로서 사용하는 것이 BA1q와 비교하여 OLED의 효율, 특히 전력 효율을 명백히 증가시켰음을 나타내며, 통상 두 배의 전력 효율이 관찰되었다. 동시에, 수명 또한 명백히 향상되었다. 상기 실시예들은 전자 수송층조차도 생략될 수 있음을 나타내고, 이는 소자 구조를 명백히 단순화시킨다.

[0232]

형광 OLED에서 A1-PPL2를 전자 수송 물질로서 사용하는 경우, 표 2로부터 이해할 수 있듯이 효율, 전력 효율 및 수명이 또한 명백히 향상된다.

[0233]

요약하면, A1-PPL2 같은 본 발명의 화합물을 정공 차단 물질 또는 전자 수송 물질로서 함유하는 인광 및 형광 OLED는 표 1 및 표 2에 열거된 예들로부터 쉽게 이해할 수 있듯이, 긴 수명 및 낮은 작동 전압과 함께 동시에 고효율을 갖는다.