



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2021년09월17일
(11) 등록번호 10-2303671
(24) 등록일자 2021년09월13일


(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07F 5/02 (2006.01) HO1L 51/00 (2006.01)
HO1L 51/50 (2006.01) HO1L 51/56 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C07F 5/02 (2013.01)
HO1L 51/0052 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2020-0083411(분할)
(22) 출원일자 2020년07월07일
심사청구일자 2020년07월14일
(65) 공개번호 10-2020-0086247
(43) 공개일자 2020년07월16일
(62) 원출원 특허 10-2013-0088433
원출원일자 2013년07월26일
심사청구일자 2018년01월25일
(30) 우선권주장
61/677,310 2012년07월30일 미국(US)
13/788,741 2013년03월07일 미국(US)
(56) 선행기술조사문헌
KR1020090008736 A*
(뒷면에 계속)
전체 청구항 수 : 총 5 항

(73) 특허권자
유니버설 디스플레이 코퍼레이션
미국, 뉴저지 08618, 유잉, 필립스 불바르 375
(72) 발명자
광 레이먼드
미국 08618 뉴저지주 유잉 필립스 불바르 375 유니버설 디스플레이 코퍼레이션 내
(74) 대리인
김진희, 김태홍

심사관 : 신귀임

(54) 발명의 명칭 **붕소-질소 폴리방향족 화합물 및 OLED에서의 이의 용도**

(57) 요약

본 발명은 융합 방향족 고리계를 갖는 붕소-질소 폴리방향족 화합물에 관한 것이며, 여기서 화합물은 하나 이상의 방향족 고리 또는 융합 방향족 고리에 임의로 융합된 [1,2]아자보리노[1,2-a][1,2]아자보린  을 비롯한 융합 방향족 고리계를 포함하며, 융합 방향족 고리계는 하나 이상의 치환기 R로 치환되며, 이 치환기는 방향족 고리계에 융합되지 않으며, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술파닐, 술피닐, 술포닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택되며; 여기서 임의의 2개의 인접하는 치환기 R은 임의로 결합되어 1중 이상의 비-방향족 고리를 형성한다. 또한, 본 발명은 발광 물질을 포함하는 디바이스, 예컨대 유기 발광 디바이스(OLED)에 관한 것이다.

대표도 - 도3



(52) CPC특허분류

H01L 51/0058 (2013.01)

H01L 51/0071 (2013.01)

H01L 51/008 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

H01L 51/5016 (2013.01)

H01L 51/56 (2013.01)

(56) 선행기술조사문헌

KR1020140008395 A*

Angew. Chem. Int. Ed., Vol. 46, pp. 4940-4943, 2007*

J. Am. Chem. Soc., Vol. 133, pp. 18614-18617, 2011*

J. Org. Chem., Vol. 72, pp. 5234-5243, 2007*

Phys. Chem. Chem. Phys., Vol. 13, pp. 20627-20636, 2011*

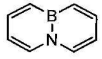
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

명세서

청구범위

청구항 1

하나 이상의 방향족 고리 또는 융합 방향족 고리에 임의로 융합된 [1,2]아자보리노[1,2-a][1,2]아자보린



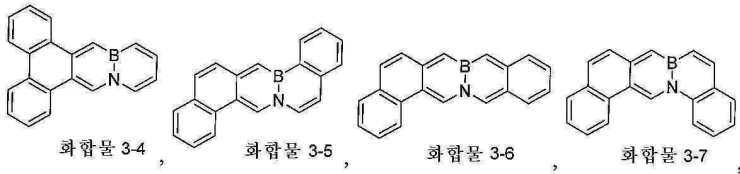
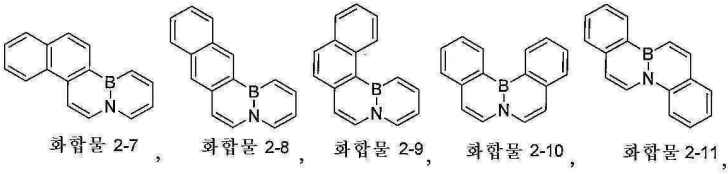
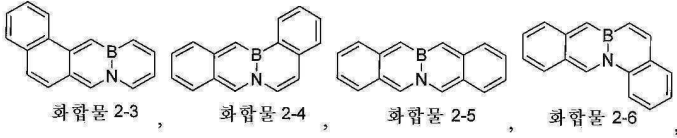
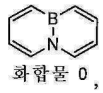
을 포함한 융합 방향족 고리계를 포함하는 화합물로서,

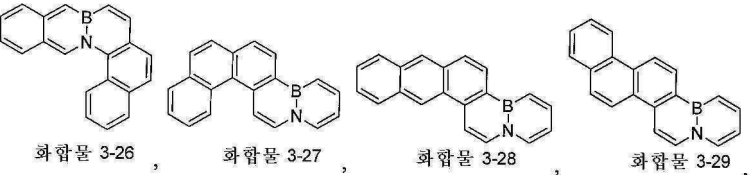
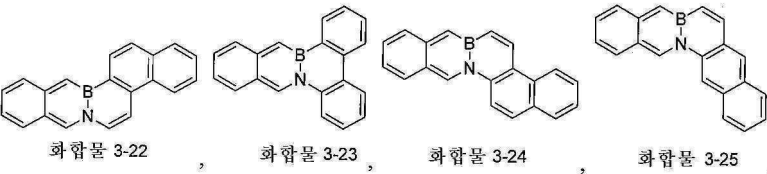
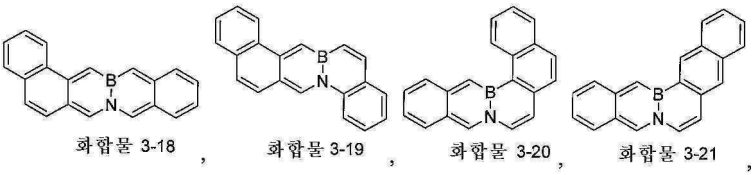
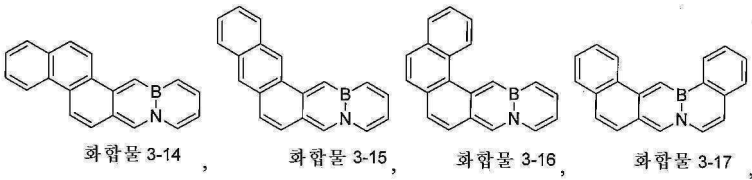
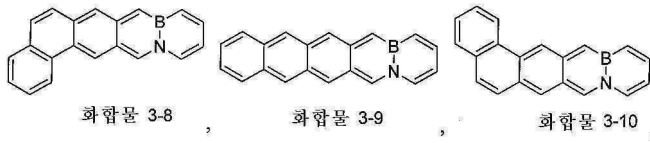
융합 방향족 고리계는 하나 이상의 치환기 R로 치환되며, 치환기 R은 방향족 고리계에 융합되지 않고, NR_aR_b, 아릴, 헤테로아릴 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되며; R_a 및 R_b는 아릴 또는 헤테로아릴 이고;

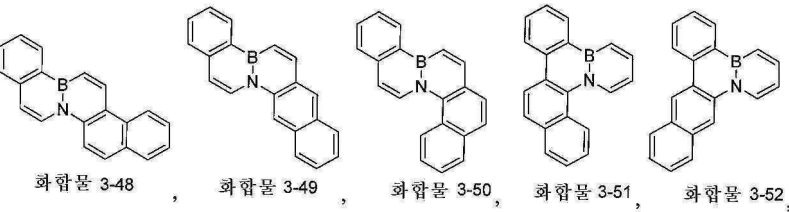
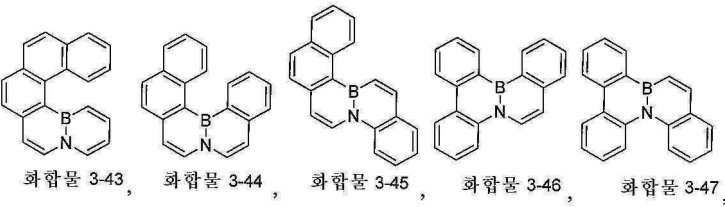
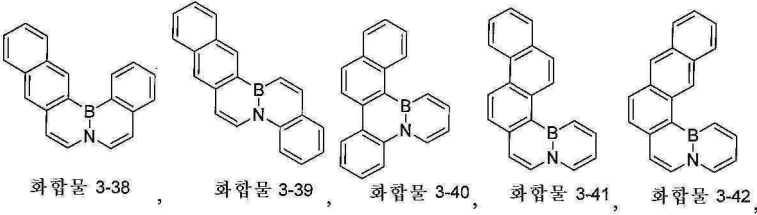
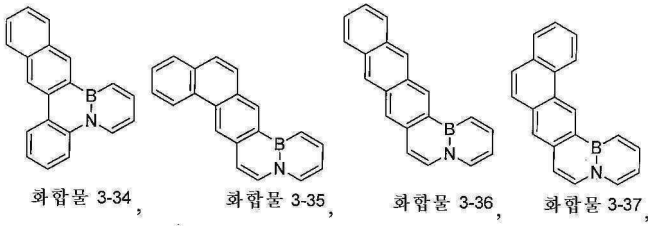
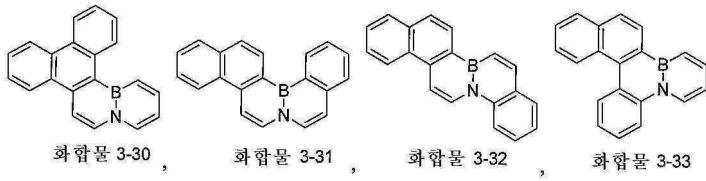
각각의 아릴 및 헤테로아릴은 비치환이거나, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술파닐, 술피닐, 술포닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 각각 독립적으로 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환되며;

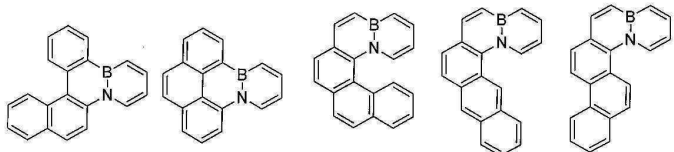
여기서 임의의 2개의 인접하는 치환기 R은 임의로 결합되어 1종 이상의 비-방향족 고리를 형성하고,

상기 융합 방향족 고리계는 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 화합물:

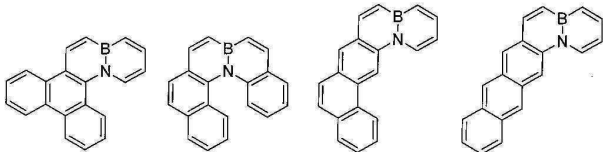




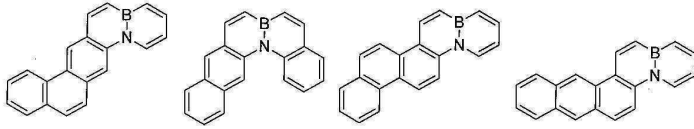




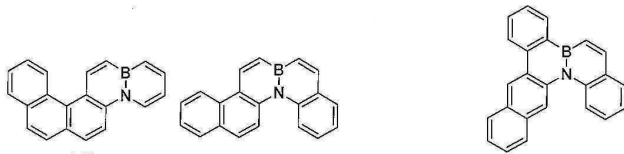
화합물 3-53, 화합물 3-54, 화합물 3-55, 화합물 3-56, 화합물 3-57,



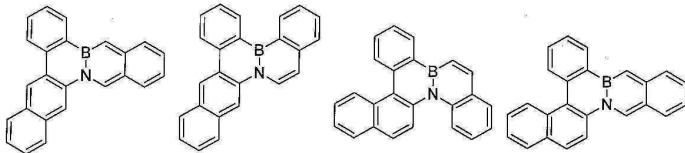
화합물 3-58, 화합물 3-59, 화합물 3-60, 화합물 3-61,



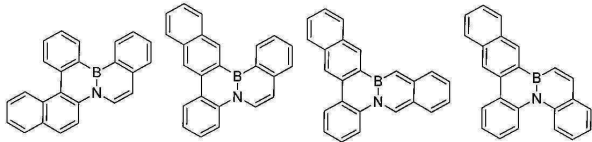
화합물 3-62, 화합물 3-63, 화합물 3-64, 화합물 3-65,



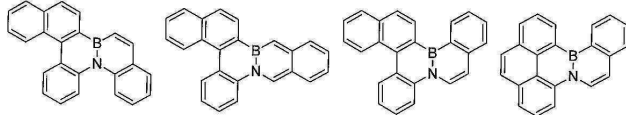
화합물 3-66, 화합물 3-67, 화합물 4-2,



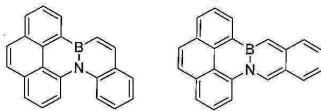
화합물 4-3, 화합물 4-4, 화합물 4-5, 화합물 4-6,



화합물 4-7, 화합물 4-8, 화합물 4-9, 화합물 4-10,



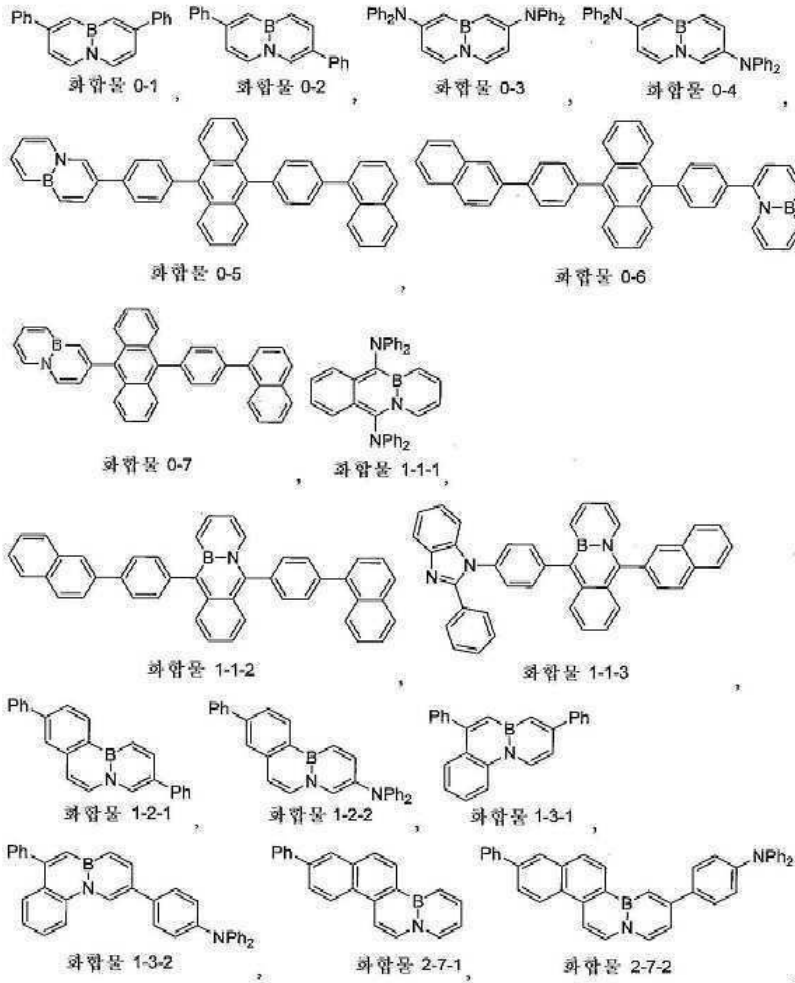
화합물 4-11, 화합물 4-12, 화합물 4-13, 화합물 4-14,

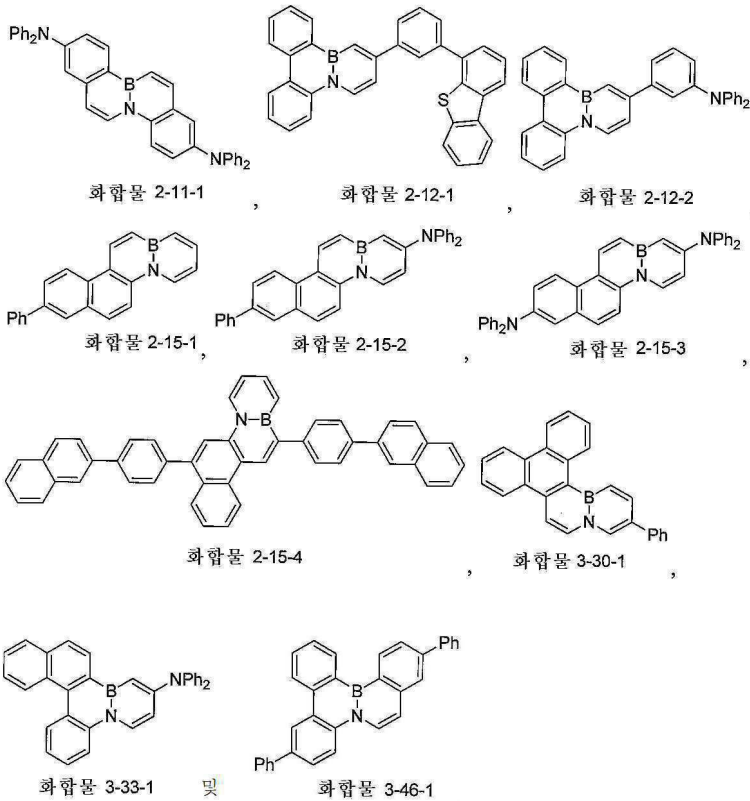


화합물 4-15 및 화합물 4-16

청구항 2

제1항에 있어서, 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 화합물:





청구항 3

삭제

청구항 4


유기 발광 디바이스를 포함하는 제1의 디바이스로서, 상기 유기 발광 디바이스는

애노드;

캐소드; 및

애노드와 캐소드의 사이에 배치된 유기층을 포함하고,

유기층이 하나 이상의 방향족 고리 또는 융합 방향족 고리에 임의로 융합된 [1,2]아자보리노[1,2-a][1,2]아자보

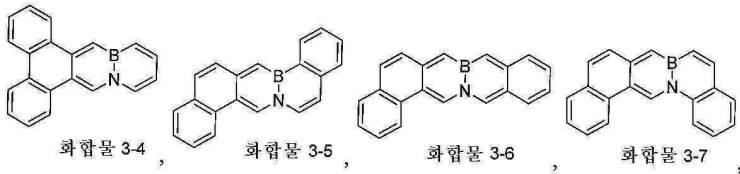
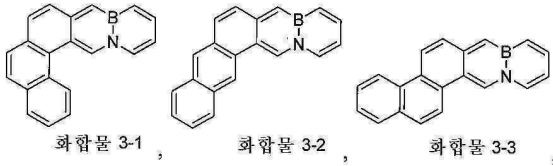
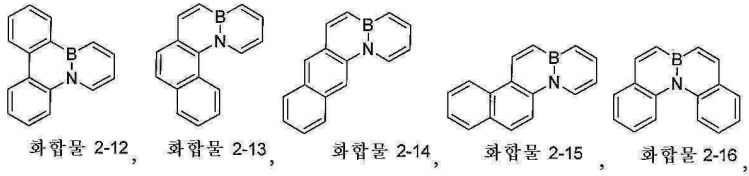
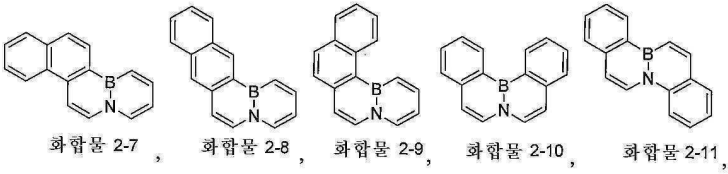
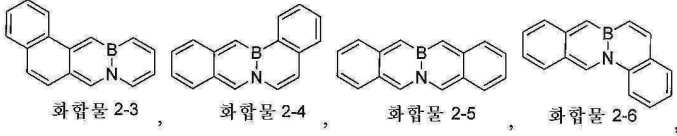
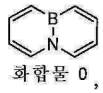
린  을 포함한 융합 방향족 고리계를 포함하는 화합물을 포함하며,

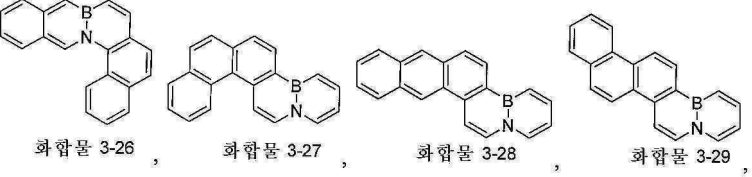
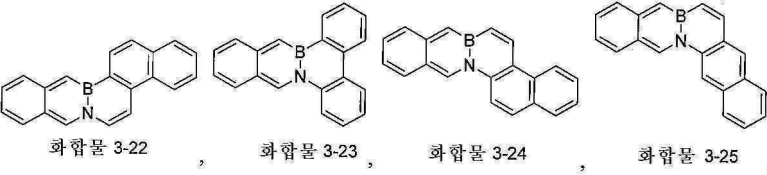
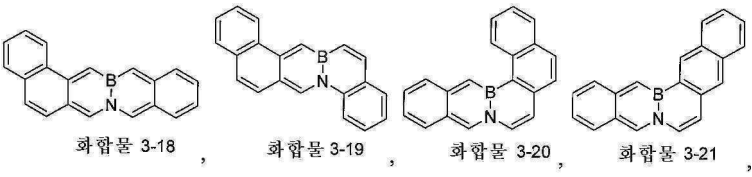
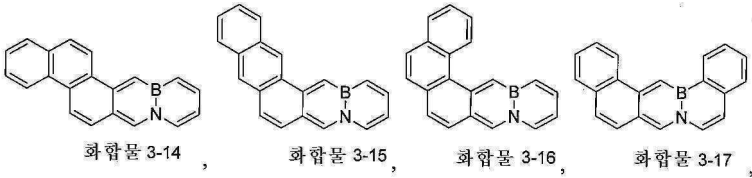
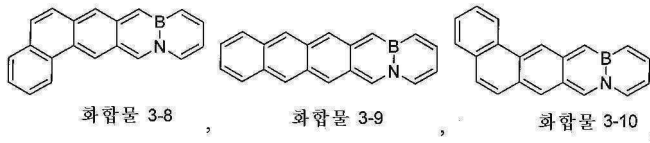
융합 방향족 고리계는 하나 이상의 치환기 R로 치환되며, 치환기 R은 방향족 고리계에 융합되지 않고, NR_aR_b, 아릴, 헤테로아릴 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되며; R_a 및 R_b는 아릴 또는 헤테로아릴 이고;

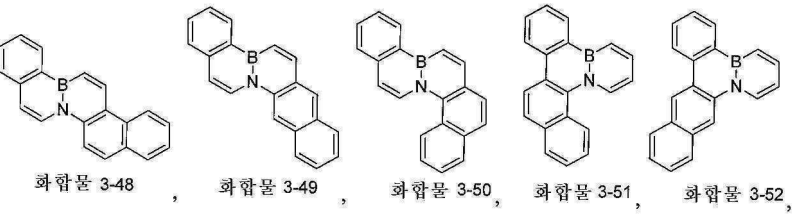
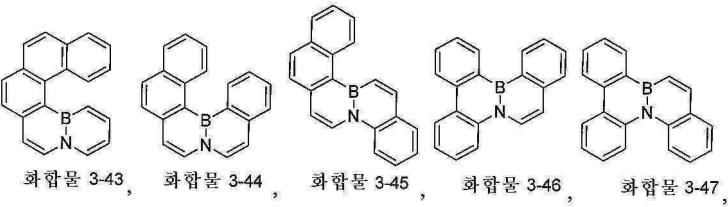
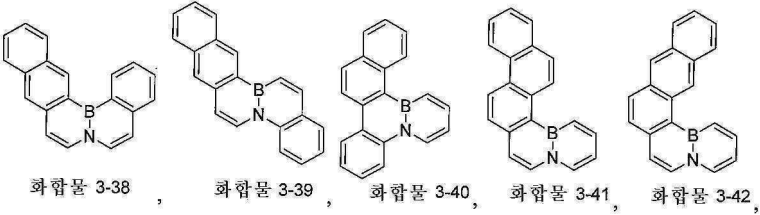
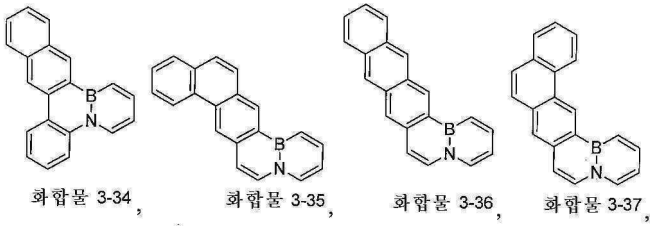
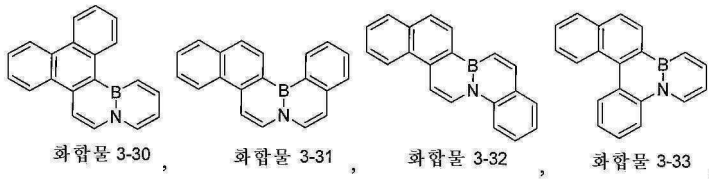
각각의 아릴 및 헤테로아릴은 비치환이거나, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술폰닐, 술피닐, 술폰닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 각각 독립적으로 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환되며;

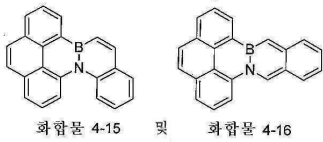
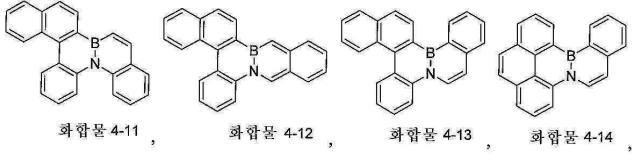
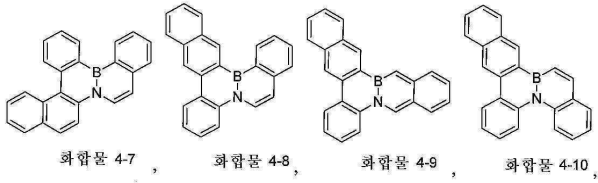
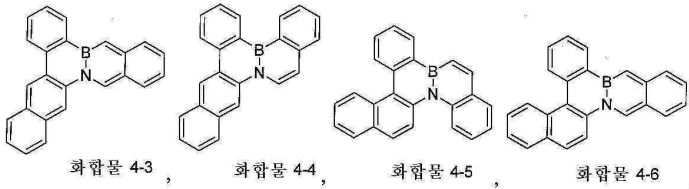
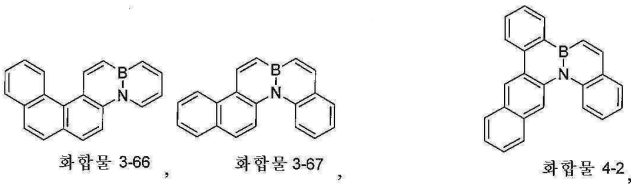
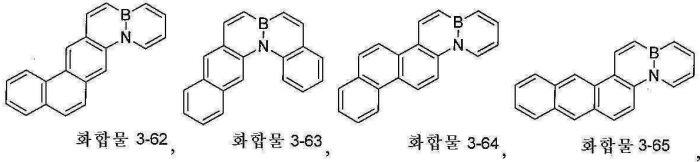
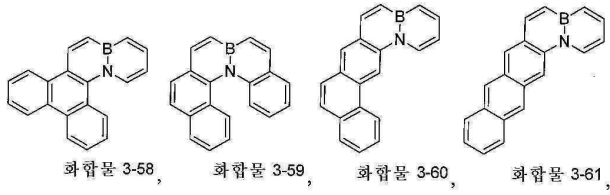
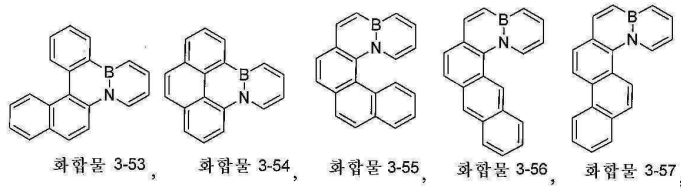
여기서 임의의 2개의 인접하는 치환기 R은 임의로 결합되어 1중 이상의 비-방향족 고리를 형성하고,

상기 융합 방향족 고리계는 하기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 제1의 디바이스:









청구항 5

제4항에 있어서, 유기층이 발광층이며, 화합물이 발광 도펀트인 것인 제1의 디바이스.

청구항 6

제4항에 있어서, 유기층이 발광층이며, 화합물이 호스트인 것인 제1의 디바이스.

청구항 7

삭제

청구항 8

삭제

청구항 9

삭제

청구항 10

삭제

청구항 11

삭제

청구항 12

삭제

청구항 13

삭제

청구항 14

삭제

청구항 15

삭제

발명의 설명

기술 분야

[0001] 관련 출원의 상호 참조

[0002] 본원은 2012년 7월 30일자로 출원된 미국 가출원 제61/677,310호를 우선권 주장으로 하며, 상기 가출원의 전체 개시내용은 본원에 참고로 포함된다.

[0003] 공동 연구 계약

[0004] 당해 발명은 합동 산학 연구 협약에 따라 리전즈 오브 더 유니버시티 오브 미시간, 프린스턴 유니버시티, 더 유니버시티 오브 서던 캘리포니아 및 더 유니버설 디스플레이 코포레이션 당사자 중 하나 이상에 의하여, 이를 대신하여 및/또는 이와 관련하여 완성되었다. 협약은 당해 발명이 완성된 일자에 그리고 일자 이전에 발효되었으며, 당해 발명은 협약서의 범주내에서 수행된 활동의 결과로서 완성되었다.

[0005] 본 발명은 유기 발광 디바이스(OLED)에 관한 것이다. 보다 구체적으로, 본 발명은 광발광 및 전계발광 안정성이 개선될 수 있는 발광 물질에 관한 것이다.

배경 기술

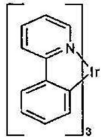
[0006] 유기 물질을 사용하는 광전자 디바이스는 여러 이유로 인하여 점차로 중요해지고 있다. 이와 같은 디바이스를 제조하는데 사용되는 다수의 물질은 비교적 저렴하여 유기 광전자 디바이스는 무기 디바이스에 비하여 경제적 잇점면에서 잠재성을 갖는다. 또한, 유기 물질의 고유한 성질, 예컨대 이의 가요성은 가요성 기관상에서의 제조와 같은 특정 적용예에 매우 적합하게 될 수 있다. 유기 광전자 디바이스의 예로는 유기 발광 디바이스(OLED), 유기 광트랜지스터, 유기 광전지 및 유기 광검출기를 들 수 있다. OLED의 경우, 유기 물질은 통상의 물질에 비하여 성능면에서의 잇점을 가질 수 있다. 예를 들면, 유기 발광층이 광을 방출하는 파장은 일반적으로 적절한

도펀트로 용이하게 조절될 수 있다.

[0007] OLED는 디바이스를 가로질러 전압을 인가시 광을 방출하는 유기 박막을 사용하게 한다. OLED는 평판 패널 디스플레이, 조명 및 역광과 같은 적용예에 사용하기 위한 점차로 중요해지는 기술이다. 여러가지의 OLED 물질 및 형상은 미국 특허 제5,844,363호, 제6,303,238호 및 제5,707,745호에 기재되어 있으며, 이들 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다.

[0008] 인광 발광 분자에 대한 하나의 적용예는 총 천연색 디스플레이이다. 이러한 디스플레이에 대한 산업적 기준은 "포화" 색상으로서 지칭하는 특정 색상을 방출하도록 조정된 픽셀을 필요로 한다. 특히, 이러한 기준은 포화 적색, 녹색 및 청색 픽셀을 필요로 한다. 색상은 당업계에 공지된 CIE 좌표를 사용하여 측정될 수 있다.

[0009] 녹색 발광 분자의 일례로는 하기 화학식을 갖는 Ir(ppy)₃으로 나타낸 트리스(2-페닐피리딘) 이리듐이다:



[0010]

[0011] 본원에서의 이와 같은 화학식 및 하기의 화학식에서, 본 출원인은 질소로부터 금속(여기에서는 Ir)으로의 배위 결합을 직선으로 도시한다.

[0012] 본원에서, 용어 "유기"라는 것은 유기 광전자 디바이스를 제조하는데 사용될 수 있는 중합체 물질뿐 아니라, 소분자 유기 물질을 포함한다. "소분자"는 중합체가 아닌 임의의 유기 물질을 지칭하며, "소분자"는 실제로 꽤 클 수도 있다. 소분자는 일부의 상황에서는 반복 단위를 포함할 수 있다. 예를 들면, 치환기로서 장쇄 알킬기를 사용하는 것은 "소분자" 유형으로부터 분자를 제거하지 않는다. 소분자는 또한 예를 들면 중합체 주쇄상에서의 측쇄기로서 또는 주쇄의 일부로서 중합체에 투입될 수 있다. 소분자는 또한 코어 부분상에 생성된 일련의 화학적 셀로 이루어진 덴드리머의 코어 부분으로서 작용할 수 있다. 덴드리머의 코어 부분은 형광 또는 인광 소분자 방출체일 수 있다. 덴드리머는 "소분자"일 수 있으며, OLED 분야에서 통상적으로 사용되는 모든 덴드리머는 소분자인 것으로 밝혀졌다.

[0013] 본원에서 사용한 바와 같이, "상부"는 기관으로부터 가장 멀리 떨어졌다는 것을 의미하며, "하부"는 기관에 가장 근접하다는 것을 의미한다. 제1층이 제2층의 상부에 위치하는" 것으로 기재될 경우, 제1층은 기관으로부터 멀리 떨어져 배치된다. 제1층이 제2층과 "접촉되어 있는" 것으로 명시되지 않는다면 제1층과 제2층 사이에는 다른 층이 존재할 수 있다. 예를 들면, 캐소드와 애노드의 사이에 다양한 유기층이 존재할 수 있을지라도, 캐소드는 애노드의 상부에 위치하는" 것으로 기재될 수 있다.

[0014] 본원에서 사용한 바와 같이, "용액 가공성"은 용액 또는 현탁액 형태로 액체 매체에 용해, 분산 또는 수송될 수 있거나 및/또는 액체 매체로부터 증착될 수 있다는 것을 의미한다.

[0015] 리간드가 발광 물질의 광활성 성질에 직접적으로 기여하는 것으로 밝혀질 경우, 리간드는 "광활성"으로서 지칭될 수 있다. 보조적 리간드가 광활성 리간드의 성질을 변경시킬 수 있을지라도, 리간드가 발광 물질의 광활성 성질에 기여하지 않는 것으로 밝혀질 경우, 리간드는 "보조적"인 것으로 지칭될 수 있다.

[0016] 본원에서 사용한 바와 같이 그리고 일반적으로 당업자가 이해하고 있는 바와 같이, 제1의 "최고 점유 분자 궤도"(HOMO) 또는 "최저 점유 분자 궤도"(LUMO) 에너지 레벨이 진공 에너지 레벨에 근접할 경우, 제1의 에너지 레벨은 제2의 HOMO 또는 LUMO보다 "더 크거나" 또는 "더 높다". 이온화 전위(IP)가 진공 레벨에 대하여 음의 에너지로서 측정되므로, 더 높은 HOMO 에너지 레벨은 더 작은 절대값을 갖는 IP에 해당한다(IP는 음의 값이 더 작다). 유사하게, 더 높은 LUMO 에너지 레벨은 절대값이 더 작은 전자 친화도(EA)에 해당한다(EA의 음의 값이 더 작다). 상부에서의 진공 레벨을 갖는 통상의 에너지 레벨 다이어그램에서, 물질의 LUMO 에너지 레벨은 동일한 물질의 HOMO 에너지 레벨보다 더 높다. "더 높은" HOMO 또는 LUMO 에너지 레벨은 "더 낮은" HOMO 또는 LUMO 에너지 레벨보다 상기 다이어그램의 상부에 더 근접한다는 것을 나타낸다.

[0017] 본원에서 사용한 바와 같이 그리고 일반적으로 당업자가 이해하는 바와 같이, 제1의 일 함수의 절대값이 더 클 경우, 제1의 일 함수는 제2의 일 함수보다 "더 크거나" 또는 "더 높다". 일 함수는 일반적으로 진공 레벨에 대하여 음의 수로서 측정되므로, 이는 "더 높은" 일 함수의 음의 값이 더 크다는 것을 의미한다. 상부에서 진공 레벨을 갖는 통상의 에너지 레벨 다이어그램에서, "더 높은" 일 함수는 진공 레벨로부터 아래 방향으로 더 먼

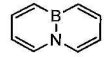
것으로서 도시된다. 그래서, HOMO 및 LUMO 에너지 레벨의 정의는 일 함수와는 상이한 조약을 따른다.

[0018] OLED에 대한 세부사항 및 전술한 정의는 미국 특허 제7,279,704호에서 찾아볼 수 있으며, 이 특허 문헌의 개시 내용은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다.

발명의 내용

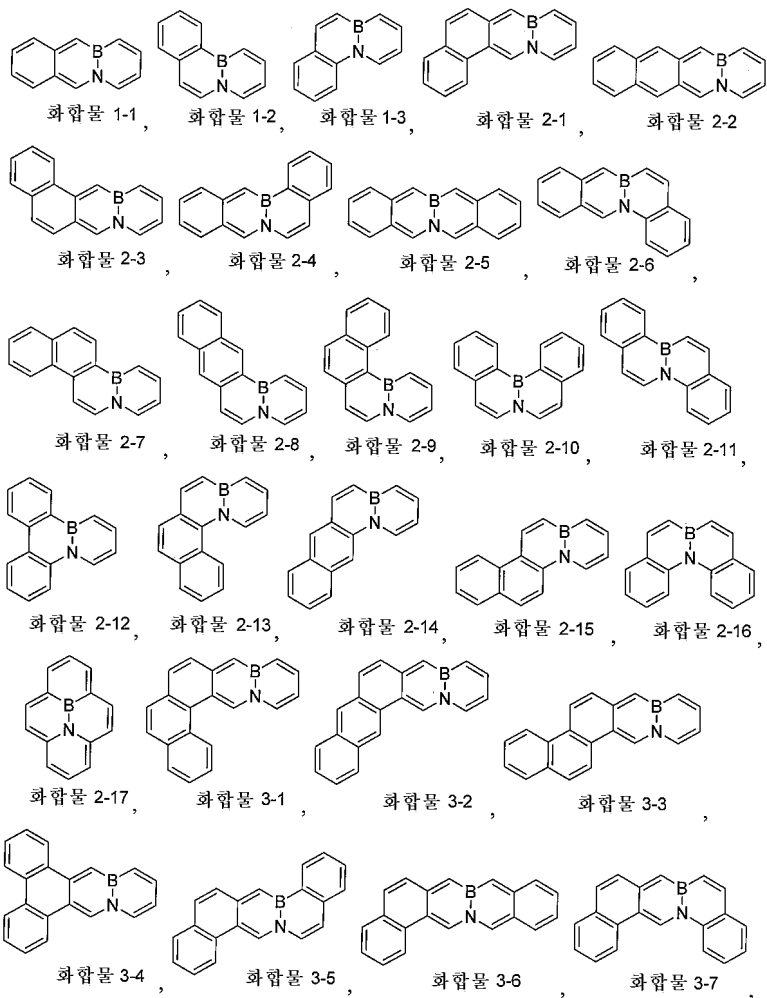
해결하려는 과제

[0019] 하나 이상의 방향족 고리 또는 융합 방향족 고리에 임의로 융합된 [1,2]아자보리노[1,2-a][1,2]아자보린

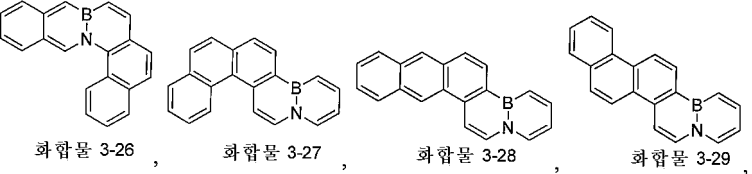
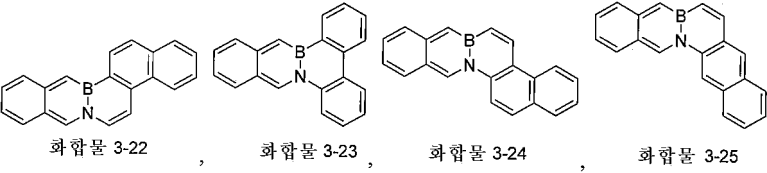
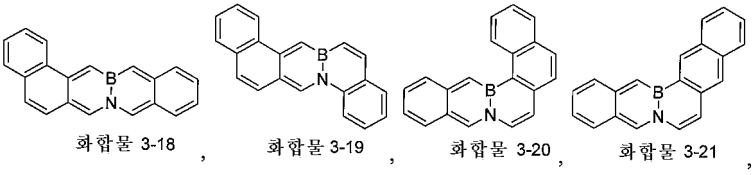
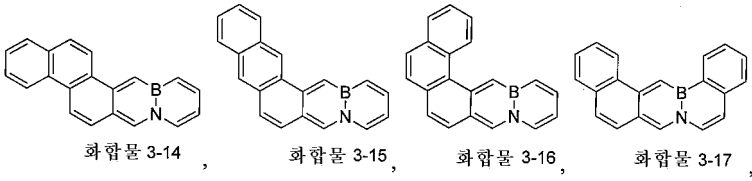
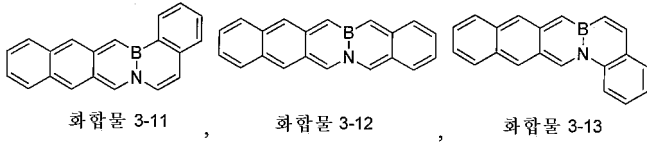
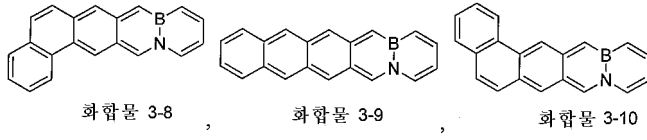
 을 포함하는 융합 방향족 고리계를 가지며, 융합 방향족 고리계는 하나 이상의 치환기 R로 치환되며, 이 치환기는 방향족 고리계에 융합되지 않으며, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술폰닐, 술폰닐, 술폰닐, 포스포노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택되며; 여기서 임의의 2개의 인접하는 치환기 R은 임의로 결합되어 1종 이상의 비-방향족 고리를 형성하는 붕소-질소 폴리방향족 화합물을 포함하는 신규한 유형의 물질이 제공된다.

과제의 해결 수단

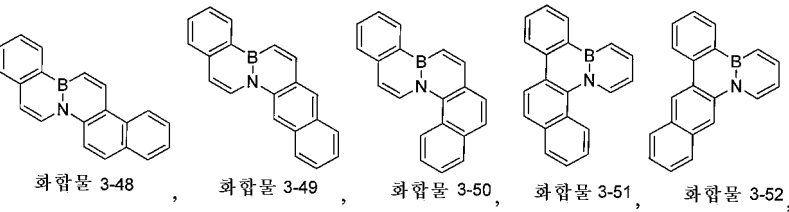
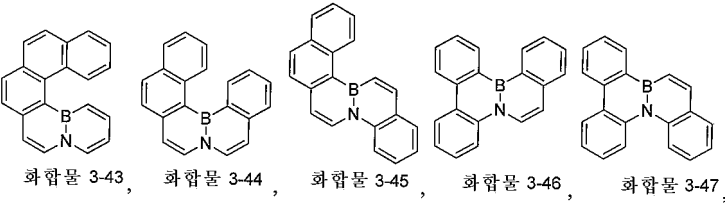
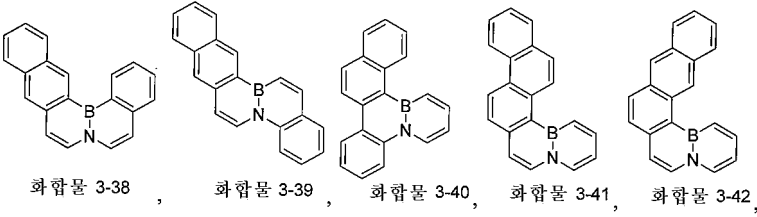
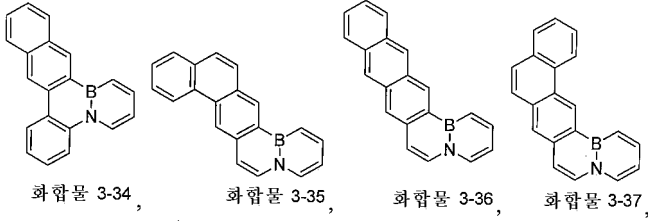
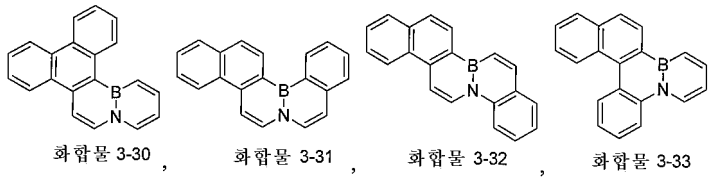
[0020] 일부 상기 실시양태에서, 융합 방향족 고리계는 하기로 이루어진 군으로부터 선택되며:



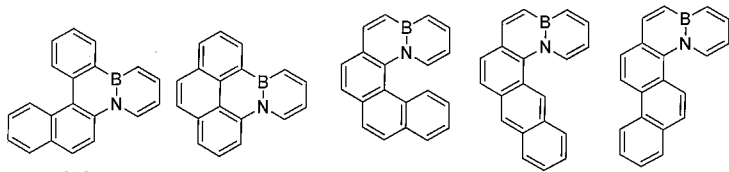
[0021]



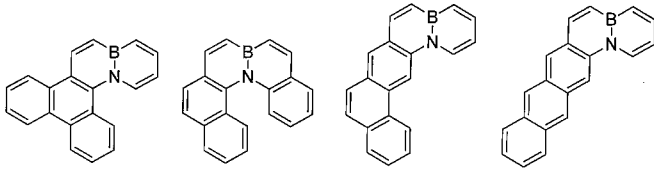
[0022]



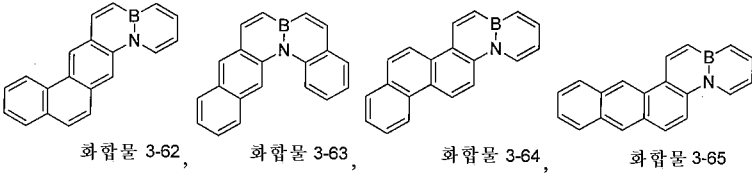
[0023]



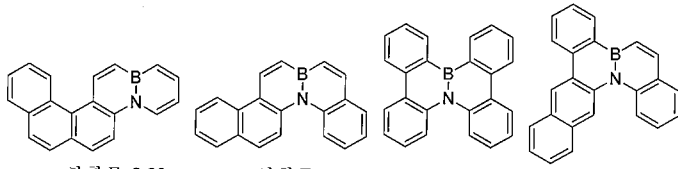
화합물 3-53, 화합물 3-54, 화합물 3-55, 화합물 3-56, 화합물 3-57,



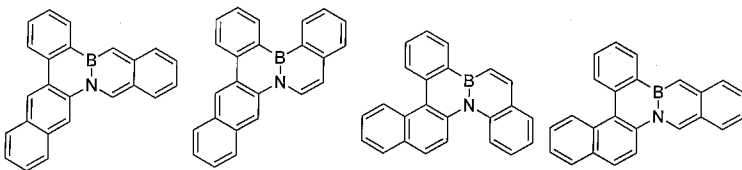
화합물 3-58, 화합물 3-59, 화합물 3-60, 화합물 3-61,



화합물 3-62, 화합물 3-63, 화합물 3-64, 화합물 3-65,

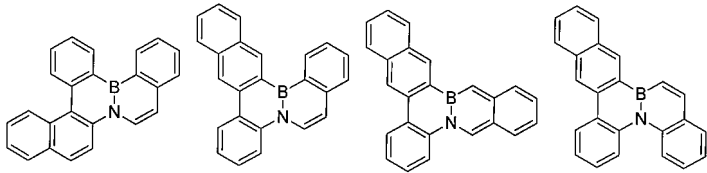


화합물 3-66, 화합물 3-67, 화합물 4-1, 화합물 4-2,

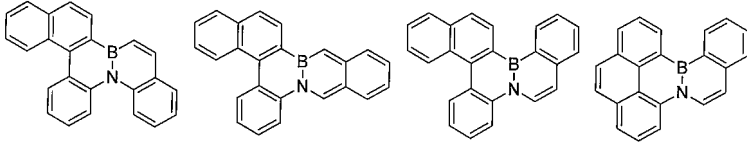


화합물 4-3, 화합물 4-4, 화합물 4-5, 화합물 4-6,

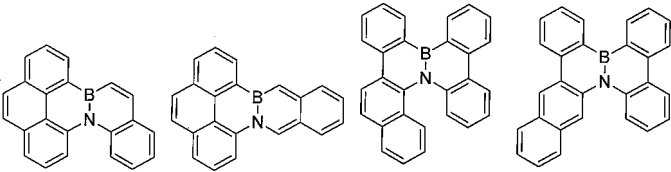
[0024]



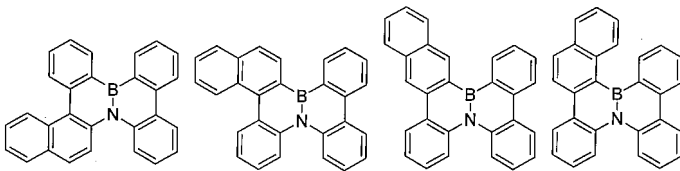
화합물 4-7 , 화합물 4-8 , 화합물 4-9 , 화합물 4-10 ,



화합물 4-11 , 화합물 4-12 , 화합물 4-13 , 화합물 4-14 ,

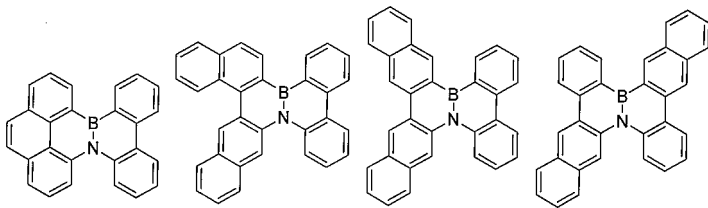


화합물 4-15 , 화합물 4-16 , 화합물 5-1 , 화합물 5-2 ,

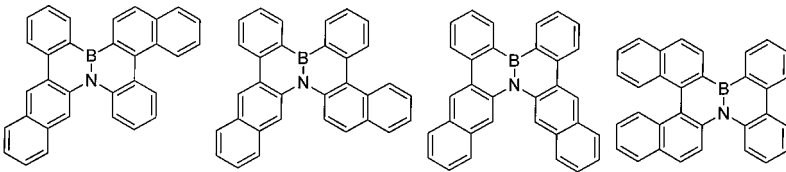


화합물 5-3 , 화합물 5-4 , 화합물 5-5 , 화합물 5-6 ,

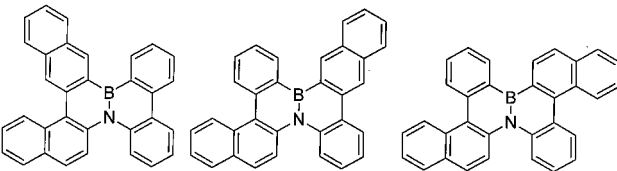
[0025]



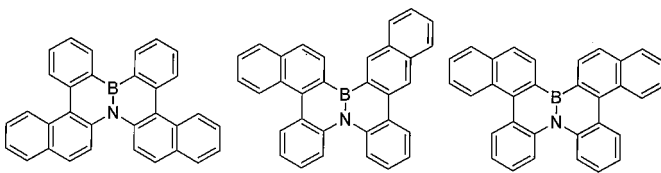
화합물 5-7 , 화합물 6-1 , 화합물 6-2 , 화합물 6-3 ,



화합물 6-4 , 화합물 6-5 , 화합물 6-6 , 화합물 6-7 ,

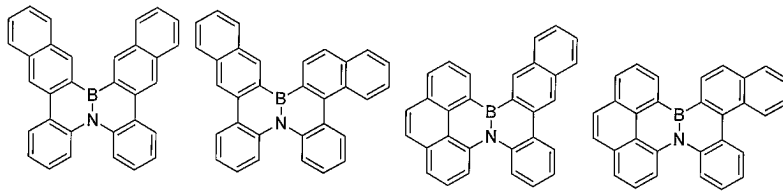


화합물 6-8 , 화합물 6-9 , 화합물 6-10 ,

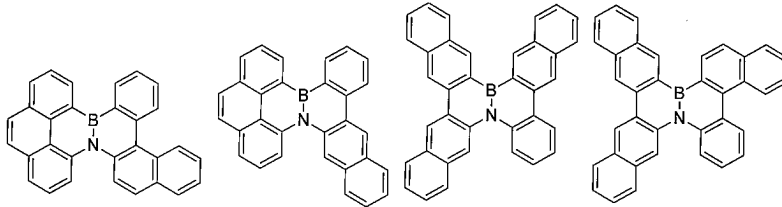


화합물 6-11 , 화합물 6-12 , 화합물 6-13 ,

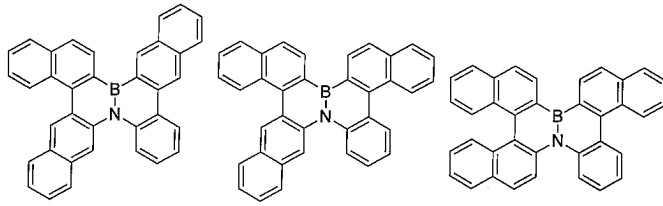
[0026]



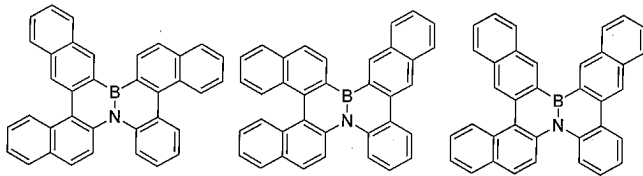
화합물 6-14 , 화합물 6-15 , 화합물 6-16 , 화합물 6-17 ,



화합물 6-18 , 화합물 6-19 , 화합물 7-1 , 화합물 7-2 ,

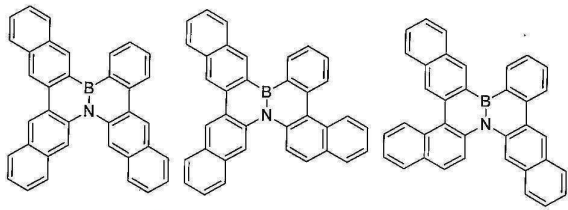


화합물 7-3 , 화합물 7-4 , 화합물 7-5 ,

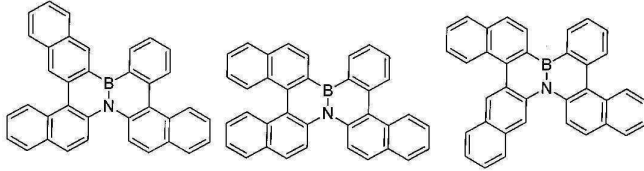


화합물 7-6 , 화합물 7-7 , 화합물 7-8 ,

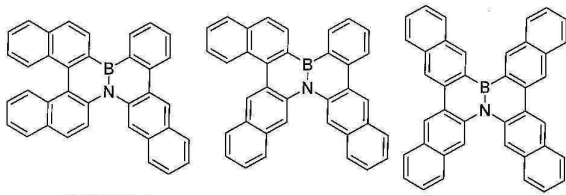
[0027]



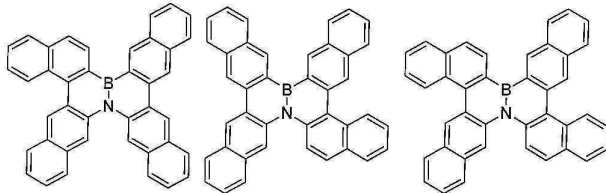
화합물 7-8 , 화합물 7-9 , 화합물 7-10 ,



화합물 7-11 , 화합물 7-12 , 화합물 7-13 ,

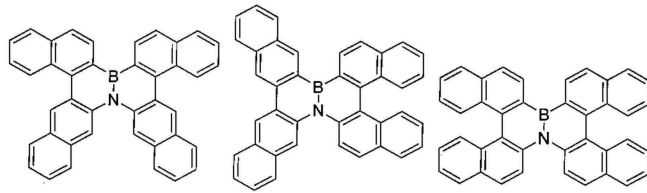


화합물 7-14 , 화합물 7-15 , 화합물 8-1 ,

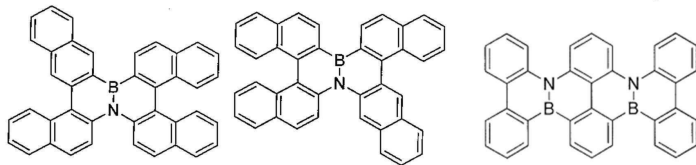


화합물 8-2 , 화합물 8-3 , 화합물 8-4 ,

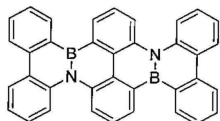
[0028]



화합물 8-5 , 화합물 8-6 , 화합물 8-7 ,



화합물 8-8 , 화합물 8-9 , 화합물 8-10 및



화합물 8-11

[0029]

[0030]

여기서 융합 방향족 고리계는 하나 이상의 치환기 R로 치환되며, 이 치환기는 방향족 고리계에 융합되지 않으며, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술폰닐, 술폰닐, 술폰닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택되며; 여기서 임의의 2개의 인접하는 치환기 R은 임의로 결합되어 1종 이상의 비-방향족 고리를 형성한다.

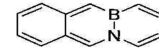
[0031]

일부의 추가의 상기 실시양태에서, 융합 방향족 고리계는 각각 하나 이상의 치환기 R로 치환된 하기로 이루어진

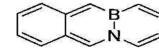
군으로부터 선택되며, 이 치환기는 방향족 고리계에 융합되지 않으며, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술폰닐, 술피닐, 술포닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택되며; 여기서 임의의 2개의 인접하는 치환기 R은 임의로 결합되어 1종 이상의 비-방향족 고리를 형성한다:



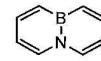
[0032]

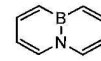


[0033]

일부 실시양태에서, 융합 방향족 고리계는 하나 이상의 치환기 R로 치환된 치환된 이며, 이 치환기는 방향족 고리계에 융합되지 않으며, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술폰닐, 술피닐, 술포닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택되며; 여기서 임의의 2개의 인접하는 치환기 R이 임의로 결합되어 1종 이상의 비-방향족 고리를 형성한다.

[0034]



일부 실시양태에서, 융합 방향족 고리계는 하나 이상의 치환기 R로 치환된 이며, 이 치환기는 방향족 고리계에 융합되지 않으며, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술폰닐, 술피닐, 술포닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택되며; 여기서 임의의 2개의 인접하는 치환기 R은 임의로 결합되어 1종 이상의 비-방향족 고리를 형성한다.

[0035]

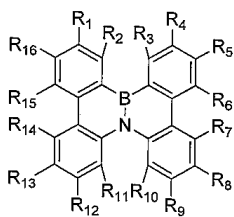
본 발명의 일부 실시양태에서, 치환기 R은 알킬, 시클로알킬, 아미노, 실릴, 아릴, 헤테로아릴 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0036]

일부 상기 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 하기 화학식 II, 화학식 III 또는 화학식 IV의 화합물이다:

[0037]

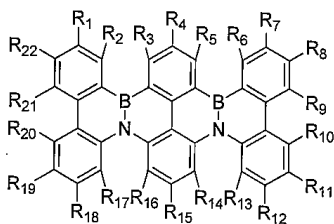
<화학식 II>



[0038]

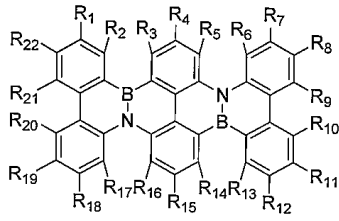
[0039]

<화학식 III>



[0040]

[0041] <화학식 IV>



[0042]

[0043]

상기 화학식에서, R₁ 내지 R₂₂는 수소, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술폰, 술폰, 술폰, 포스포노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 각각 독립적으로 선택되며, 여기서 임의의 2개의 인접하는 치환기는 임의로 결합되어 고리를 형성한다. 일부 상기 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 화학식 II의 화합물이다. 기타 상기 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 화학식 III의 화합물이다. 기타 상기 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 화학식 IV의 화합물이다. 일부 실시양태에서, 치환기 R₁ 내지 R₂₂는 아릴, 헤테로아릴 및 NR_aR_b로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되며; R_a 및 R_b는 추가로 치환될 수 있는 아릴 또는 헤테로아릴이다.

[0044]

일부 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 화학식 II의 화합물이며, R₅, R₈, R₁₃ 또는 R₁₆ 중 하나 이상은 수소 또는 중수소가 아니다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R₅, R₈, R₁₃ 또는 R₁₆ 중 하나 이상은 아릴, 헤테로아릴 또는 NR_aR_b이고; R_a 및 R_b는 추가로 치환될 수 있는 아릴 또는 헤테로아릴이다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R₅ 및 R₁₃은 페닐 또는 NR_aR_b이다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R_a 및 R_b는 페닐이다.

[0045]

일부 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 화학식 II의 화합물이며, R₁, R₄, R₉ 또는 R₁₂ 중 하나 이상은 수소 또는 중수소가 아니다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R₁, R₄, R₉ 또는 R₁₂ 중 하나 이상은 아릴, 헤테로아릴 또는 NR_aR_b이며; R_a 및 R_b는 추가로 치환될 수 있는 아릴 또는 헤테로아릴이다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R₁ 및 R₉는 페닐 또는 NR_aR_b이다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R_a 및 R_b는 페닐이다.

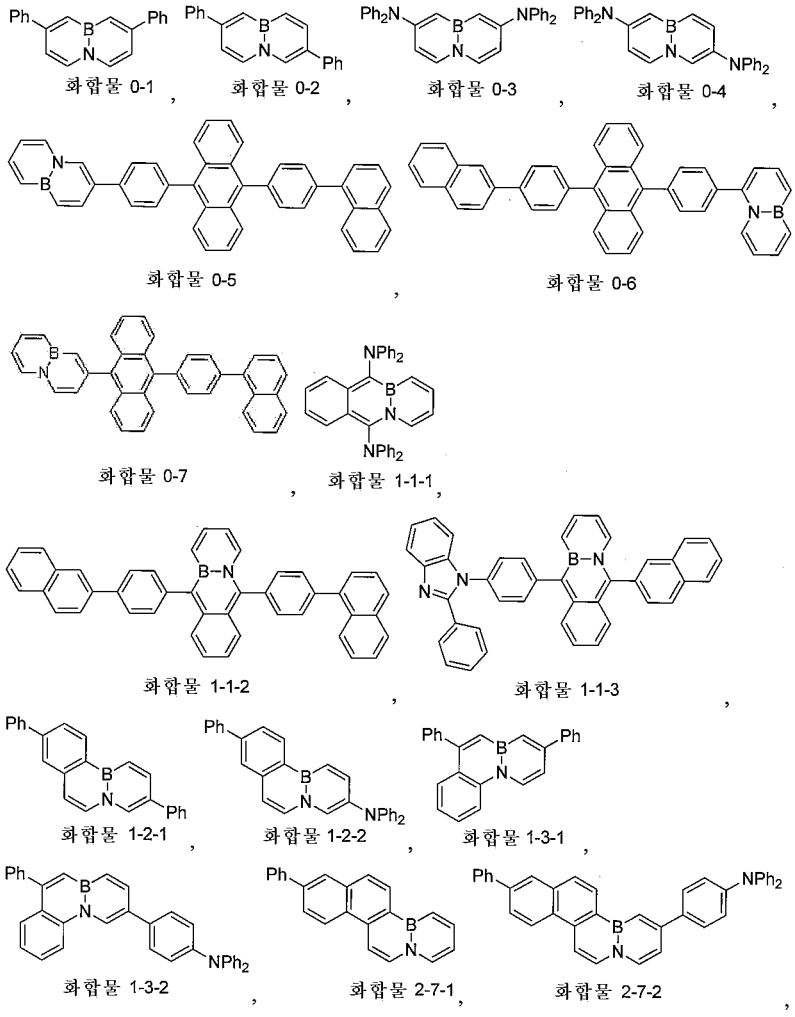
[0046]

일부 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 화학식 III 또는 화학식 IV의 화합물이며, R₈, R₁₁, R₁₉ 또는 R₂₂ 중 하나 이상은 수소 또는 중수소가 아니다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R₈, R₁₁, R₁₉ 또는 R₂₂ 중 하나 이상은 아릴, 헤테로아릴 또는 NR_aR_b이고; R_a 및 R_b는 추가로 치환될 수 있는 아릴 또는 헤테로아릴이다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R₈ 및 R₁₉는 페닐 또는 NR_aR_b이다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R_a 및 R_b는 페닐이다.

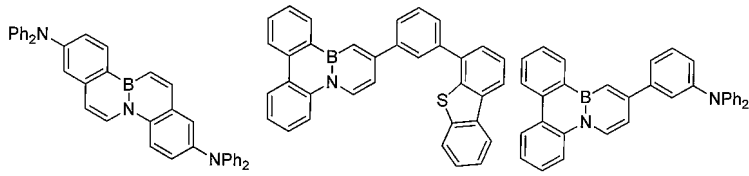
[0047]

일부 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 화학식 II의 화합물이고, R₁, R₄, R₇, R₁₂, R₁₅ 또는 R₁₈ 중 하나 이상은 수소 또는 중수소가 아니다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R₁, R₄, R₇, R₁₂, R₁₅ 또는 R₁₈ 중 하나 이상은 아릴, 헤테로아릴 또는 NR_aR_b이고; R_a 및 R_b는 추가로 치환될 수 있는 아릴 또는 헤테로아릴이다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R₁ 및 R₁₂는 페닐 또는 NR_aR_b이다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R_a 및 R_b는 페닐이다.

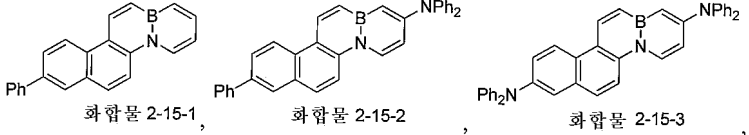
[0048] 하기로 이루어진 군으로부터 선택된 붕소-질소 폴리방향족 화합물이 제공된다:



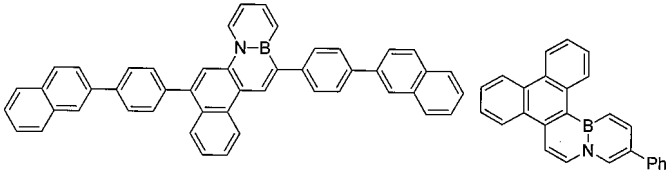
[0049]



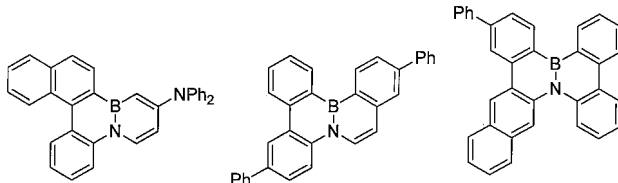
화합물 2-11-1 , 화합물 2-12-1 , 화합물 2-12-2 ,



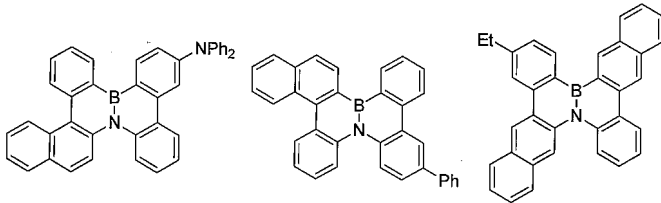
화합물 2-15-1 , 화합물 2-15-2 , 화합물 2-15-3 ,



화합물 2-15-4 , 화합물 3-30-1 ,

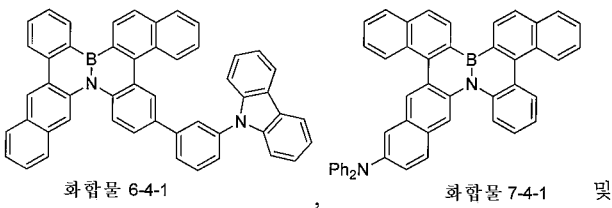


화합물 3-33-1 , 화합물 3-46-1 , 화합물 5-2-1 ,

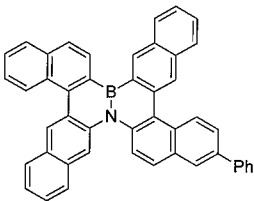


화합물 5-3-1 , 화합물 5-4-1 , 화합물 6-3-1 ,

[0050]



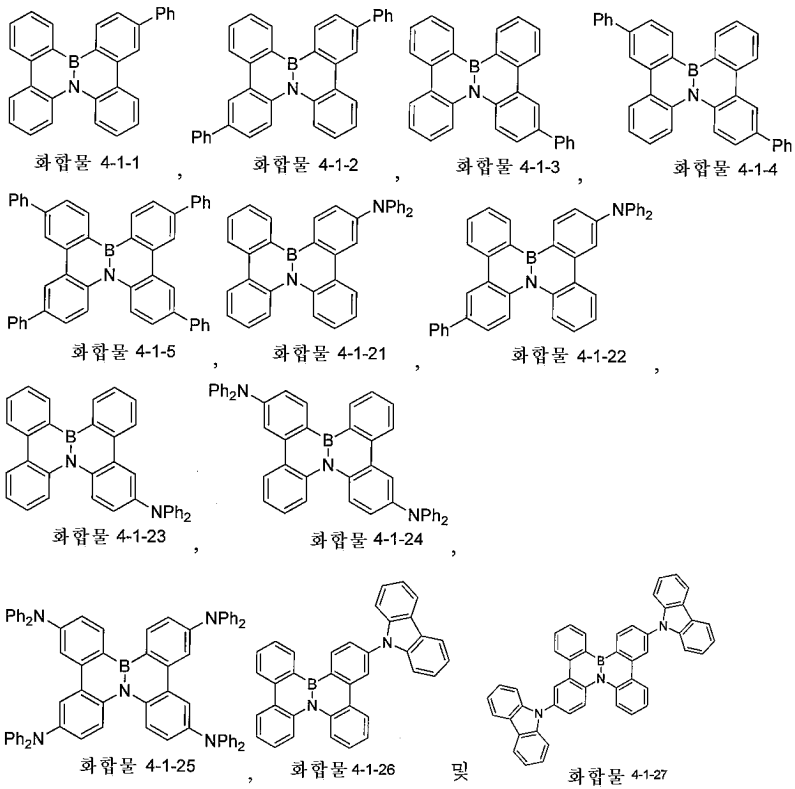
화합물 6-4-1 , 화합물 7-4-1 및



화합물 8-4-1

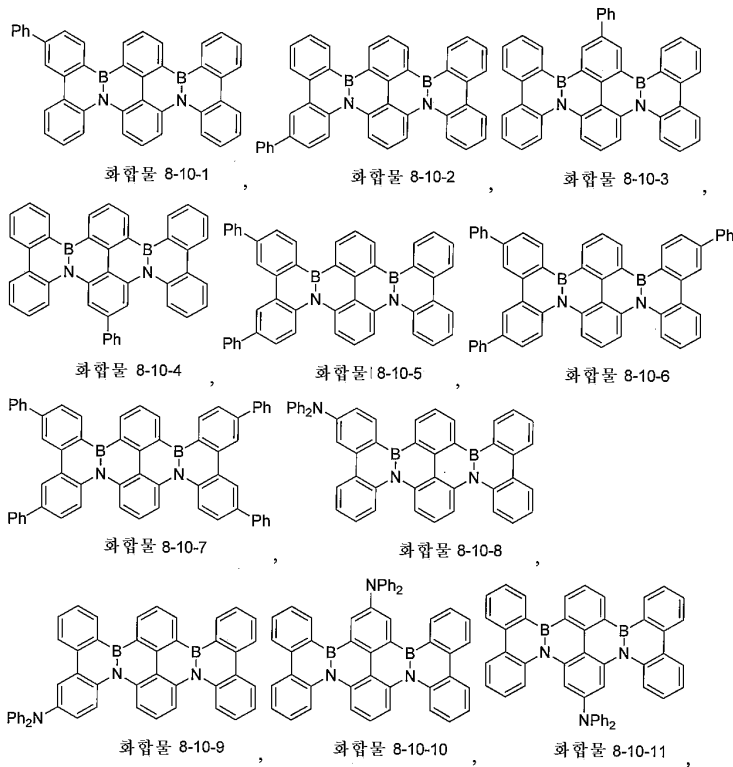
[0051]

[0052] 하기로 이루어진 군으로부터 선택된 화학식 II의 화합물인 붕소-질소 폴리방향족 화합물이 제공된다:

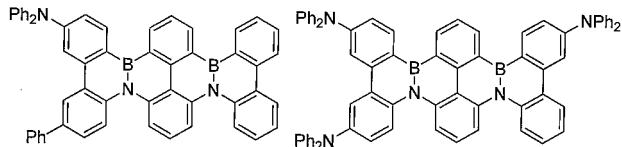


[0053]

[0054] 하기로 이루어진 군으로부터 선택된 화학식 III의 화합물인 붕소-질소 폴리방향족 화합물이 제공된다:

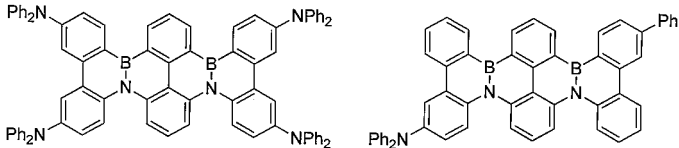


[0055]



화합물 8-10-12

화합물 8-10-13



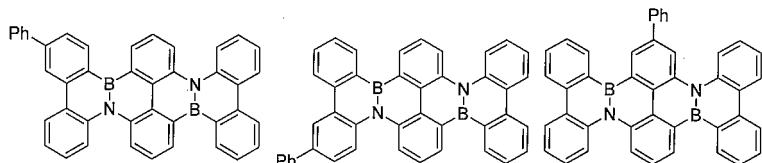
화합물 8-10-14

화합물 8-10-15

[0056]

[0057]

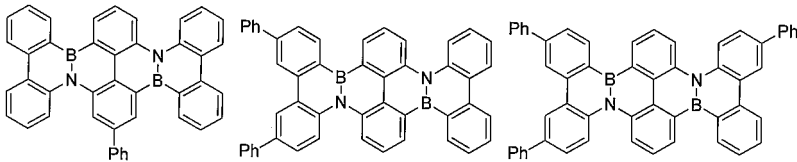
하기로 이루어진 군으로부터 선택된 화학식 IV의 화합물인 붕소-질소 폴리방향족 화합물이 제공된다:



화합물 8-11-1

화합물 8-11-2

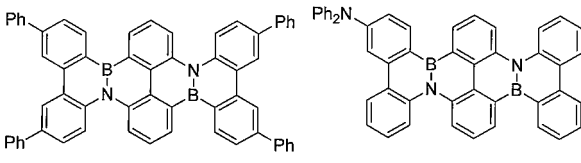
화합물 8-11-3



화합물 8-11-4

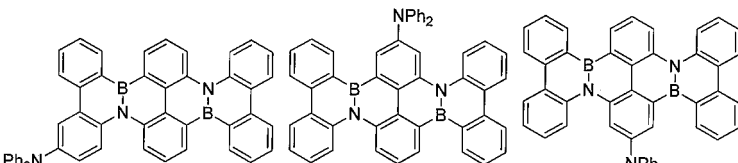
화합물 8-11-5

화합물 8-10-6



화합물 8-10-7

화합물 8-11-8

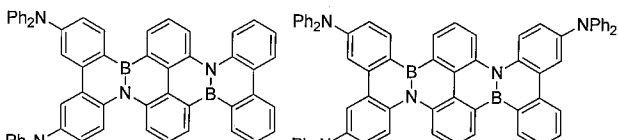


화합물 8-11-9

화합물 8-11-10

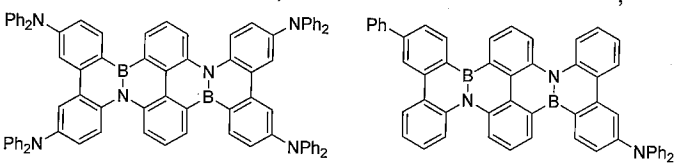
화합물 8-11-11

[0058]



화합물 8-11-12

화합물 8-11-13



화합물 8-11-14

화합물 8-11-15

[0059]

[0060]

또한, 디바이스가 제공된다. 디바이스는 애노드, 캐소드, 애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기층을 포함할 수 있으며, 유기층은 임의의 상기 실시양태의 붕소-질소 폴리방향족 화합물을 포함한다.

[0061]

본 발명은 디바이스의 임의의 특정한 유형으로 한정되지 않는다. 일부 실시양태에서, 디바이스는 소비재이다.

일부 실시양태에서, 디바이스는 유기 발광 디바이스(OLED)이다. 기타 실시양태에서, 디바이스는 지연 형광 디바이스이다. 기타 실시양태에서, 디바이스는 조명 패널이다.

[0062] 일부 실시양태에서, 디바이스의 유기층은 발광층이다. 일부 상기 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 발광 도펀트이다. 일부 기타 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 호스트이다.

[0063] 일부 실시양태에서, 디바이스의 유기층은 정공 주입층 또는 정공 수송층이다. 일부 기타 실시양태에서, 디바이스의 유기층은 전자 주입층 또는 전자 수송층이다. 일부 실시양태에서, 디바이스의 유기층은 엑시톤 차단층이다.

도면의 간단한 설명

- [0064] 도 1은 유기 발광 디바이스를 도시한다.
- 도 2는 별도의 전자 수송층을 갖지 않는 역전된 유기 발광 디바이스를 도시한다.
- 도 3은 본원에 개시된 바와 같이 붕소-질소 폴리방향족 화합물의 적어도 일부 실시양태를 나타내는 화학적 구조를 도시한다.
- 도 4는 화합물 4-1의 광발광(PL)을 도시한다. 용액 PL은 2-MeTHF 용액 중에서 얻었다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0065] 일반적으로, OLED는 애노드 및 캐소드 사이에 배치되어 이에 전기 접속되는 1종 이상의 유기층을 포함한다. 전류가 인가되면, 애노드는 정공을 유기층(들)에 주입하고, 캐소드는 전자를 주입한다. 주입된 정공 및 전자는 각각 반대로 하전된 전극을 향하여 이동한다. 전자 및 정공이 동일한 분자상에 편재화될 경우, 여기된 에너지 상태를 갖는 편재화된 전자-정공쌍인 "엑시톤"이 형성된다. 엑시톤이 광발광 메커니즘에 의하여 이완될 경우 광이 방출된다. 일부의 경우에서, 엑시톤은 엑시머 또는 엑시플렉스상에 편재화될 수 있다. 비-방사 메커니즘, 예컨대 열 이완도 또한 발생할 수 있으나, 일반적으로 바람직하지 않은 것으로 간주된다.

[0066] 초기 OLED는 예를 들면 미국 특허 제 4,769,292호에 개시된 바와 같은 단일항 상태에서부터 광("형광")을 방출하는 발광 분자를 사용하였으며, 상기 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. 형광 방출은 일반적으로 10 나노초 미만의 시간 기간으로 발생한다.

[0067] 보다 최근에는, 삼중항 상태에서부터의 광("인광")을 방출하는 발광 물질을 갖는 OLED가 예시되어 있다. 문헌 [Baldo et al., "Highly Efficient Phosphorescent Emission from Organic Electroluminescent Devices," *Nature*, vol. 395, 151-154, 1998 ("Baldo-I")] 및 [Baldo et al., "Very high-efficiency green organic light-emitting devices based on electrophosphorescence," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 75, No. 3, 4-6 (1999) ("Baldo-II")]을 참조하며, 이들 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. 인광은 참고로 포함되는 미국 특허 제7,279,704호의 컬럼 5-6에 보다 구체적으로 기재되어 있다.

[0068] 도 1은 유기 발광 디바이스(100)를 도시한다. 도면은 반드시 축척에 의하여 도시하지는 않았다. 디바이스(100)는 기관(110), 애노드(115), 정공 주입층(120), 정공 수송층(125), 전자 차단층(130), 발광층(135), 정공 차단층(140), 전자 수송층(145), 전자 주입층(150), 보호층(155), 캐소드(160) 및 차단층(170)을 포함할 수 있다. 캐소드(160)는 제1의 전도층(162) 및 제2의 전도층(164)을 갖는 화합물 캐소드이다. 디바이스(100)는 기재된 순서로 층을 증착시켜 제조될 수 있다. 이들 다양한 층뿐 아니라, 예시의 물질의 성질 및 기능은 참고로 포함되는 미국 특허 제7,279,704호의 컬럼 6-10에 보다 구체적으로 기재되어 있다.

[0069] 이들 각각의 층에 대한 더 많은 예도 이용 가능하다. 예를 들면 가요성 및 투명한 기관-애노드 조합은 미국 특허 제 5,844,363호에 개시되어 있으며, 이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. p-도핑된 정공 수송층의 예는 미국 특허 출원 공개 공보 제2003/0230980호에 개시된 바와 같이, 50:1의 몰비로 F₄-TCNQ로 도핑된 m-MTDATA이며, 이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. 발광 및 호스트 물질의 예는 미국 특허 제 6,303,238호(Thompson et al.)에 개시되어 있으며, 이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. n-도핑된 전자 수송층의 예는 미국 특허 출원 공개 공보 제2003/0230980호에 개시된 바와 같이, 1:1의 몰비로 Li로 도핑된 BPhen이고, 이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. 그 전문이 본원에 참고로 포함되는 미국 특허 제5,703,436호 및 제5,707,745호에는 적층된 투명, 전기전도성 스퍼터-증착된 ITO 층을 갖는 Mg:Ag와 같은 금속의 박층을 갖는 화합물 캐소드를 비롯한 캐소드의 예가 개시되어 있다. 차단층의 이론 및 용도는 미국 특허

제 6,097,147호 및 미국 특허 출원 공개 공보 제2003/0230980호에 보다 구체적으로 기재되어 있으며, 이들 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. 주입층의 예는 미국 특허 출원 공개 공보 제2004/0174116호에 제공되어 있으며, 이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. 보호층의 설명은 미국 특허 출원 공개 공보 제2004/0174116호에서 찾아볼 수 있으며, 이들 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다.

[0070] 도 2는 역전된 OLED(200)를 도시한다. 디바이스는 기관(210), 캐소드(215), 발광층(220), 정공 수송층(225) 및 애노드(230)를 포함한다. 디바이스(200)는 기재된 순서로 층을 적층시켜 제조될 수 있다. 가장 흔한 OLED 구조는 애노드의 위에 캐소드가 배치되어 있고 그리고 디바이스(200)가 애노드(230)의 아래에 캐소드(215)가 배치되어 있으므로, 디바이스(200)는 "역전된" OLED로 지칭될 수 있다. 디바이스(100)에 관하여 기재된 것과 유사한 물질이 디바이스(200)의 해당 층에 사용될 수 있다. 도 2는 디바이스(100)의 구조로부터 일부 층이 얼마나 생략될 수 있는지의 일례를 제공한다.

[0071] 도 1 및 도 2에 도시된 단순 적층된 구조는 비제한적인 예로서 제공하며, 본 발명의 실시양태는 다양한 기타의 구조와 관련하여 사용될 수 있는 것으로 이해하여야 한다. 기재된 특정한 물질 및 구조는 사실상 예시를 위한 것이며, 기타의 물질 및 구조도 사용될 수 있다. 작용성 OLED는 기재된 다양한 층을 상이한 방식으로 조합하여 달성될 수 있거나 또는 층은 디자인, 성능 및 비용 요인에 기초하여 전적으로 생략할 수 있다. 구체적으로 기재되지 않은 기타의 층도 또한 포함될 수 있다. 이들 구체적으로 기재된 층을 제외한 물질을 사용할 수 있다. 본원에 제공된 다수의 예가 단일 물질을 포함하는 것으로서 다양한 층을 기재하기는 하나, 물질, 예컨대 호스트 및 도펀트의 혼합물 또는 보다 일반적으로 혼합물을 사용할 수 있다. 또한, 층은 다수의 하부층을 가질 수 있다. 본원에서 다양한 층에 제시된 명칭은 엄격하게 제한하고자 하는 것은 아니다. 예를 들면, 디바이스(200)에서 정공 수송층(225)은 정공을 수송하며, 정공을 발광층(220)에 주입하며, 정공 수송층 또는 정공 주입층으로서 기재될 수 있다. 하나의 실시양태에서, OLED는 캐소드와 애노드 사이에 배치된 "유기층"을 갖는 것으로 기재될 수 있다. 이러한 유기층은 단일층을 포함할 수 있거나 또는 예를 들면 도 1 및 도 2와 관련하여 기재된 바와 같은 상이한 유기 물질의 복수의 층을 더 포함할 수 있다.

[0072] 구체적으로 기재하지 않은 구조 및 물질, 예컨대 미국 특허 제 5,247,190호(Friend et al.)에 기재된 바와 같은 중합체 물질(PLED)을 포함하는 OLED를 사용할 수 있으며, 이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. 추가의 예로서, 단일 유기층을 갖는 OLED를 사용할 수 있다. OLED는 예를 들면 미국 특허 제 5,707,745호(Forrest et al.)에 기재된 바와 같이 적층될 수 있으며, 이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다. OLED 구조는 도 1 및 도 2에 도시된 단순 적층된 구조로부터 벗어날 수 있다. 예를 들면, 기관은 미국 특허 제 6,091,195호(Forrest et al.)에 기재된 바와 같은 메사형(mesa) 구조 및/또는 미국 특허 제 5,834,893호(Bulovic et al.)에 기재된 피트형(pit) 구조와 같은 아웃-커플링(out-coupling)을 개선시키기 위한 각진 반사면을 포함할 수 있으며, 이들 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다.

[0073] 반대의 의미로 명시하지 않는 한, 다양한 실시양태의 임의의 층은 임의의 적절한 방법에 의하여 적층될 수 있다. 유기층의 경우, 바람직한 방법으로는 미국 특허 제6,013,982호 및 제6,087,196호(이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함됨)에 기재된 바와 같은 열 증발, 잉크-젯, 미국 특허 제 6,337,102호(Forrest et al.)(이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함됨)에 기재된 바와 같은 유기 증기상 증착(OVPD), 미국 특허 출원 제10/233,470호(이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함됨)에 기재된 바와 같은 유기 증기 제트 프린팅(OVJP)에 의한 증착을 들 수 있다. 기타의 적절한 증착 방법은 스핀 코팅 및 기타의 용액계 공정을 포함한다. 용액계 공정은 질소 또는 불활성 대기 중에서 실시되는 것이 바람직하다. 기타의 층의 경우, 바람직한 방법은 열 증발을 포함한다. 바람직한 패턴 형성 방법은 마스크를 통한 증착, 미국 특허 제6,294,398호 및 제 6,468,819호(이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함됨)에 기재된 바와 같은 냉간 용접 및, 잉크-젯 및 OVJD와 같은 일부 증착 방법과 관련된 패턴 형성을 포함한다. 증착시키고자 하는 물질은 특정한 증착 방법과 상용성을 갖도록 변형될 수 있다. 예를 들면, 분지형 또는 비분지형, 바람직하게는 3개 이상의 탄소를 포함하는 알킬 및 아릴기와 같은 치환기는 이의 용액 가공의 처리 능력을 향상시키기 위하여 소분자에 사용될 수 있다. 20개 이상의 탄소를 갖는 치환기를 사용할 수 있으며, 3 내지 20개의 탄소가 바람직한 범위이다. 비대칭 구조를 갖는 물질은 대칭 구조를 갖는 것보다 더 우수한 용액 가공성을 가질 수 있는데, 비대칭 물질은 재결정화되는 경향이 낮을 수 있기 때문이다. 텐드리머 치환기는 용액 가공을 처리하는 소분자의 능력을 향상시키기 위하여 사용될 수 있다.

[0074] 본 발명의 실시양태에 의하여 제조된 디바이스는 차단층을 추가로 임의로 포함할 수 있다. 차단층의 하나의 목적은 전극 및 유기층이 수분, 증기 및/또는 기체 등을 포함하는 환경에서 유해한 종에 대한 노출로 인하여 손상되지 않도록 한다. 차단층은 기관의 위에서, 기관의 아래에서 또는 기관의 옆에서, 전극 또는, 엣지를 포함하는

디바이스의 임의의 기타 부분의 위에서 증착될 수 있다. 차단층은 단일층 또는 다중층을 포함할 수 있다. 차단층은 각종 공지의 화학적 증착 기법에 의하여 형성될 수 있으며 그리고 복수의 상을 갖는 조성물뿐 아니라 단일 상을 갖는 조성물을 포함할 수 있다. 임의의 적절한 물질 또는 물질의 조합을 차단층에 사용할 수 있다. 차단층은 무기 또는 유기 화합물 또는 둘다를 혼입할 수 있다. 바람직한 차단층은 미국 특허 제7,968,146호, PCT 특허 출원 번호 PCT/US2007/023098 및 PCT/US2009/042829에 기재된 바와 같은 중합체 물질 및 비-중합체 물질의 혼합물을 포함하며, 이들 문헌의 개시내용은 본원에 그 전문이 참고로 포함된다. "혼합물"을 고려하면, 차단층을 포함하는 전술한 중합체 및 비-중합체 물질은 동일한 반응 조건하에서 및/또는 동일한 시간에서 증착되어야만 한다. 중합체 대 비-중합체 물질의 중량비는 95:5 내지 5:95 범위내일 수 있다. 중합체 대 비-중합체 물질은 동일한 전구체 물질로부터 생성될 수 있다. 한 예에서, 중합체 대 비-중합체 물질의 혼합물은 본질적으로 중합체 규소 및 무기 규소로 이루어진다.

[0075] 본 발명의 실시양태에 의하여 제조되는 디바이스는 평판 패널 디스플레이, 컴퓨터 모니터, 의료용 모니터, 텔레비전, 광고판, 실내 또는 옥외 조명 및/또는 시그널링을 위한 라이트, 헤드업 디스플레이, 완전 투명 디스플레이, 플렉시블 디스플레이, 레이저 프린터, 전화기, 휴대폰, 개인용 정보 단말기(PDA), 랩탑 컴퓨터, 디지털 카메라, 캠코더, 뷰파인더, 마이크로디스플레이, 자동차, 거대 월, 극장 또는 스타디움 스크린 또는 간판을 비롯한 다양한 소비재에 투입될 수 있다. 패시브 매트릭스 및 액티브 매트릭스를 비롯한 다양한 조절 메커니즘을 사용하여 본 발명에 의한 디바이스를 조절할 수 있다. 다수의 디바이스는 사람에게 안락감을 주는 온도 범위, 예컨대 18℃ 내지 30℃, 더욱 바람직하게는 실온(20℃ 내지 25℃)에서 사용하고자 한다.

[0076] 본원에 기재된 물질 및 구조는 OLED를 제외한 디바이스에서의 적용예를 가질 수 있다. 예를 들면, 기타의 광전자 디바이스, 예컨대 유기 태양 전지 및 유기 광검출기는 물질 및 구조를 사용할 수 있다. 보다 일반적으로, 유기 디바이스, 예컨대 유기 트랜지스터는 물질 및 구조를 사용할 수 있다.

[0077] 용어 할로, 할로겐, 알킬, 시클로알킬, 알케닐, 알킬닐, 아릴알킬, 헤테로시클릭 기, 아릴, 방향족 기 및 헤테로아릴은 당업계에 공지되어 있으며, 미국 특허 제7,279,704호의 컬럼 31-32에서 정의되어 있으며, 이 특허 문헌은 그 전문이 본원에 참고로 포함된다.

[0078] 붕소-질소 폴리방향족 화합물이 제공된다. 이러한 물질은 지연 형광 디바이스와 같은 형광 디바이스에서 발광체로서 사용될 수 있다. 이들은 또한 단색 및 다색 디바이스 모두를 비롯한 인광 또는 형광 디바이스에서 호스트 물질 또는 하전 수송 물질로서 사용될 수 있다. 이러한 물질은 증기 증발 또는 용액 처리될 수 있다. OLED 제조에서의 더욱 도전적인 문제 중 하나는 청색 OLED에 대한 효율 및 안정성을 달성하는 것과 관련되어 있다. 안정한 청색 OLED를 달성하기 위하여, 폴리방향족 화합물, 예컨대 안트라센, 크리센, 피렌 및 이의 유도체가 종종 사용되는데, 이는 폴리방향족이 이의 높은 π-공액에도 불구하고 청색 영역에서 발광될 수 있기 때문이다. 높은 π-공액은 물질이 산화 또는 환원될 때 하전을 안정화시키는데 사용될 수 있다. 이러한 성질은 이들 화합물이 OLED 사용에 적절하도록 한다. 그러나, 이들 물질은 순수하게는 형광 물질이며, 이는 최대 디바이스 효율이 단일항 여기 비율, 즉 약 25%로 제한된다는 것을 의미한다. 삼중항-삼중항 소멸로부터 발생하는 P-타입 지연 형광은 이들 물질을 사용하는 일부 디바이스에서 존재할 수 있으며, 이는 순수하게 형광 OLED에 대한 이론적 한계치보다 더 높은 효율을 초래한다. 그럼에도 불구하고, 삼중항-삼중항 소멸은 2개의 삼중항 엑시톤으로부터 기껏해야 하나의 단일항 엑시톤을 생성할 수 있을 뿐이다. 그래서, 디바이스 효율이 여전히 제한된다. 다른 한편으로, 예를 들면 단일항으로의 삼중항 열 전환을 통한 E-타입 지연 형광을 사용할 수 있을 경우, 삼중항 엑시톤의 손실이 없어서 전계발광 효율이 개선될 수 있다. 단일항으로의 삼중항 열 전환을 달성하기 위하여, 작은 S1-T1 갭이 일반적으로 요구된다. 일부 크게 분극된 화합물은 작은 S1-T1 갭을 나타낼 수 있으나, 이러한 화합물은 이의 극성이 안정성 및 양자 효율을 감소시킬 수 있어서 OLED에 사용하기에 적절하지 않을 수 있다. 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 외부 π-시스템을 다소 분리시킬 수 있으며 그리고 공명을 향상시킬 수 있는, 고리(들)의 중심에서 감소된 방향족 특성으로 인한 작은 S1-T1 갭을 가질 수 있다. 이는 에너지, 특히 삼중항 에너지에서의 증가를 초래할 수 있다. 그러나, 전체 폴리방향족 π-공액은 여전히 하전을 안정화시킬 수 있으며 그리고 높은 안정성을 초래할 수 있다.

[0079] 하나 이상의 방향족 고리 또는 융합 방향족 고리에 임의로 융합된 [1,2]아자보리노[1,2-a][1,2]아자보린



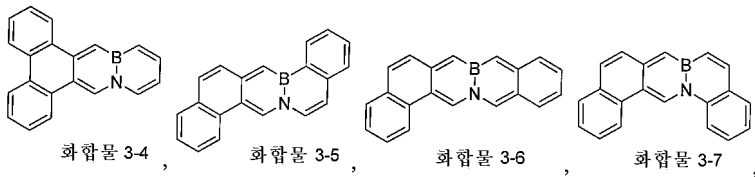
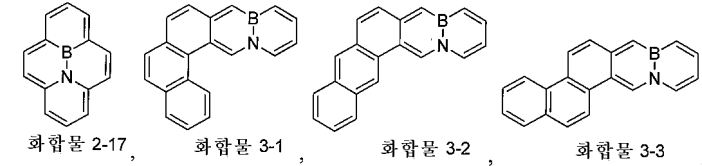
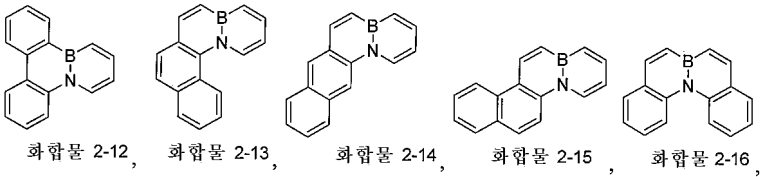
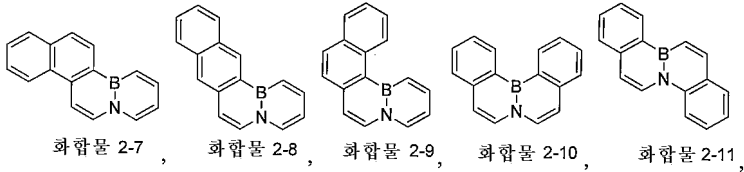
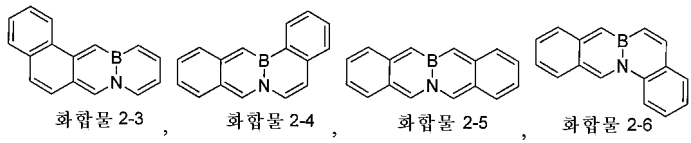
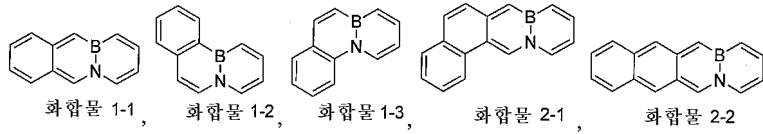
을 포함하는 융합 방향족 고리계를 가지며, 융합 방향족 고리계는 하나 이상의 치환기 R로 치환되며, 이 치환기는 방향족 고리계에 융합되지 않으며, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알킬닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술폰, 술폰, 술폰, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어

진 군으로부터 선택되며;

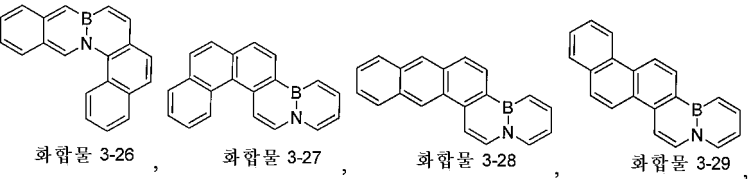
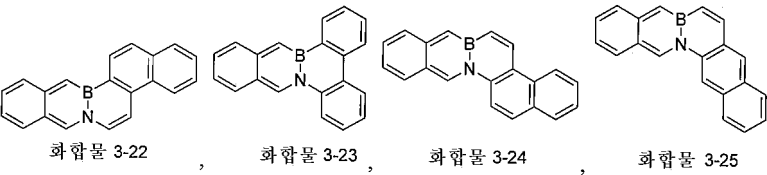
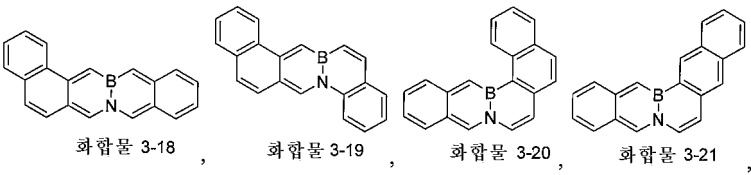
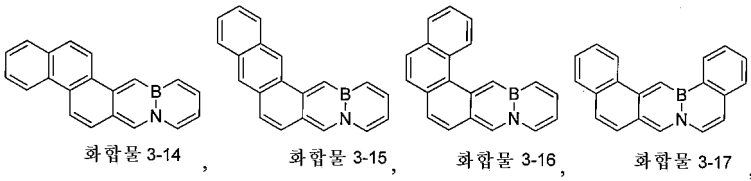
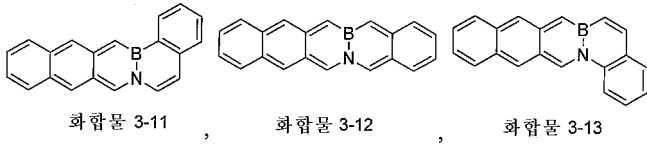
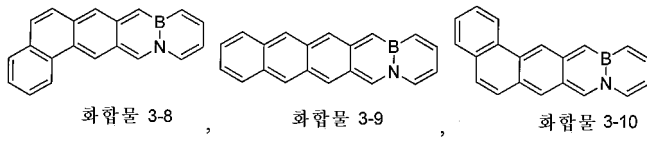
[0080] 여기서 임의의 2개의 인접하는 치환기 R은 임의로 결합되어 1종 이상의 비-방향족 고리를 형성하는 붕소-질소 폴리방향족 화합물을 포함하는 신규한 유형의 물질이 제공된다.

[0081] 화합물에서의 치환(들)은 전자 성질, 예컨대 흡수, 발광, HOMO/LUMO 레벨 및 열 성질, 예컨대 용점, 증발 온도 등을 조절할 수 있다. 예를 들면, 도 4에 도시한 바와 같이, 화합물 4-1의 발광은 주로 UV 영역에 있다. 시스템에서의 증가된 π -공액을 제공하는 페닐, 비페닐, 디페닐아미노 및/또는 N-카르바졸릴 기로의 치환에 의한 적색 이동은 가시 영역에서의 발광을 초래할 수 있으며, 이는 화합물이 OLED에서 발광체로서 유용하게 한다. 치환은 또한 용해도를 증가시킬 수 있으며, 이는 화합물이 용액 가공된 디바이스에서 유용하게 할 수 있다.

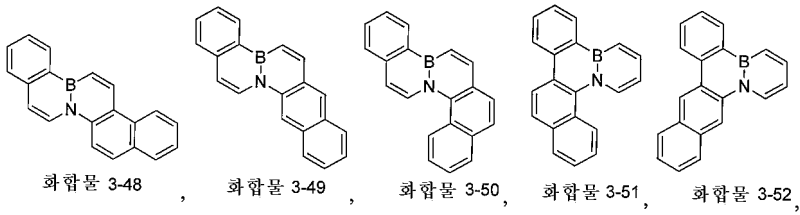
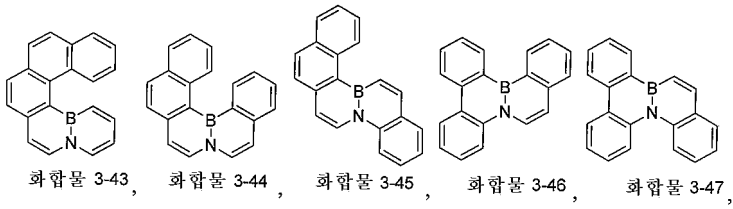
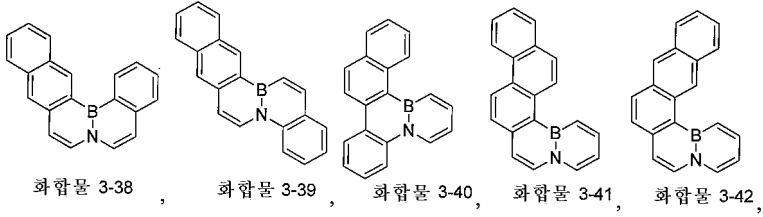
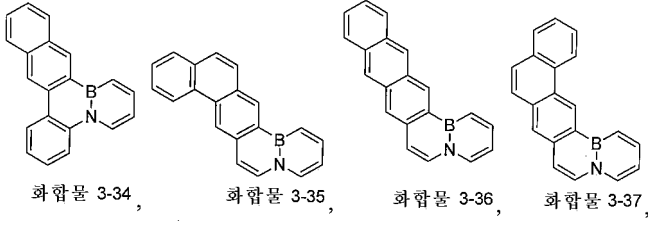
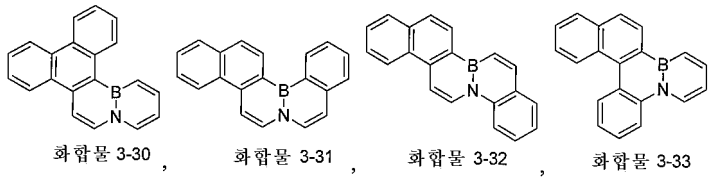
[0082] 일부 상기 실시양태에서, 융합 방향족 고리계는 하기로 이루어진 군으로부터 선택되며:



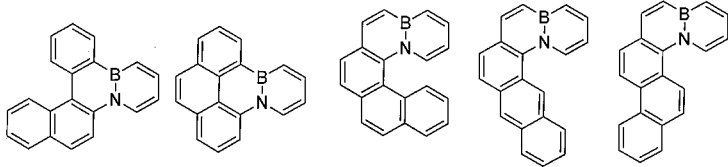
[0083]



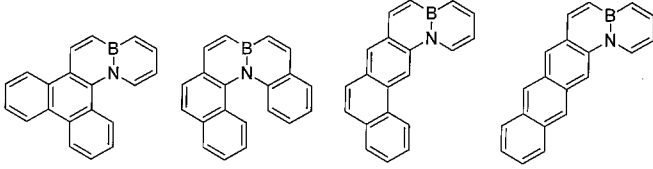
[0084]



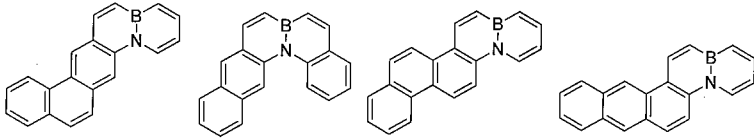
[0085]



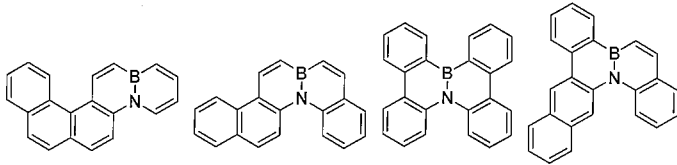
화합물 3-53, 화합물 3-54, 화합물 3-55, 화합물 3-56, 화합물 3-57,



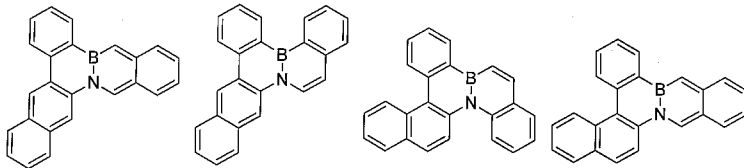
화합물 3-58, 화합물 3-59, 화합물 3-60, 화합물 3-61,



화합물 3-62, 화합물 3-63, 화합물 3-64, 화합물 3-65,

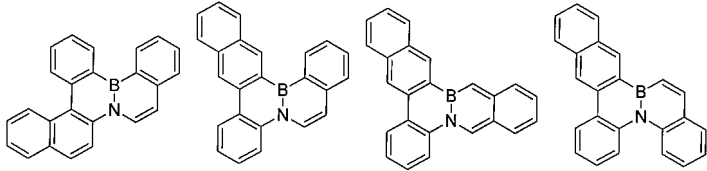


화합물 3-66, 화합물 3-67, 화합물 4-1, 화합물 4-2,

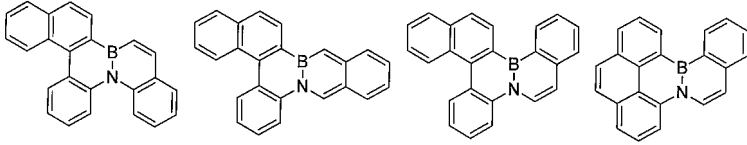


화합물 4-3, 화합물 4-4, 화합물 4-5, 화합물 4-6,

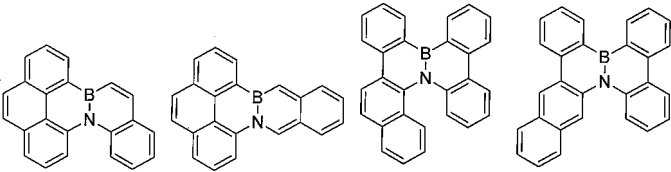
[0086]



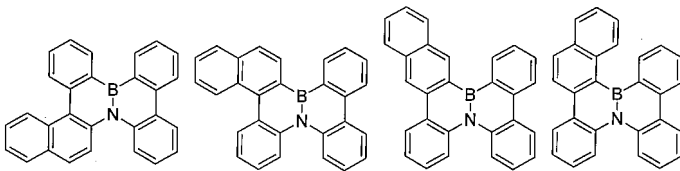
화합물 4-7 , 화합물 4-8 , 화합물 4-9 , 화합물 4-10 ,



화합물 4-11 , 화합물 4-12 , 화합물 4-13 , 화합물 4-14 ,

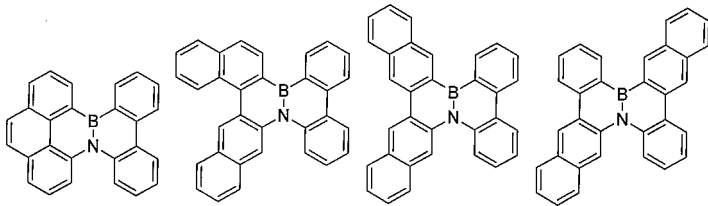


화합물 4-15 , 화합물 4-16 , 화합물 5-1 , 화합물 5-2 ,

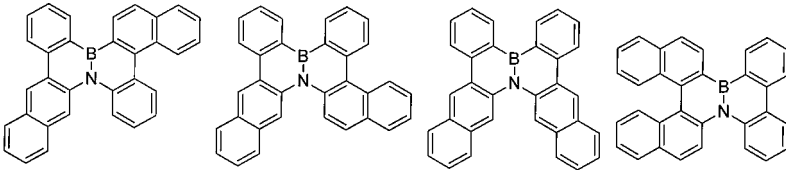


화합물 5-3 , 화합물 5-4 , 화합물 5-5 , 화합물 5-6 ,

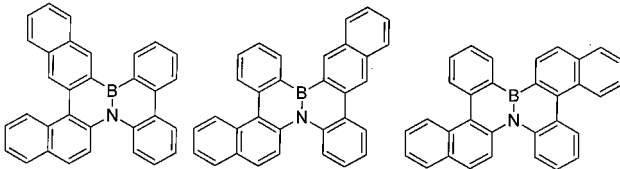
[0087]



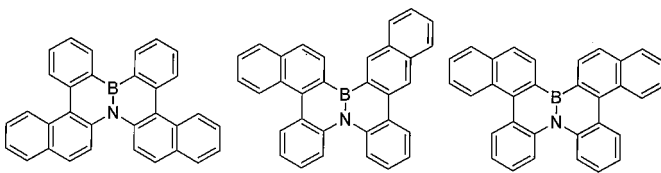
화합물 5-7 , 화합물 6-1 , 화합물 6-2 , 화합물 6-3 ,



화합물 6-4 , 화합물 6-5 , 화합물 6-6 , 화합물 6-7 ,

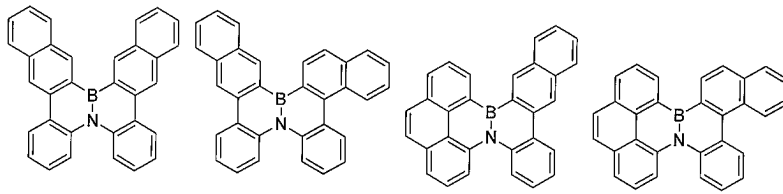


화합물 6-8 , 화합물 6-9 , 화합물 6-10 ,

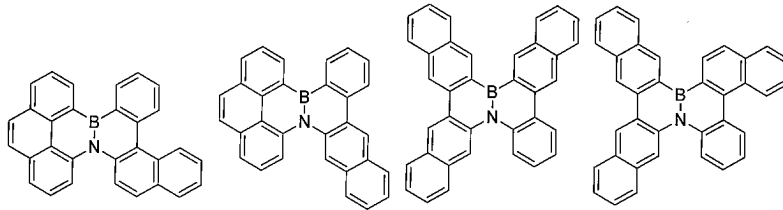


화합물 6-11 , 화합물 6-12 , 화합물 6-13 ,

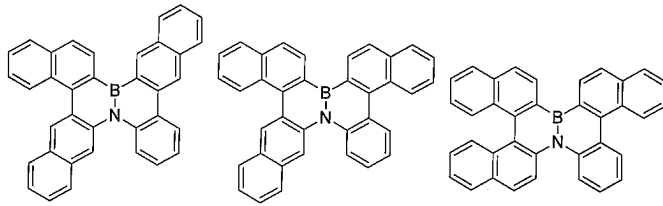
[0088]



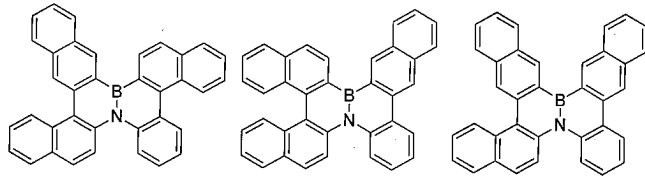
화합물 6-14 , 화합물 6-15 , 화합물 6-16 , 화합물 6-17 ,



화합물 6-18 , 화합물 6-19 , 화합물 7-1 , 화합물 7-2 ,

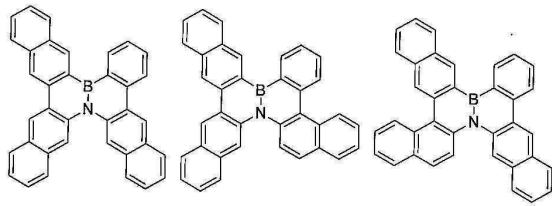


화합물 7-3 , 화합물 7-4 , 화합물 7-5 ,

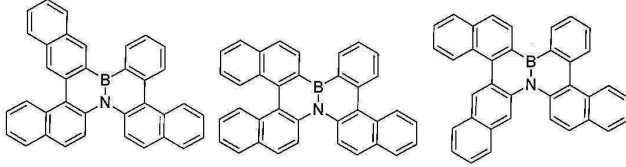


화합물 7-6 , 화합물 7-7 , 화합물 7-8 ,

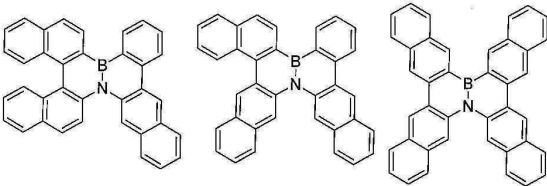
[0089]



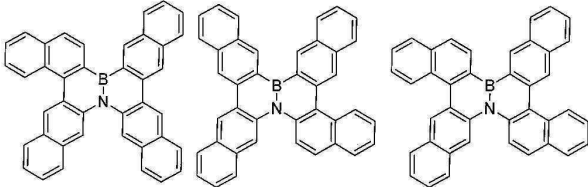
화합물 7-8 , 화합물 7-9 , 화합물 7-10 ,



화합물 7-11 , 화합물 7-12 , 화합물 7-13 ,

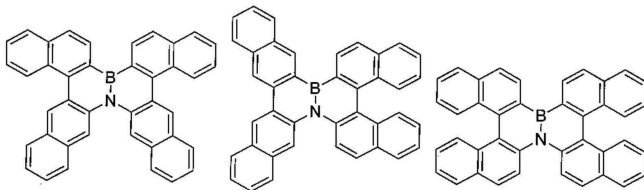


화합물 7-14 , 화합물 7-15 , 화합물 8-1 ,

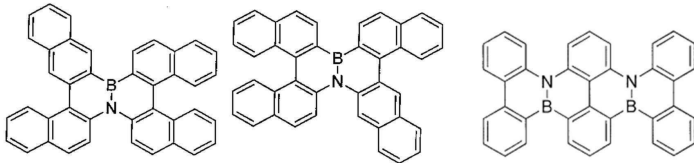


화합물 8-2 , 화합물 8-3 , 화합물 8-4 ,

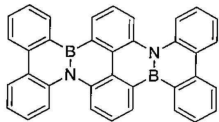
[0090]



화합물 8-5 , 화합물 8-6 , 화합물 8-7 ,



화합물 8-8 , 화합물 8-9 , 화합물 8-10 및



화합물 8-11

[0091]

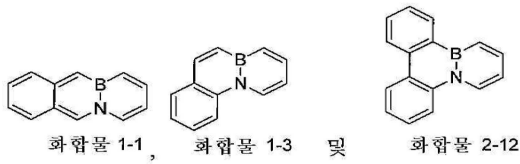
[0092]

여기서 융합 방향족 고리계는 하나 이상의 치환기 R로 치환되며, 이 치환기는 방향족 고리계에 융합되지 않으며, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술폰닐, 술피닐, 술포닐, 포스포노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택되며; 여기서 임의의 2개의 인접하는 치환기 R은 임의로 결합되어 1종 이상의 비-방향족 고리를 형성한다.

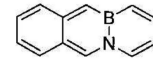
[0093]

일부의 추가의 상기 실시양태에서, 융합 방향족 고리계는 각각 하나 이상의 치환기 R로 치환된 하기로 이루어진 군으로부터 선택되며, 이 치환기는 방향족 고리계에 융합되지 않으며, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬,

헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술폰닐, 술피닐, 술폰닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택되며; 여기서 임의의 2개의 인접하는 치환기 R은 임의로 결합되어 1종 이상의 비-방향족 고리를 형성한다:



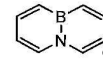
[0094]



[0095]

일부 실시양태에서, 융합 방향족 고리계는 하나 이상의 치환기 R로 치환된 화합물 1-b이며, 이 치환기는 방향족 고리계에 융합되지 않으며, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술폰닐, 술피닐, 술폰닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택되며; 여기서 임의의 2개의 인접하는 치환기 R은 임의로 결합되어 1종 이상의 비-방향족 고리를 형성한다.

[0096]



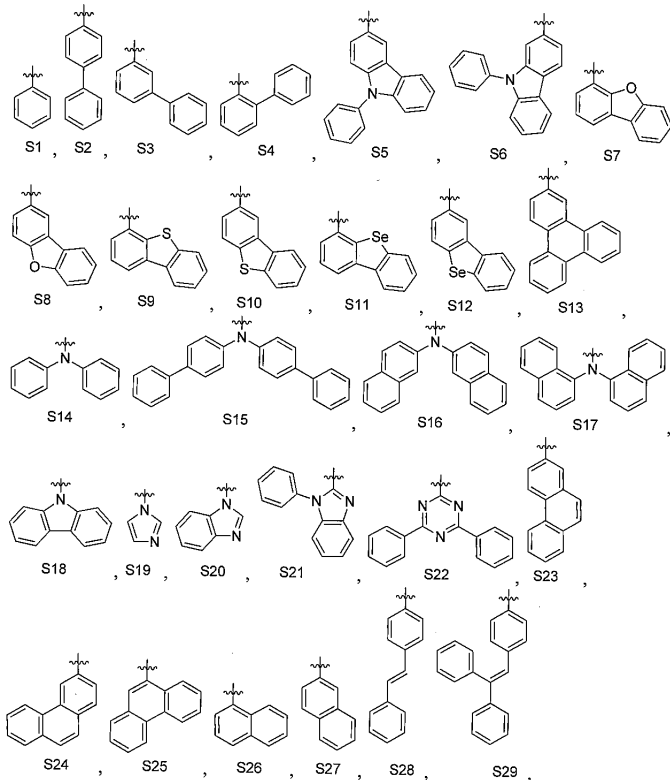
일부 실시양태에서, 융합 방향족 고리계는 하나 이상의 치환기 R로 치환된 이며, 이 치환기는 방향족 고리계에 융합되지 않으며, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술폰닐, 술피닐, 술폰닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택되며; 여기서 임의의 2개의 인접하는 치환기 R은 임의로 결합되어 1종 이상의 비-방향족 고리를 형성한다.

[0097]

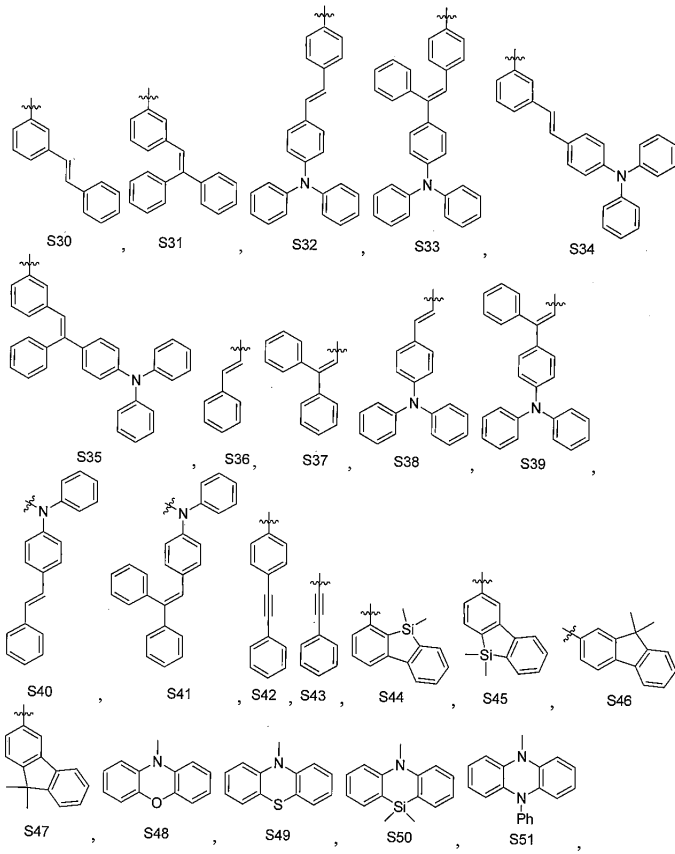
본 발명의 일부 실시양태에서, 치환기 R은 알킬, 시클로알킬, 아미노, 실릴, 아릴, 헤테로아릴 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0098]

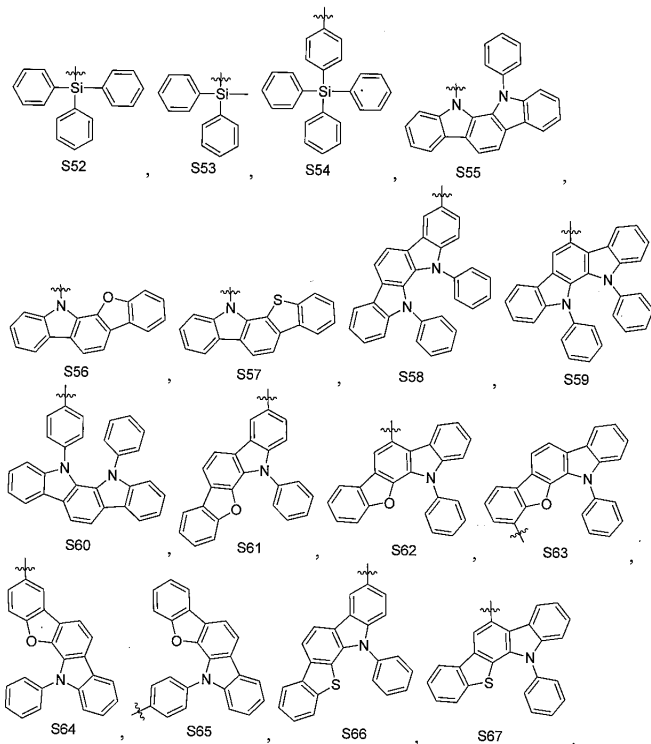
본 발명의 일부 실시양태에서, 치환기 R은 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다:



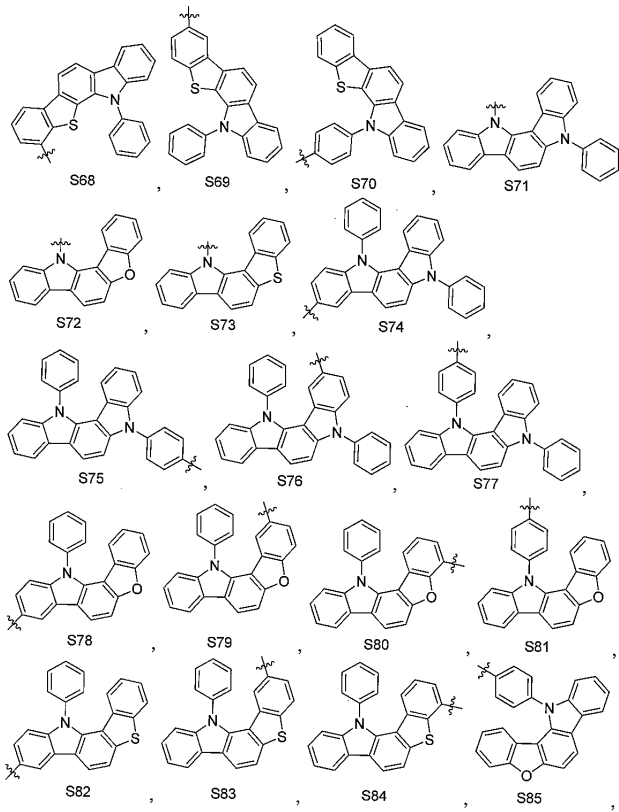
[0099]



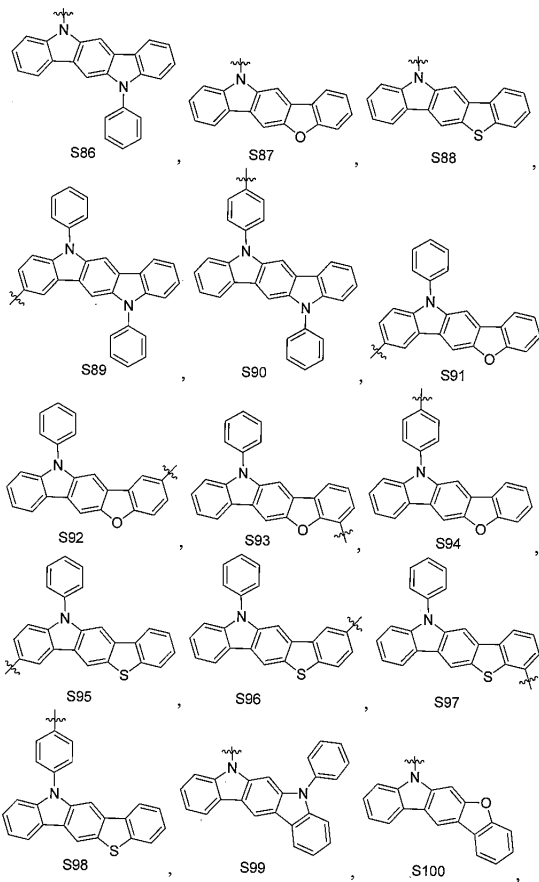
[0100]



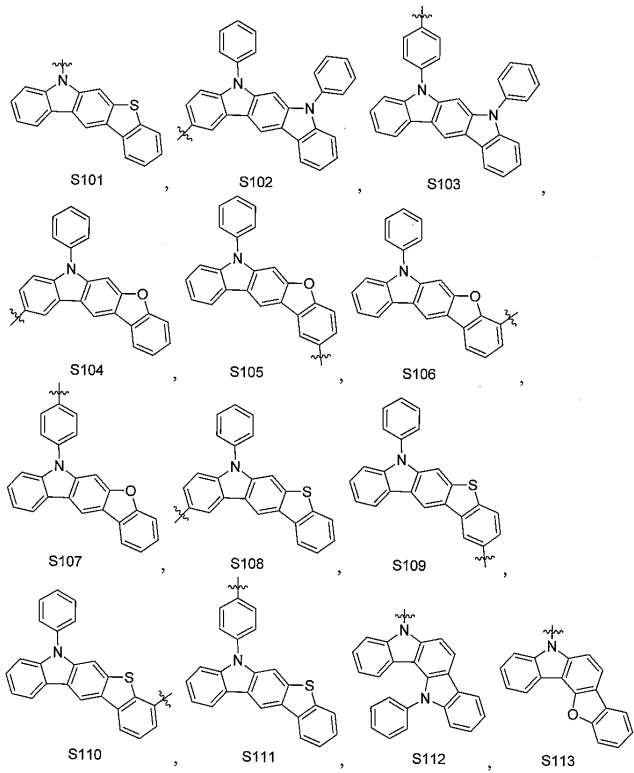
[0101]



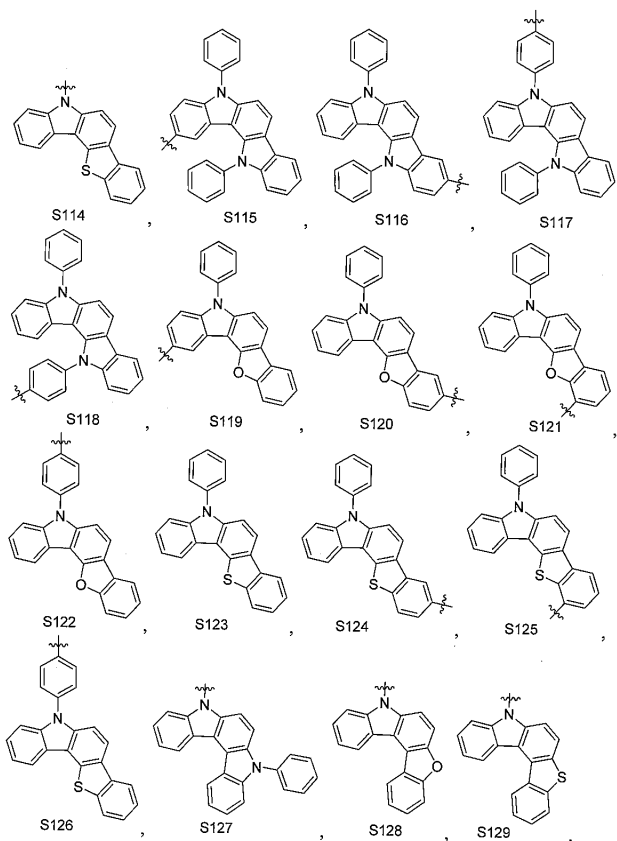
[0102]



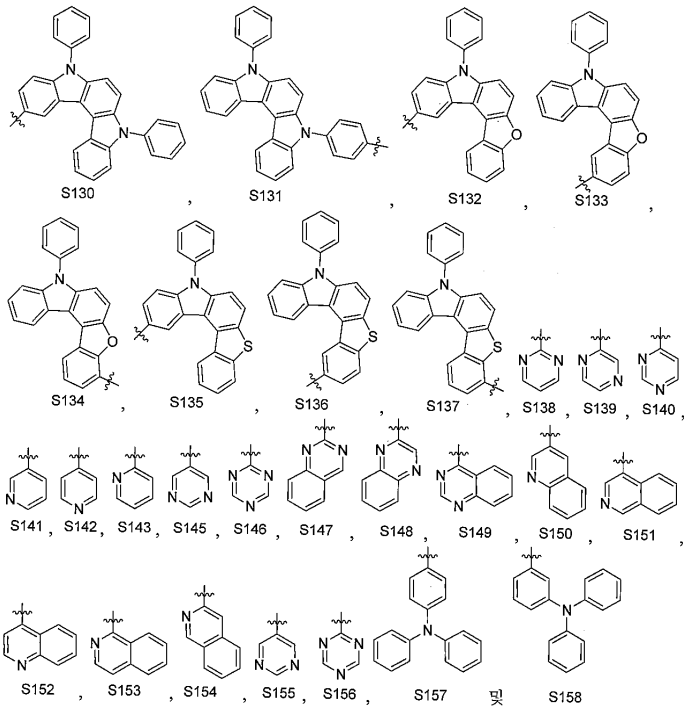
[0103]



[0104]



[0105]



[0106]

[0107]

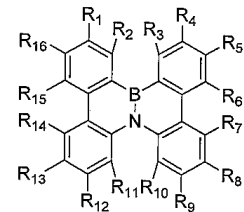
일부 실시양태에서, 임의의 상기 치환체는 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술폰닐, 술피닐, 술폰닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환기로 임의로 추가로 치환된다.

[0108]

일부 상기 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 하기 화학식 II, 화학식 III 또는 화학식 IV의 화합물이다:

[0109]

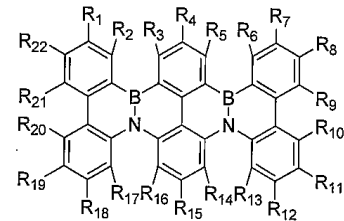
<화학식 II>



[0110]

[0111]

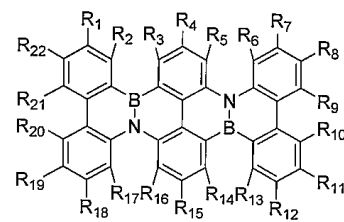
<화학식 III>



[0112]

[0113]

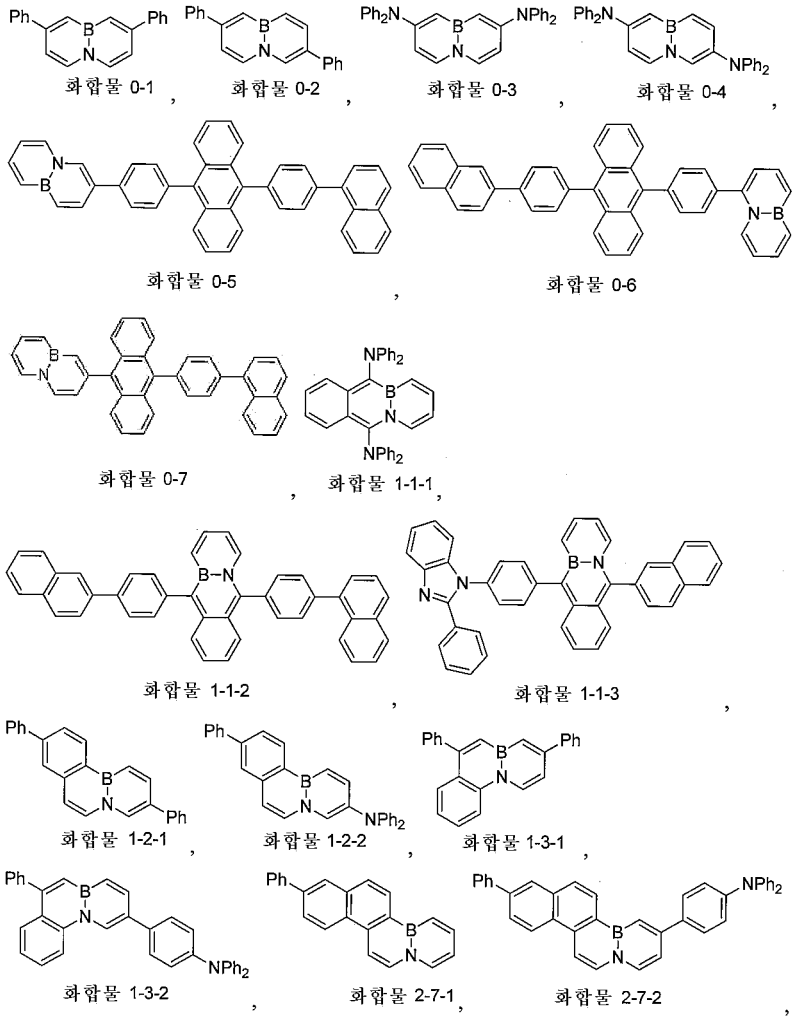
<화학식 IV>



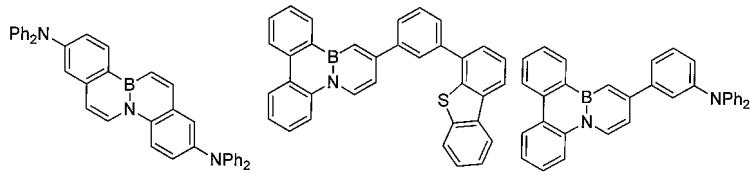
[0114]

- [0115] 상기 화학식에서, R_1 내지 R_{22} 는 수소, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술폰닐, 술피닐, 술폰닐, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 각각 독립적으로 선택되며, 여기서 임의의 2개의 인접하는 치환기는 임의로 결합되어 고리를 형성한다. 일부 상기 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 화학식 II의 화합물이다. 기타 상기 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 화학식 III의 화합물이다. 기타 상기 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 화학식 IV의 화합물이다. 일부 실시양태에서, 치환기 R_1 내지 R_{22} 는 아릴, 헤테로아릴 및 NR_aR_b 로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되며; R_a 및 R_b 는 추가로 치환될 수 있는 아릴 또는 헤테로아릴이다.
- [0116] 일부 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 화학식 II의 화합물이며, R_5 , R_8 , R_{13} 또는 R_{16} 중 하나 이상이 수소 또는 중수소가 아니다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R_5 , R_8 , R_{13} 또는 R_{16} 중 하나 이상이 아릴, 헤테로아릴 또는 NR_aR_b 이고; R_a 및 R_b 는 추가로 치환될 수 있는 아릴 또는 헤테로아릴이다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R_5 및 R_{13} 는 페닐 또는 NR_aR_b 이다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R_a 및 R_b 는 페닐이다.
- [0117] 일부 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 화학식 II의 화합물이며, R_1 , R_4 , R_9 또는 R_{12} 중 하나 이상은 수소 또는 중수소가 아니다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R_1 , R_4 , R_9 또는 R_{12} 중 하나 이상은 아릴, 헤테로아릴 또는 NR_aR_b 이고; R_a 및 R_b 는 추가로 치환될 수 있는 아릴 또는 헤테로아릴이다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R_1 및 R_9 는 페닐 또는 NR_aR_b 이다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R_a 및 R_b 는 페닐이다.
- [0118] 일부 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 화학식 III 또는 화학식 IV의 화합물이며, R_8 , R_{11} , R_{19} 또는 R_{22} 중 하나 이상은 수소 또는 중수소가 아니다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R_8 , R_{11} , R_{19} 또는 R_{22} 중 하나 이상은 아릴, 헤테로아릴 또는 NR_aR_b 이고; R_a 및 R_b 는 추가로 치환될 수 있는 아릴 또는 헤테로아릴이다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R_8 및 R_{19} 는 페닐 또는 NR_aR_b 이다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R_a 및 R_b 는 페닐이다.
- [0119] 일부 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 화학식 II의 화합물이며, R_1 , R_4 , R_7 , R_{12} , R_{15} 또는 R_{18} 중 하나 이상은 수소 또는 중수소가 아니다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R_1 , R_4 , R_7 , R_{12} , R_{15} 또는 R_{18} 중 하나 이상은 아릴, 헤테로아릴 또는 NR_aR_b 이고; R_a 및 R_b 는 추가로 치환될 수 있는 아릴 또는 헤테로아릴이다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R_1 및 R_{12} 는 페닐 또는 NR_aR_b 이다. 일부의 추가의 상기 실시양태에서, R_a 및 R_b 는 페닐이다.

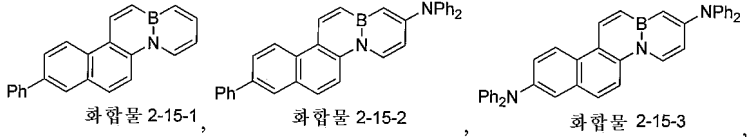
[0120] 하기로 이루어진 군으로부터 선택된 붕소-질소 폴리방향족 화합물이 제공된다:



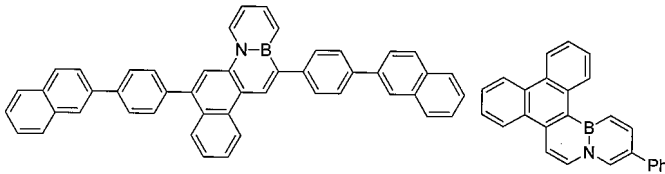
[0121]



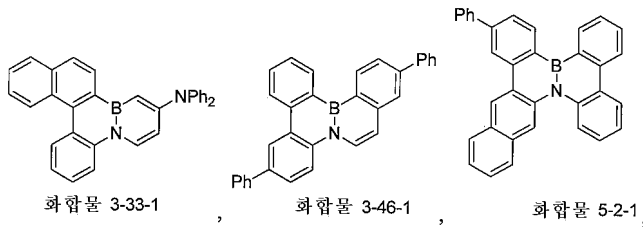
화합물 2-11-1 , 화합물 2-12-1 , 화합물 2-12-2 ,



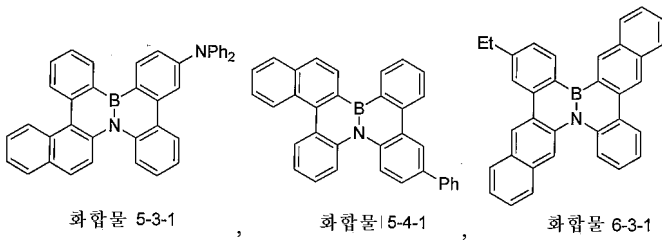
화합물 2-15-1 , 화합물 2-15-2 , 화합물 2-15-3 ,



화합물 2-15-4 , 화합물 3-30-1 ,

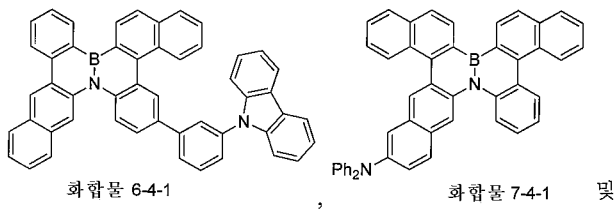


화합물 3-33-1 , 화합물 3-46-1 , 화합물 5-2-1 ,

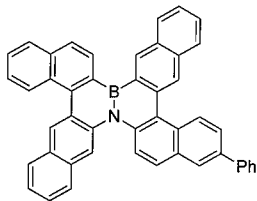


화합물 5-3-1 , 화합물 5-4-1 , 화합물 6-3-1 ,

[0122]



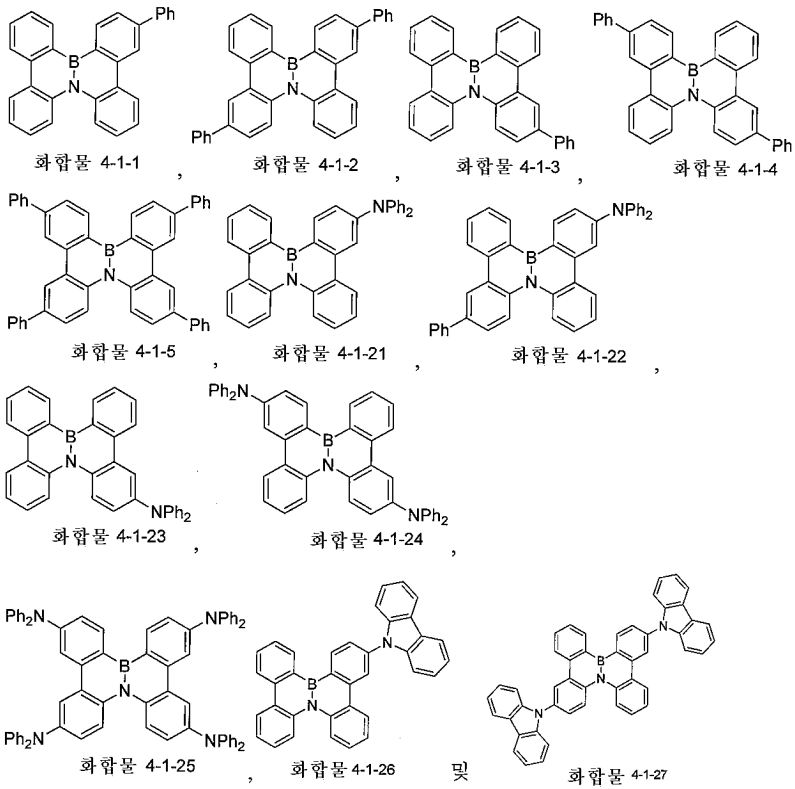
화합물 6-4-1 , 화합물 7-4-1 및



화합물 8-4-1

[0123]

[0124] 화학식 II의 화합물이며 그리고, 하기로 이루어진 군으로부터 선택된 붕소-질소 폴리방향족 화합물이 제공된다:



[0125]

[0126] 화학식 III의 화합물이며 그리고, R₁ 내지 R₁₆은 하기 차트에 제시된 값을 갖는 붕소-질소 폴리방향족 화합물이 제공된다. S₁, S₂ 등에 대한 언급은 상기 단락에서 상기 확인된 치환기를 지칭한다:

화합물	R ₁	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	R ₆	R ₇	R ₈	R ₉	R ₁₀	R ₁₁	R ₁₂	R ₁₃	R ₁₄	R ₁₅	R ₁₆
4-1-1	H	H	H	H	S1	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-2	H	H	H	H	S1	H	H	H	H	H	H	H	S1	H	H	H
4-1-3	H	H	H	H	H	H	H	S1	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-4	H	H	H	H	H	H	H	S1	H	H	H	H	H	H	H	S1
4-1-5	H	H	H	H	S1	H	H	S1	H	H	H	H	S1	H	H	S1
4-1-6	H	H	H	H	S7	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-7	H	H	H	H	S7	H	H	H	H	H	H	H	S7	H	H	H
4-1-8	H	H	H	H	H	H	H	S7	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-9	H	H	H	H	H	H	H	S7	H	H	H	H	H	H	H	S7
4-1-10	H	H	H	H	S7	H	H	S7	H	H	H	H	S7	H	H	S7
4-1-11	H	H	H	H	S9	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-12	H	H	H	H	S9	H	H	H	H	H	H	H	S9	H	H	H
4-1-13	H	H	H	H	H	H	H	S9	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-14	H	H	H	H	H	H	H	S9	H	H	H	H	H	H	H	S9

[0127]

회합물	R ₁	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	R ₆	R ₇	R ₈	R ₉	R ₁₀	R ₁₁	R ₁₂	R ₁₃	R ₁₄	R ₁₅	R ₁₆
4-1-15	H	H	H	H	S9	H	H	S9	H	H	H	H	S9	H	H	S9
4-1-16	H	H	H	H	S13	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-17	H	H	H	H	S13	H	H	H	H	H	H	H	S13	H	H	H
4-1-18	H	H	H	H	H	H	H	S13	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-19	H	H	H	H	H	H	H	S13	H	H	H	H	H	H	H	S13
4-1-20	H	H	H	H	S13	H	H	S13	H	H	H	H	S13	H	H	S13
4-1-21	H	H	H	H	S14	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-22	H	H	H	H	S14	H	H	H	H	H	H	H	S14	H	H	H
4-1-23	H	H	H	H	H	H	H	S14	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-24	H	H	H	H	H	H	H	S14	H	H	H	H	H	H	H	S14
4-1-25	H	H	H	H	S14	H	H	S14	H	H	H	H	S14	H	H	S14
4-1-26	H	H	H	H	S18	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-27	H	H	H	H	S18	H	H	H	H	H	H	H	S18	H	H	H
4-1-28	H	H	H	H	H	H	H	S18	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-29	H	H	H	H	H	H	H	S18	H	H	H	H	H	H	H	S18
4-1-30	H	H	H	H	S18	H	H	S18	H	H	H	H	S18	H	H	S18
4-1-31	H	H	H	H	S21	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-32	H	H	H	H	S21	H	H	H	H	H	H	H	S21	H	H	H
4-1-33	H	H	H	H	H	H	H	S21	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-34	H	H	H	H	H	H	H	S21	H	H	H	H	H	H	H	S21
4-1-35	H	H	H	H	S21	H	H	S21	H	H	H	H	S21	H	H	S21
4-1-36	H	H	H	H	S29	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-37	H	H	H	H	S29	H	H	H	H	H	H	H	S29	H	H	H
4-1-38	H	H	H	H	H	H	H	S29	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-39	H	H	H	H	H	H	H	S29	H	H	H	H	H	H	H	S29
4-1-40	H	H	H	H	S29	H	H	S29	H	H	H	H	S29	H	H	S29
4-1-36	H	H	H	H	S31	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-37	H	H	H	H	S31	H	H	H	H	H	H	H	S31	H	H	H
4-1-38	H	H	H	H	H	H	H	S31	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-39	H	H	H	H	H	H	H	S31	H	H	H	H	H	H	H	S31
4-1-40	H	H	H	H	S31	H	H	S31	H	H	H	H	S31	H	H	S31
4-1-41	H	H	H	H	S33	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-42	H	H	H	H	S33	H	H	H	H	H	H	H	S33	H	H	H
4-1-43	H	H	H	H	H	H	H	S33	H	H	H	H	H	H	H	H

[0128]

화합물	R ₁	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	R ₆	R ₇	R ₈	R ₉	R ₁₀	R ₁₁	R ₁₂	R ₁₃	R ₁₄	R ₁₅	R ₁₆
4-1-44	H	H	H	H	H	H	H	S33	H	H	H	H	H	H	H	S33
4-1-45	H	H	H	H	S33	H	H	S33	H	H	H	H	S33	H	H	S33
4-1-46	H	H	H	H	S35	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-47	H	H	H	H	S35	H	H	H	H	H	H	H	S35	H	H	H
4-1-48	H	H	H	H	H	H	H	S35	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-49	H	H	H	H	H	H	H	S35	H	H	H	H	H	H	H	S35
4-1-50	H	H	H	H	S35	H	H	S35	H	H	H	H	S35	H	H	S35
4-1-51	H	H	H	H	S37	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-52	H	H	H	H	S37	H	H	H	H	H	H	H	S37	H	H	H
4-1-53	H	H	H	H	H	H	H	S37	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-54	H	H	H	H	H	H	H	S37	H	H	H	H	H	H	H	S37
4-1-55	H	H	H	H	S37	H	H	S37	H	H	H	H	S37	H	H	S37
4-1-56	H	H	H	H	S39	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-57	H	H	H	H	S39	H	H	H	H	H	H	H	S39	H	H	H
4-1-58	H	H	H	H	H	H	H	S39	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-59	H	H	H	H	H	H	H	S39	H	H	H	H	H	H	H	S39
4-1-60	H	H	H	H	S39	H	H	S39	H	H	H	H	S39	H	H	S39
4-1-61	H	H	H	H	S13	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-62	H	H	H	H	S13	H	H	H	H	H	H	H	S13	H	H	H
4-1-63	H	H	H	H	H	H	H	S13	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-64	H	H	H	H	H	H	H	S13	H	H	H	H	H	H	H	S13
4-1-65	H	H	H	H	S32	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-66	H	H	H	H	H	H	H	S32	H	H	H	H	H	H	H	H
4-1-67	H	H	H	H	S1	H	H	H	H	H	H	H	S7	H	H	H
4-1-68	H	H	H	H	S7	H	H	H	H	H	H	H	S1	H	H	H
4-1-69	H	H	H	H	S1	H	H	H	H	H	H	H	S9	H	H	H
4-1-70	H	H	H	H	S9	H	H	H	H	H	H	H	S1	H	H	H
4-1-71	H	H	H	H	S1	H	H	H	H	H	H	H	S13	H	H	H
4-1-72	H	H	H	H	S13	H	H	H	H	H	H	H	S1	H	H	H
4-1-73	H	H	H	H	S1	H	H	H	H	H	H	H	S14	H	H	H
4-1-74	H	H	H	H	S14	H	H	H	H	H	H	H	S1	H	H	H
4-1-75	H	H	H	H	S1	H	H	H	H	H	H	H	S21	H	H	H
4-1-76	H	H	H	H	S21	H	H	H	H	H	H	H	S1	H	H	H
4-1-77	H	H	H	H	S1	H	H	H	H	H	H	H	S22	H	H	H

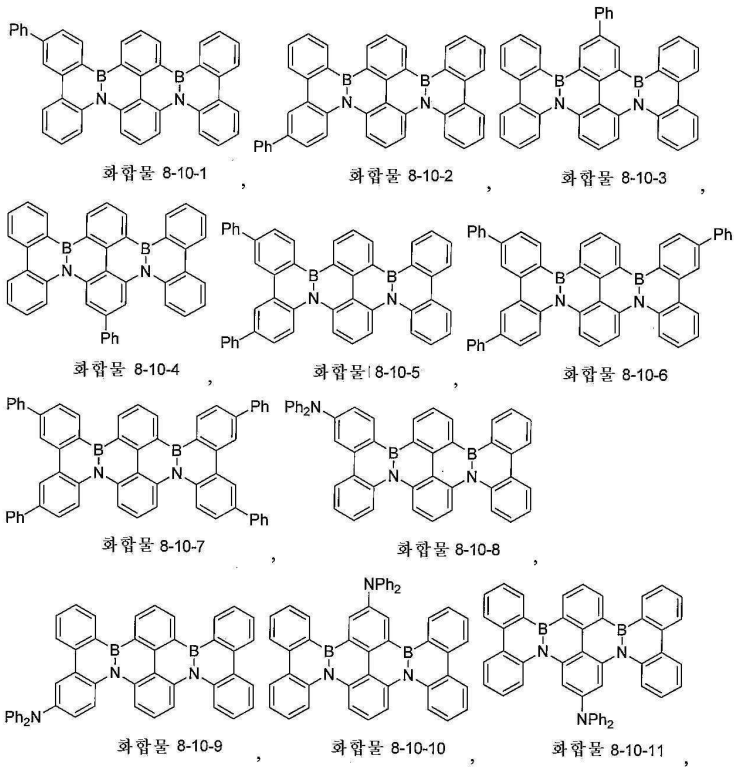
[0129]

화합물	R ₁	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	R ₆	R ₇	R ₈	R ₉	R ₁₀	R ₁₁	R ₁₂	R ₁₃	R ₁₄	R ₁₅	R ₁₆
4-1-78	H	H	H	H	S22	H	H	H	H	H	H	H	S1	H	H	H
4-1-79	H	H	H	H	S1	H	H	H	H	H	H	H	S21	H	H	H
4-1-80	H	H	H	H	S21	H	H	H	H	H	H	H	S1	H	H	H
4-1-81	H	H	H	H	S1	H	H	H	H	H	H	H	S22	H	H	H
4-1-82	H	H	H	H	S22	H	H	H	H	H	H	H	S1	H	H	H
4-1-83	H	H	H	H	S1	H	H	H	H	H	H	H	S31	H	H	H
4-1-84	H	H	H	H	S31	H	H	H	H	H	H	H	S1	H	H	H
4-1-85	H	H	H	H	S1	H	H	H	H	H	H	H	S33	H	H	H
4-1-86	H	H	H	H	S33	H	H	H	H	H	H	H	S1	H	H	H
4-1-87	H	H	H	H	S1	H	H	H	H	H	H	H	S37	H	H	H
4-1-88	H	H	H	H	S37	H	H	H	H	H	H	H	S1	H	H	H
4-1-89	H	H	H	H	S1	H	H	H	H	H	H	H	S39	H	H	H
4-1-90	H	H	H	H	S39	H	H	H	H	H	H	H	S1	H	H	H

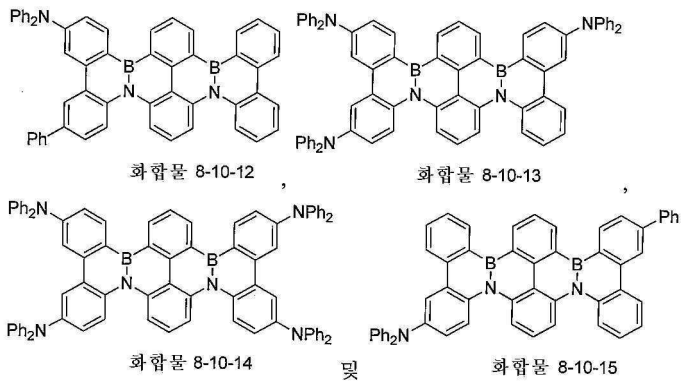
[0130]

[0131]

화학식 III의 화합물이며 그리고, 하기로 이루어진 군으로부터 선택된 붕소-질소 폴리방향족 화합물이 제공된다:

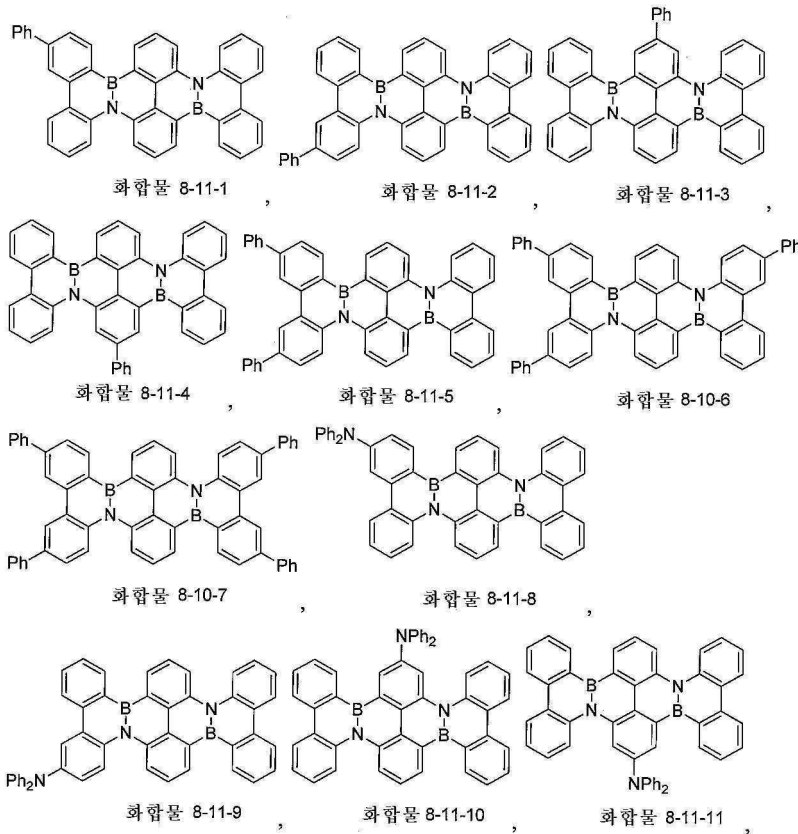


[0132]

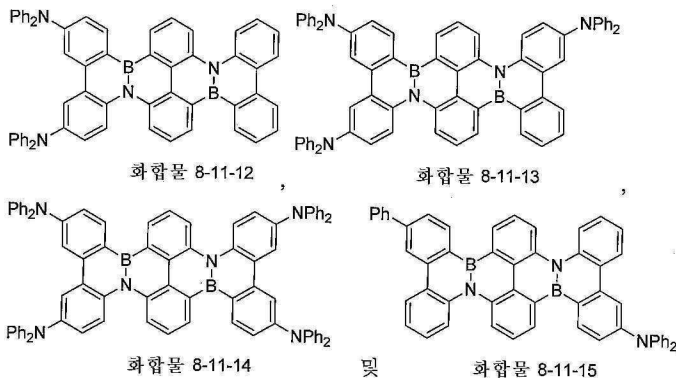


[0133]

[0134] 화학식 IV의 화합물이며 그리고 하기로 이루어진 군으로부터 선택된 붕소-질소 폴리방향족 화합물이 제공된다:



[0135]



[0136]

[0137] 또한, 디바이스가 제공된다. 디바이스는 애노드, 캐소드, 애노드와 캐소드 사이에 배치된 유기층을 포함할 수 있으며, 유기층은 임의의 상기 실시양태의 붕소-질소 폴리방향족 화합물을 포함한다.

[0138] 본 발명은 디바이스의 임의의 특정한 유형으로 한정되지 않는다. 일부 실시양태에서, 디바이스는 소비재이다. 일부 실시양태에서, 디바이스는 유기 발광 디바이스(OLED)이다. 기타 실시양태에서, 디바이스는 지연 형광 디바이스이다. 기타 실시양태에서, 디바이스는 조명 패널이다.

[0139] 일부 실시양태에서, 디바이스의 유기층은 발광층이다. 일부 상기 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 발광 도펀트이다. 일부 기타 실시양태에서, 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 호스트이다.

[0140] 일부 실시양태에서, 디바이스의 유기층은 정공 주입층 또는 정공 수송층이다. 일부 기타 실시양태에서, 디바이스의 유기층은 전자 주입층 또는 전자 수송층이다. 일부 실시양태에서, 디바이스의 유기층은 엑시톤 차단층이다.

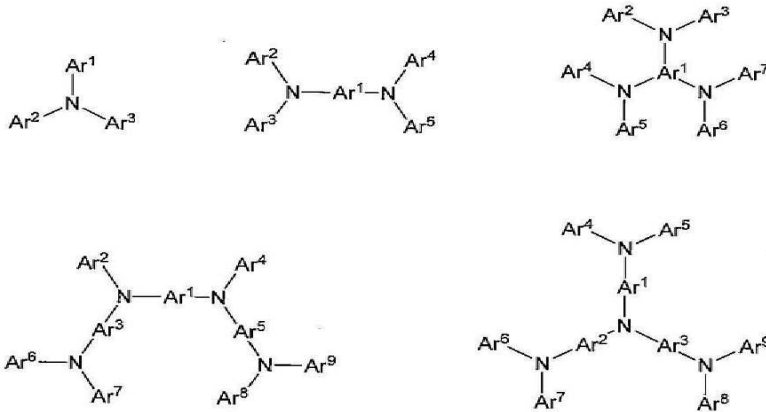
[0141] 기타의 물질과의 조합

[0142] 유기 발광 디바이스에서 특정 층에 대하여 유용한 것으로 본원에 기재된 물질은 디바이스에 존재하는 다양한 기타의 물질과의 조합에 사용될 수 있다. 예를 들면, 본원에 개시된 발광 도펀트는 호스트, 수송층, 차단층, 주입

층, 전극 및 존재할 수 있는 기타의 층과 결합되어 사용될 수 있다. 하기에 기재되거나 또는 지칭된 물질은 본원에 개시된 화합물과 조합하여 유용할 수 있는 비제한적인 물질이며, 당업자중 하나는 조합에 유용할 수 있는 기타의 물질을 확인하는 문헌을 용이하게 참조할 수 있다.

[0143] 본 발명에서 사용하고자 하는 정공 주입/수송 물질은 특정하게 한정되지 않으며, 화합물이 정공 주입/수송 물질로서 사용되는 한 임의의 화합물을 사용할 수 있다. 물질의 비제한적인 예로는 프탈로시아닌 또는 포르피린 유도체; 방향족 아민 유도체; 인돌로카르바졸 유도체; 플루오로탄화수소를 포함하는 중합체; 전도성 도펀트를 갖는 중합체; 전도성 중합체, 예컨대 PEDOT/PSS; 포스폰산 및 실란 유도체와 같은 화합물로부터 유도된 자체조립 단량체; 금속 산화물 유도체, 예컨대 MoO_x; p-형 반도체 유기 화합물, 예컨대 1,4,5,8,9,12-헥사아자트리페닐렌헥사카르보니트릴; 금속 착물 및 가교성 화합물을 들 수 있다.

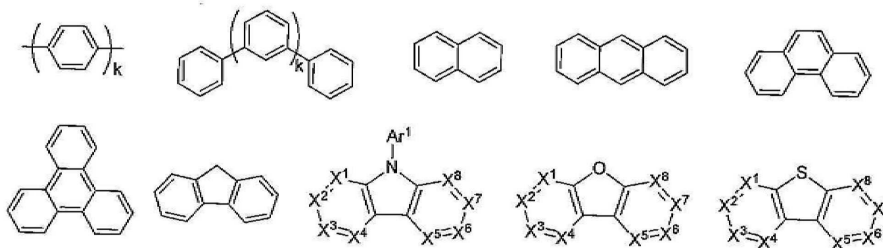
[0144] HIL 또는 HTL에 사용된 방향족 아민 유도체의 비제한적인 예로는 하기 화학식을 들 수 있다:



[0145]

[0146] 각각의 Ar¹ 내지 Ar⁹는 벤젠, 비페닐, 트리페닐, 트리페닐렌, 나프탈렌, 안트라센, 페날렌, 페난트렌, 플루오렌, 피렌, 크리센, 페틸렌, 아줄렌과 같은 방향족 탄화수소 고리형 화합물로 이루어진 군; 디벤조티오펜, 디벤조푸란, 디벤조셀레노펜, 푸란, 티오펜, 벤조푸란, 벤조티오펜, 벤조셀레노펜, 카르바졸, 인돌로카르바졸, 피리딘인돌, 피롤로디피리딘, 피라졸, 이미다졸, 트리아졸, 옥사졸, 티아졸, 옥사디아졸, 옥사트리아졸, 디옥사졸, 티아디아졸, 피리딘, 피리다진, 피리미딘, 피라진, 트리아진, 옥사진, 옥사티아진, 옥사디아진, 인돌, 벤즈이미다졸, 인다졸, 인독사진, 벤족사졸, 벤즈이속사졸, 벤조티아졸, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 시놀린, 퀴나졸린, 퀴녹살린, 나프티리딘, 프탈라진, 프테리딘, 크산텐, 아크리딘, 페나진, 페노티아진, 펜옥사진, 벤조푸로피리딘, 푸로디피리딘, 벤조티에노피리딘, 티에노디피리딘, 벤조셀레노페노피리딘 및 셀레노페노디피리딘과 같은 방향족 헤테로시클릭 화합물로 이루어진 군; 및 방향족 탄화수소 고리형 기 및 방향족 헤테로시클릭 기로부터 선택된 동일한 유형 또는 상이한 유형의 군이며 그리고 산소 원자, 질소 원자, 황 원자, 규소 원자, 인 원자, 붕소 원자, 쇠 구조 단위 및 지방족 고리형 기에 서로 직접 또는 이들 중 1종 이상을 통하여 결합되는 2 내지 10개의 고리형 구조 단위로 이루어진 군으로부터 선택된다. 여기서 각각의 Ar은 수소, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술폰닐, 술폰, 술폰노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택된 치환기로 추가로 치환된다.

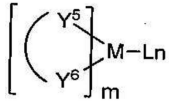
[0147] 하나의 구체예에서, Ar¹ 내지 Ar⁹는 하기로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택된다:



[0148]

[0149] k는 1 내지 20의 정수이며; X¹ 내지 X⁸은 C(CH 포함) 또는 N이고; Ar¹은 상기 정의된 바와 동일한 기를 갖는다.

[0150] HIL 또는 HTL에 사용된 금속 착물의 비제한적인 예는 하기를 들 수 있다:



[0151]

[0152] M은 원자량이 40보다 큰 금속이며; (Y^5-Y^6) 은 2좌 리간드이고, Y^5 및 Y^6 은 독립적으로 C, N, O, P 및 S로부터 선택되며; L은 보조 리간드이며; m은 1 내지 금속에 결합될 수 있는 리간드의 최대수인 정수값이고; m+n은 금속에 결합될 수 있는 리간드의 최대수이다.

[0153] 하나의 구체예에서, (Y^5-Y^6) 은 2-페닐피리딘 유도체이다.

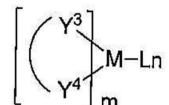
[0154] 또다른 구체예에서, (Y^5-Y^6) 은 카르벤 리간드이다.

[0155] 또다른 구체예에서, M은 Ir, Pt, Os 및 Zn으로부터 선택된다.

[0156] 추가의 구체예에서, 금속 착물은 약 0.6 V 미만의 용액중의 최소 산화 전위 대 Fc^+/Fc 커플을 갖는다.

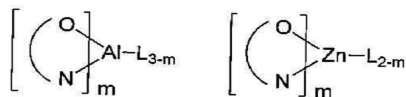
[0157] 상기 기재된 호스트 물질 이외에, 디바이스는 기타의 호스트 물질을 더 포함할 수 있다. 상기 기타 호스트 물질의 예로는 특정하여 한정되지는 않았으나, 임의의 금속 착물 또는 유기 화합물은 호스트의 삼중항 에너지가 도펀트의 것보다 더 크기만 하다면 사용할 수 있다. 하기 표는 각종 색상을 발광하는 디바이스에 바람직한 것으로서 호스트 물질을 분류하지만, 삼중항 기준을 충족하는 한, 임의의 호스트 물질은 임의의 도펀트와 함께 사용될 수 있다.

[0158] 호스트로서 사용된 금속 착물의 예는 하기 화학식을 갖는 것이 바람직하다:



[0159]

[0160] M은 금속이고; (Y^3-Y^4) 는 2좌 리간드이고, Y^3 및 Y^4 는 C, N, O, P 및 S로부터 독립적으로 선택되며; L은 보조 리간드이며; m은 1 내지 금속이 결합될 수 있는 리간드의 최대수인 정수값이고; m+n은 금속에 결합될 수 있는 리간드의 최대수이다.



[0161] 하나의 구체예에서, 금속 착물은 이다.

[0162] (O-N)은 원자 O 및 N에 배위 결합된 금속을 갖는 2좌 리간드이다.

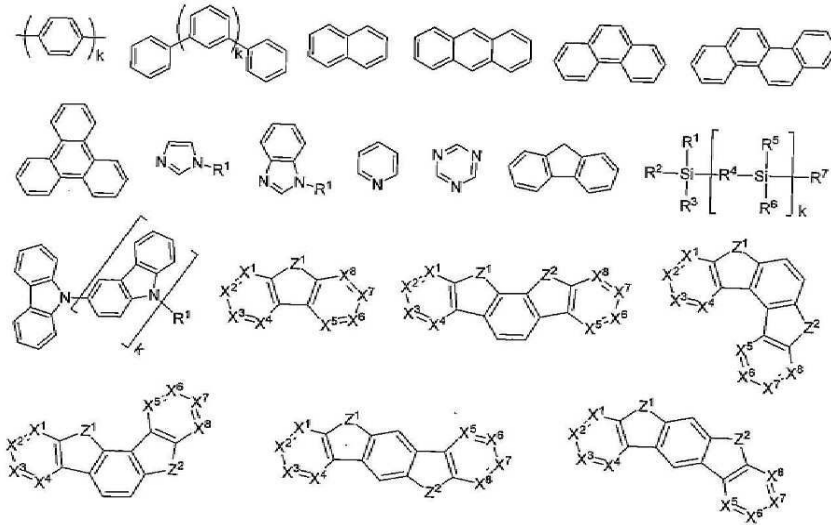
[0163] 또다른 구체예에서, M은 Ir 및 Pt로부터 선택된다.

[0164] 추가의 구체예에서, (Y^3-Y^4) 는 카르벤 리간드이다.

[0165] 호스트로서 사용된 유기 화합물의 예는 방향족 탄화수소 고리형 화합물, 예컨대 벤젠, 비페닐, 트리페닐, 트리페닐렌, 나프탈렌, 안트라센, 페날렌, 페난트렌, 플루오렌, 피렌, 크리센, 페릴렌, 아줄렌으로 이루어진 군; 방향족 헤테로시클릭 화합물, 예컨대 디벤조티오펜, 디벤조푸란, 디벤조셀레노펜, 푸란, 티오펜, 벤조푸란, 벤조티오펜, 벤조셀레노펜, 카르바졸, 인돌로카르바졸, 피리딜인돌, 피롤로디피리딘, 피라졸, 이미다졸, 트리아졸, 옥사졸, 티아졸, 옥사디아졸, 옥사트리아졸, 디옥사졸, 티아디아졸, 피리딘, 피리다진, 피리미딘, 피라진, 트리아진, 옥사진, 옥사티아진, 옥사디아진, 인돌, 벤즈이미다졸, 인다졸, 인독사진, 벤족사졸, 벤즈이속사졸, 벤조티아졸, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 신놀린, 퀴나졸린, 퀴녹살린, 나프티리딘, 프탈라진, 프테리딘, 크산텐, 아크리딘, 페나진, 페노티아진, 펜옥사진, 벤조푸로피리딘, 푸로디피리딘, 벤조티에노피리딘, 티에노디피리딘, 벤조셀레노페노피리딘 및 셀레노페노디피리딘으로 이루어진 군; 및 방향족 탄화수소 시클릭 기 및 방향족 헤테로시클릭 기로부터 선택된 동일한 유형 또는 상이한 유형의 기이며 그리고 서로 직접 결합되거나 또는 산소 원자, 질소 원자, 황 원자, 규소 원자, 인 원자, 붕소 원자, 쇠 구조 단위 및 지방족 고리형 기 중 1종 이상에 의하여 결합되는 2 내지 10개의 고리형 구조 단위로 이루어진 군으로부터 선택된다. 여기서 각각의 기는 수소, 중

수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술폰, 술폰, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택된 치환기로 더 치환된다.

[0166] 하나의 구체예에서, 호스트 화합물은 분자에서 하기 기 중 1종 이상을 포함한다:



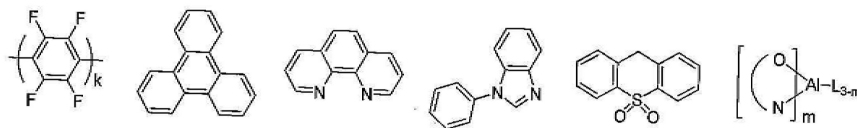
[0167]

[0168] R^1 내지 R^7 은 수소, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술폰, 술폰, 포스피노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되며, 아릴 또는 헤테로아릴인 경우, 전술한 Ar과 유사한 정의를 가지며; k 는 0 내지 20의 정수이며; X^1 내지 X^8 은 C(CH 포함) 또는 N으로부터 선택되며; Z^1 및 Z^2 는 NR^1 , O 또는 S로부터 선택된다.

[0169] 정공 차단층(HBL)은 발광층에서 배출되는 정공 및/또는 엑시톤의 수를 감소시키는데 사용될 수 있다. 디바이스에서의 이러한 차단층의 존재는 실질적으로 차단층이 결여된 유사한 디바이스에 비하여 더 높은 효율을 초래할 수 있다. 또한, 차단층은 OLED의 소정의 부위로 방출을 한정시키는데 사용될 수 있다.

[0170] 하나의 구체예에서, HBL에 사용된 화합물은 전술한 호스트로서 사용된 동일한 작용기를 분자 또는 동일한 작용기를 포함한다.

[0171] 또다른 구체예에서, HBL에 사용된 화합물은 분자에서 하기의 기 중 1종 이상을 포함한다:

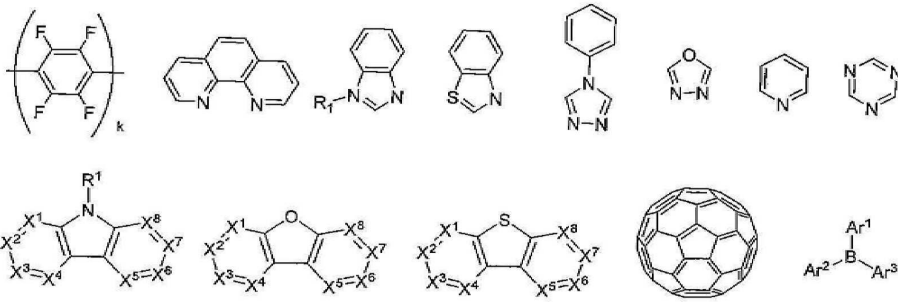


[0172]

[0173] k 는 0 내지 20의 정수이고; L은 보조 리간드이고, m 은 1 내지 3의 정수이다.

[0174] 전자 수송층(ETL)은 전자를 수송할 수 있는 물질을 포함할 수 있다. 전자 수송층은 고유하거나(도핑되지 않음) 또는 도핑될 수 있다. 도핑은 전도율을 향상시키는데 사용될 수 있다. ETL 물질의 예는 특정하게 한정되지는 않았으며, 임의의 금속 착물 또는 유기 화합물은 통상적으로 전자를 수송하는데 사용되는 한 사용될 수 있다.

[0175] 하나의 실시양태에서, ETL에 사용되는 화합물은 분자에서 하기 기 중 1종 이상을 포함한다:

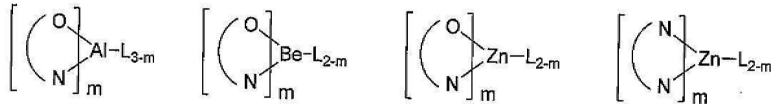


[0176]

[0177] R¹은 수소, 중수소, 할라이드, 알킬, 시클로알킬, 헤테로알킬, 아릴알킬, 알콕시, 아릴옥시, 아미노, 실릴, 알케닐, 시클로알케닐, 헤테로알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 아실, 카르보닐, 카르복실산, 에스테르, 니트릴, 이소니트릴, 술폰닐, 술피닐, 술폰닐, 포스포노 및 이의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택되며, 아릴 또는 헤테로아릴인 경우, 전술한 Ar과 유사한 정의를 가지며; Ar¹ 내지 Ar³은 전술한 Ar과 유사한 정의를 가지며; k는 0 내지 20의 정수이며; X¹ 내지 X⁸은 C(CH 포함) 또는 N으로부터 선택된다.

[0178] 또다른 구체예에서, ETL에 사용된 금속 착물은 하기의 화학식을 포함하지만, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0179]

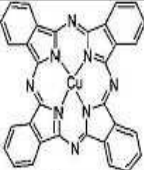
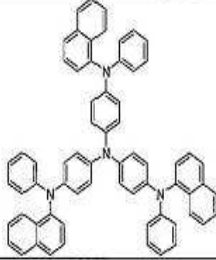
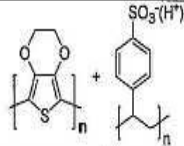
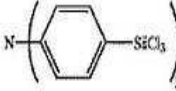
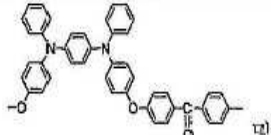


[0180] (O-N) 또는 (N-N)은 원자 O, N 또는 N,N에 배위 결합된 금속을 갖는 2좌 리간드이며; L은 보조 리간드이며; m은 1 내지 금속에 결합될 수 있는 리간드의 최대수인 정수값이다.

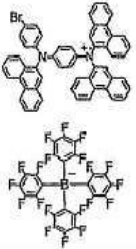
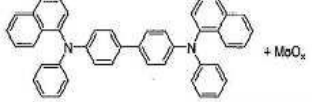
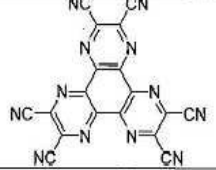
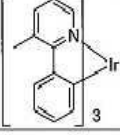
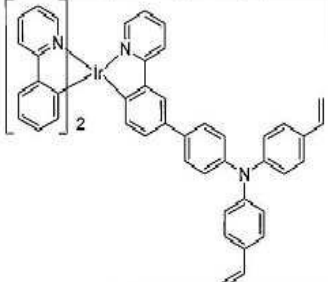
[0181] OLED 디바이스의 각각의 층에 사용된 임의의 전술한 화합물에서, 수소 원자는 부분적으로 또는 완전 중수소화될 수 있다. 그래서, 임의의 구체적으로 제시된 치환기, 비제한적인 예로는 메틸이고, 페닐, 피리딜 등은 이의 비중수소화, 부분 중수소화 및 완전 중수소화된 변형을 포함한다. 유사하게, 알킬, 아릴, 시클로알킬, 헤테로아릴 등과 같은 치환기의 유형도 또한 비중수소화, 부분 중수소화 및 완전 중수소화된 변형을 포함한다.

[0182] 본원에 개시된 물질 이외에 및/또는 이와 조합하여, 다수의 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 호스트 물질, 도펀트 물질, 엑시톤/정공 차단층 물질, 전자 수송 및 전자 주입 물질이 OLED에 사용될 수 있다. 본원에 개시된 물질과 조합하여 OLED에 사용될 수 있는 물질의 비제한적인 예는 하기 표 1에 제시되어 있다. 하기 표 1은 물질의 비제한적인 유형, 각각의 유형에 대한 화합물의 비제한적인 예 및 물질을 개시하는 참고 문헌을 제시한다.

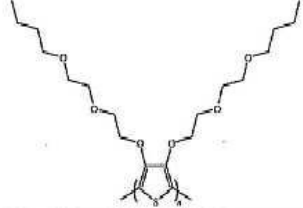


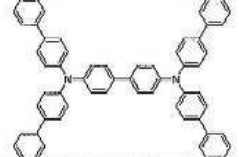
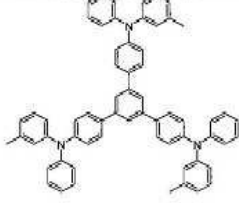
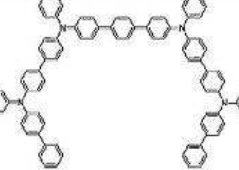
[0183] <표 1>

물질	물질의 예	문헌
정공 주입 물질		
프탈로시아닌 및 포르피린 화합물		Appl. Phys. Lett. 69, 2160 (1996)
스타비스트 트리알아민		J. Lumin. 72-74, 985 (1997)
CF _x 플루오로탄화수소 중합체	$\left[\text{CH}_x\text{F}_y \right]_n$	Appl. Phys. Lett. 78, 673 (2001)
전도성 중합체(예, PEDOT:PSS, 폴리아닐린, 폴리티오펜)		Synth. Met. 87, 171 (1997) WO2007002683
포스폰산 및 실란 SAM		US20030162053
전도성 도펀트를 갖는 트리알아민 또는 폴리티오펜 중합체		EP1725079A1

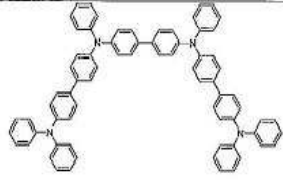

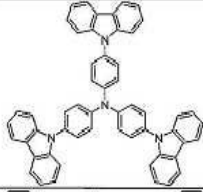
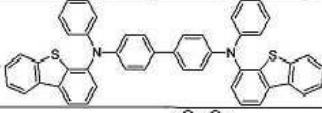
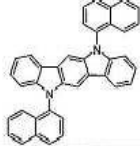

[0184]

		
몰리브덴 및 텅스텐 산화물과 같은 전도성 무기 화합물과의 유기 화합물		US20050123751 SID Symposium Digest, 37, 923 (2006) WO2009018009
n-형 반도체 유기 막물		US20020158242
금속 유기금속 착물		US20060240279
교차 화합물		US20080220265

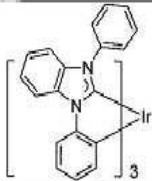
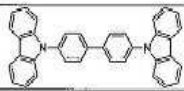
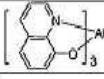
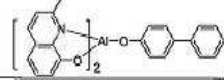
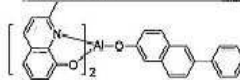
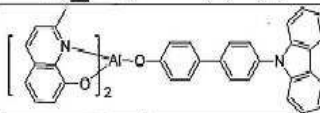
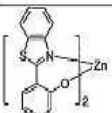
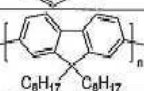
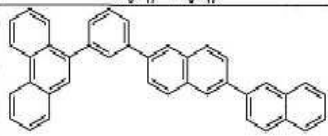
[0185]

<p>폴리디옥센계 중합체 및 공중합체</p>		<p>WO 2011075644 EP2350216</p>
<p>경공 수송 물질</p>		
<p>트리아릴아민 (예, TPD, α-NPD)</p>		<p>Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987)</p>
		<p>US5061569</p>
		<p>EP650955</p>
		<p>J. Mater. Chem. 3, 319 (1993)</p>
		<p>Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)</p>

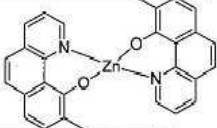
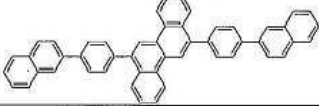
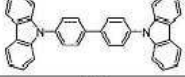
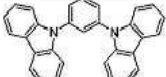
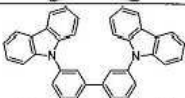
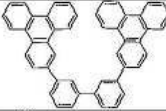


[0186]

		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)
스피로플루오렌 코어상의 트리아릴아민		Synth. Met. 91, 209 (1997)
아릴아민 카르바졸 화합물		Adv. Mater. 6, 677 (1994), US20080124572
(디)벤조티오펜/(디)벤조푸란과의 트리아릴아민		US20070278938, US20080106190, US20110163302
인돌로카르바졸		Synth. Met. 111, 421 (2000)
이소인돌 화합물		Chem. Mater. 15, 3148 (2003)

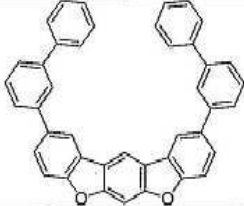
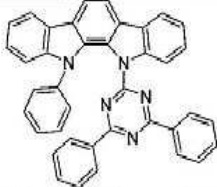
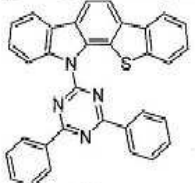
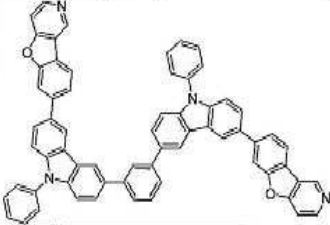
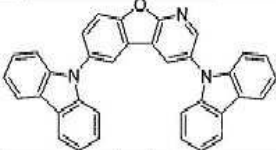

[0187]

금속 카르벤 화합물		US20080018221
인광 OLED 호스트 물질		
적색 호스트		
아릴카르바졸		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
금속 8-히드록시퀴놀레이트 (예, Alq3, BAlq)		Nature 395, 151 (1998)
		US20060202194
		WO2005014551
		WO2006072002
금속 펜옥시벤조티아졸 화합물		Appl. Phys. Lett. 90, 123509 (2007)
공액 올리고머 및 중합체(예, 폴리플루오렌)		Org. Electron. 1, 15 (2000)
방향족 승합 고리		WO2009066779, WO2009066778, WO2009063833, US20090045731, US20090045730, WO2009008311, US2009008605, US2009009065

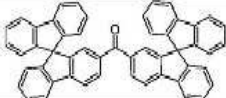
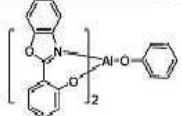
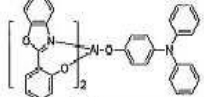
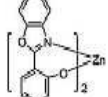
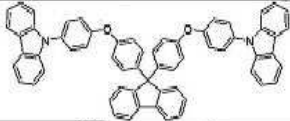
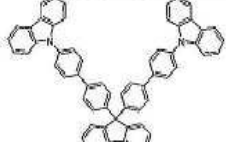
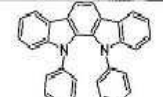

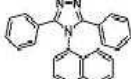
[0188]

아연 착물		WO2010056066
크리센계 화합물		WO2011086863
녹색 호스트		
아릴카르바졸		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US20030175553
		WO2001039234
아릴트리페닐렌 화합물		US20060280965
		US20060280965
		WO2009021126

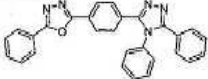
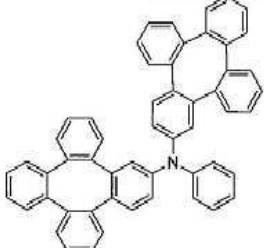
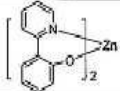
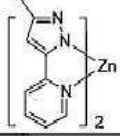
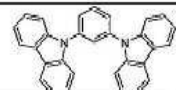

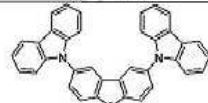
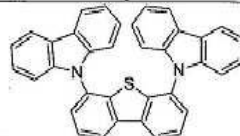
[0189]

<p>폴리양합 레테로아릴 화합물</p>		<p>US20090309488 US20090302743 US20100012931</p>
<p>공여체 수용체 타입 분자</p>		<p>WO2008056746</p>
		<p>WO2010107244</p>
<p>아자-카르바졸/DBT/DBF</p>		<p>JP2008074939</p>
		<p>US20100187984</p>
<p>중합체(예, PVK)</p>		<p>Appl. Phys. Lett. 77, 2280 (2000)</p>

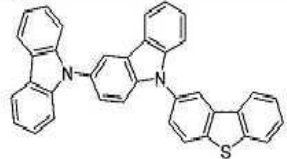
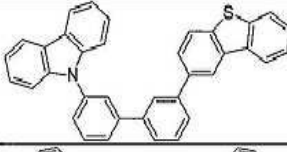
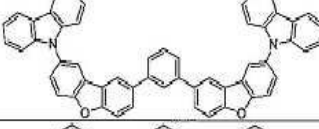
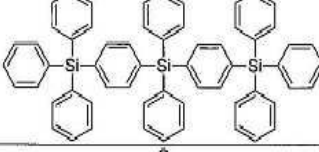
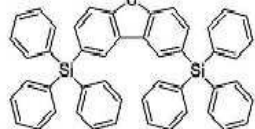
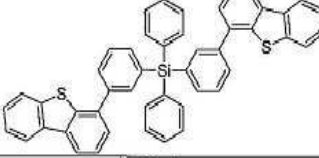
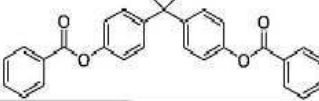
[0190]

스피로플루오렌 화합물		WO2004093207
금속 펜옥시벤조옥사졸 화합물		WO2005089025
		WO2006132173
		JP200511610
스피로플루오렌-카르바졸 화합물		JP2007254297
		JP2007254297
인돌로카르바졸		WO2007063796
		WO2007063754
5-원 고리 전자 결여 헤테로사이클(예, 트리아졸, 옥사디아졸)		J. Appl. Phys. 90, 5048 (2001)

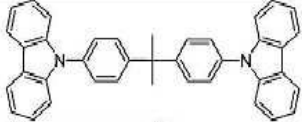
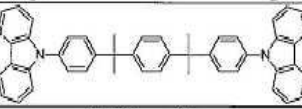
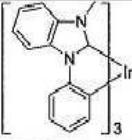
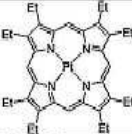
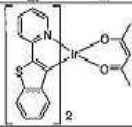
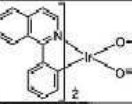
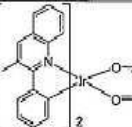
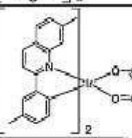
[0191]

		WO2004107822
테트라페닐렌 착물		US20050112407
금속 펜옥시피리딘 화합물		WO2005030900
금속 배위결합 착물 (예, N^N 리간드를 갖는 Zn, Al)		US20040137268, US20040137267
청색 호스트		
아릴카르바졸		Appl. Phys. Lett, 82, 2422 (2003)
		US20070190359
디벤조티오펜/디벤조푸란-카르바졸 화합물		WO2006114966, US20090167162
		US20090167162

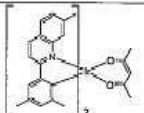
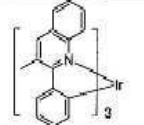
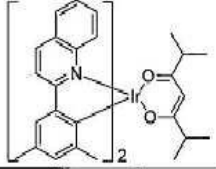
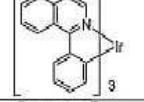
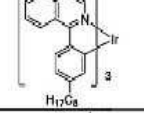
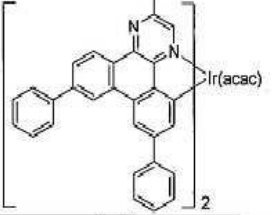
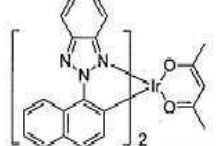
[0192]

		WO2009086028
		US20090030202, US20090017330
		US20100084966
규소 아릴 화합물		US20050238919
		WO2009003898
규소/게르마늄 아릴 화합물		EP2034538A
아릴 벤조일 에스테르		WO2006100298

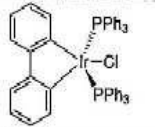
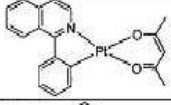
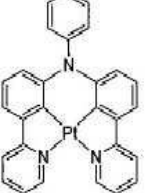
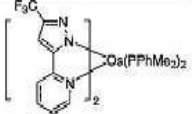
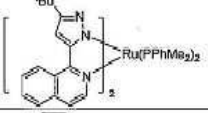
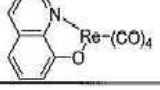
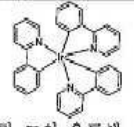
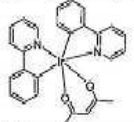
[0193]

<p>비-공액 기로 결합된 카르바졸</p>		<p>US20040115476</p>
<p>아자-카르바졸</p>		<p>US20060121308</p>
<p>고 삼중항 금속 유기금속 착물</p>		<p>US7154114</p>
<p>인광 도펀트</p>		
<p>적색 도펀트</p>		
<p>중금속 포르피린 (예, PtOEP)</p>		<p>Nature 395, 151 (1998)</p>
<p>이리듐(III) 유기금속 착물</p>		<p>Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)</p>
		<p>US2006835469</p>
		<p>US2006835469</p>
		<p>US20060202194</p>

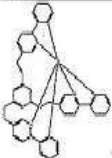
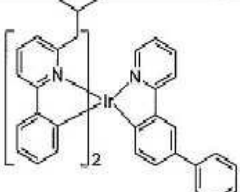
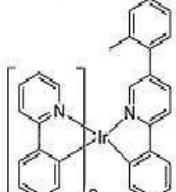
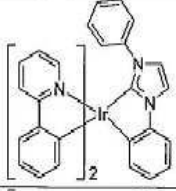
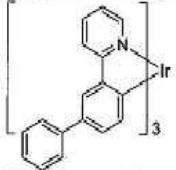
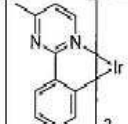
[0194]

		US20060202194
		US20070087321
		US20080261076 US20100090591
		US20070087321
		Adv. Mater. 19, 739 (2007)
		WO2009100991
		WO2008101842

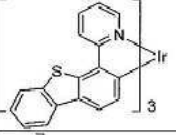
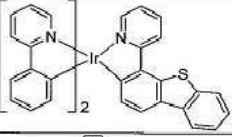
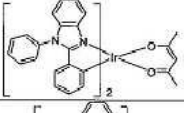
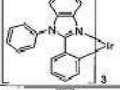
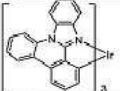
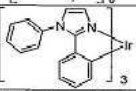
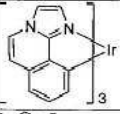
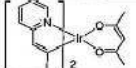
[0195]

		US7232618
백금(II) 유기금속 착물		WO2003040257
		US20070103060
오스뮴(III) 착물		Chem. Mater. 17, 3532 (2005)
루테튬(III) 착물		Adv. Mater. 17, 1059 (2005)
레늄(I, II) 및 (III) 착물		US20050244673
특색 도면		
이리듐(III) 유기금속 착물		Inorg. Chem. 40, 1704 (2001)
	및 그의 유도체 	US20020034656

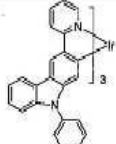
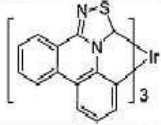
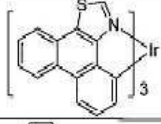
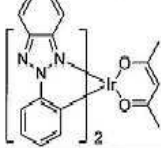
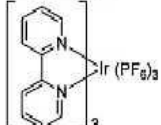
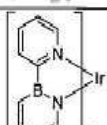
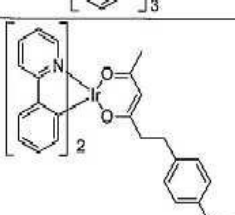
[0196]

		US7332232
		US20090108737
		WO2010028151
		EP1841834B
		US20060127696
		US20090039776

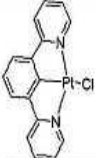
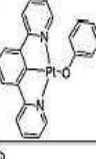
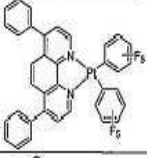
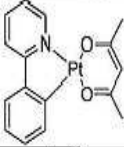
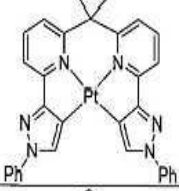
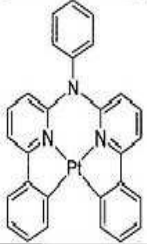
[0197]

		US6921915
		US20100244004
		US6687266
		Chem. Mater. 16, 2480 (2004)
		US20070190359
		US 20060008670 JP2007123392
		WO2010086089, WO2011044988
		Adv. Mater. 16, 2003 (2004)


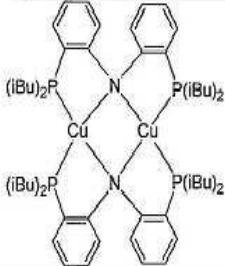
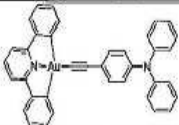
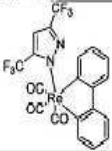
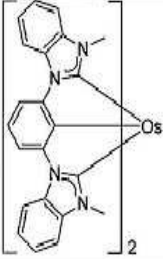
[0198]

		Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7800
		WO2009050290
		US20090165846
		US20080015355
		US20010015432
		US20100295032
중합체 금속 유기금속 화합물에 대한 단량체		US7250226, US7396598


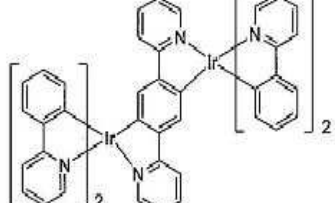

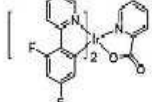

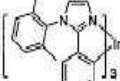

[0199]

다좌 배위자 리간드를 포함하는 Pt(II) 유기금속 착물		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Chem. Lett. 34, 592 (2005)
		WO2002015645
		US20060263635
		US20060182992 US20070103060

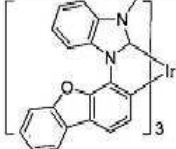
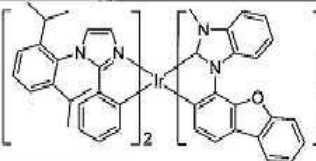
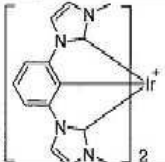
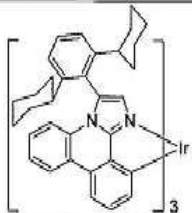
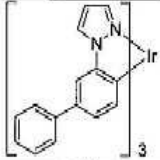
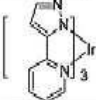
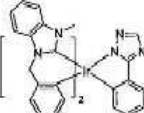
[0200]

<p>Cu 착물</p>		<p>WO2009000673</p>
		<p>US20070111026</p>
<p>금 착물</p>		<p>Chem. Commun. 2906 (2005)</p>
<p>레늄(III) 착물</p>		<p>Inorg. Chem. 42, 1248 (2003)</p>
<p>오스뮴(II) 착물</p>		<p>US7279704</p>

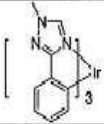
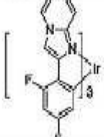
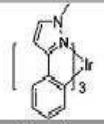
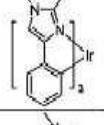
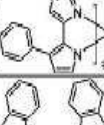
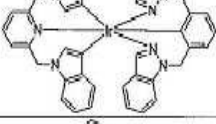
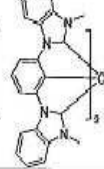
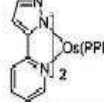
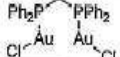
[0201]

중수소화 유기금속 착물		US20030138657
2종 이상의 금속 중심을 갖는 유기금속 착물		US20030152802
		US7090928
청색 도펀트		
이리듐(III) 유기금속 착물		WO2002002714
		WO2006009024
		US20060251923 US20110057559 US20110204333
		US7393599, WO2006056418, US20050260441, WO2005019373

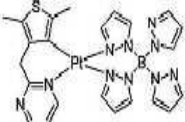
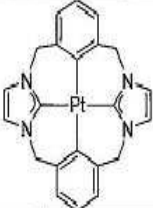
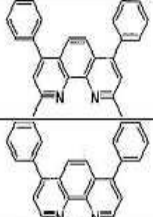
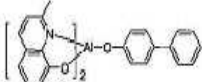

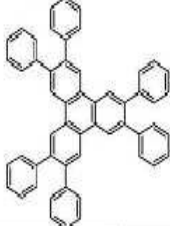
[0202]

		US7534505
		WO2011051404
		US7445855
		US20070190359, US20080297033 US20100148663
		US7338722
		US20020134984
		Angew. Chem. Int. Ed. 47, 1 (2008)

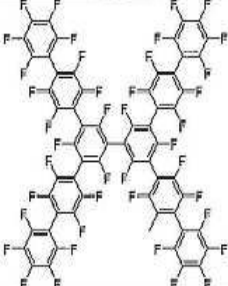
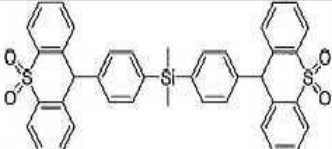
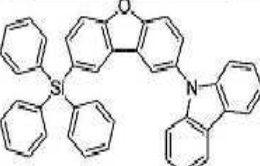
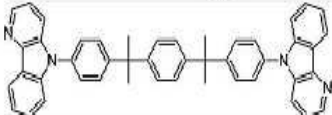
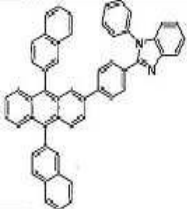
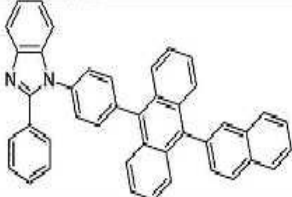
[0203]

		Chem. Mater. 18, 5119 (2006)
		Inorg. Chem. 46, 4308 (2007)
		WO2005123873
		WO2005123873
		WO2007004380
		WO2006082742
오스뮴(II) 착물		US7279704
		Organometallics 23, 3745 (2004)
금 착물		Appl. Phys. Lett. 74, 1361 (1999)

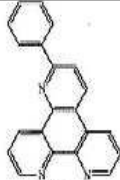
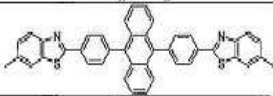
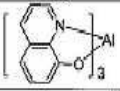
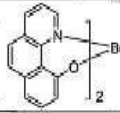
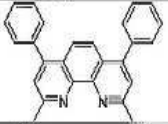


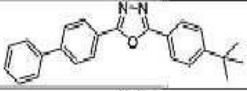
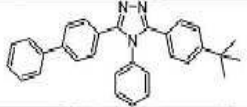
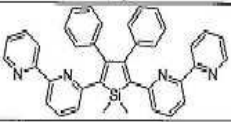
[0204]

백금(II) 착물		WO2006098120, WO2006103874
1 종 이상의 금속-카르벤 결합을 갖는 Pt 4 좌 배위자 착물		US7655323
엑시톤/정공 차단층 물질		
바토쿠프린 화합물 (예, BCP, BPhen)		Appl. Phys. Lett. 75, 4 (1999) Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
금속 8-히드록시퀴놀레이트 (예, BALq)		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
5-원 고리 전자 결여 헤테로사이클, 예컨대 트리아졸, 옥사디아졸, 이미다졸, 벤조이미다졸		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
트리페닐렌 화합물		US20050025993

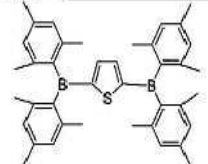
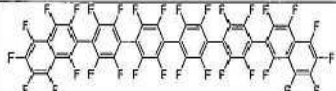
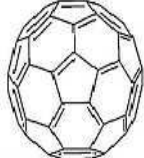
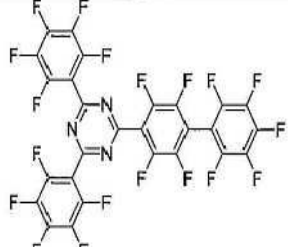
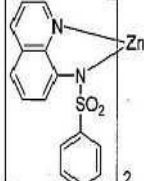
[0205]

<p>불소화 방향족 화합물</p>		<p>Appl. Phys. Lett. 79, 156 (2001)</p>
<p>페노티아진-S-옥시드</p>		<p>WO2008132085</p>
<p>실릴화 5 원 질소, 산소, 황 또는 인 디벤조헤테로사이클</p>		<p>WO2010079051</p>
<p>아자-카르바졸</p>		<p>US20060121308</p>
<p>전자 수송 물질</p>		
<p>안트라센-벤조이미다졸 화합물</p>		<p>WO2003060956</p>
		<p>US20090179554</p>

[0206]

아자 트리페닐렌 유도체		US20090115316
안트라센-벤조티아졸 화합물		Appl. Phys. Lett. 89, 063504 (2006)
금속 8- 히드록시퀴놀레이트 (예, Alq ₃ , Zrqa)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987) US7230107
금속 히드록시벤조퀴놀레이트		Chem. Lett. 5, 905 (1993)
바보큐프린 화합물, 예컨대 BCP, BPhen 등		Appl. Phys. Lett. 91, 263503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
5-원 고리 전자 결여 헤테로사이클(예, 트리아졸, 옥사디아졸, 이미다졸, 벤조이미다졸)		Appl. Phys. Lett. 74, 865 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 55, 1489 (1989)
		Jpn. J. Apply. Phys. 32, L917 (1993)
실론 화합물		Org. Electron. 4, 113 (2003)

[0207]

아릴보란 화합물		J. Am. Chem. Soc. 120, 9714 (1998)
불소화 방향족 화합물		J. Am. Chem. Soc. 122, 1832 (2000)
플러렌(예, C60)		US20090101870
트리아진 착물		US20040036077
Zn(N^N) 착물		US6528187

[0208]

[0209]

[0210]

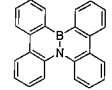
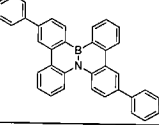
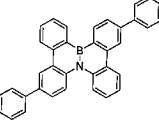
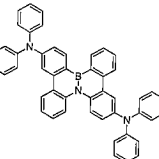
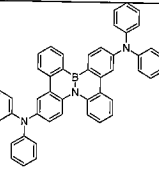
[0211]

실험

S1-T1 갭의 계산

B3LYP/cep-31g 평서널 및 기초 세트에서의 가우스 소프트웨어 패키지를 사용한 DFT 계산은 5종의 붕소-질소 폴리방향족 화합물에 대하여 실시하였다. 하기 표 2에는 HOMO 및 LUMO, HOMO-LUMO 갭, S1 및 T1 에너지 레벨 및 S1-T1 갭에 대한 이론치를 제시한다. 붕소-질소 폴리방향족 화합물에 대한 S1-T1 갭은 일반적으로 약 0.4 eV 내지 약 0.6 eV 범위내이며, 이는 해당 벤젠노이드 시스템(약 1.0 eV)에 대한 S1-T1 갭보다 훨씬 더 낮다.

[0212] <표 2>

화합물	구조	HOMO (eV)	LUMO (eV)	HOMO-LUMO Gap (eV)	이론치 S1 (nm)	이론치 T1 (nm)	S1-T1 갭 (eV)
1		-5.5	-1.24	-4.26	345	409	0.57
2		-5.39	-1.41	-3.98	380	430	0.38
3		-5.39	-1.41	-3.98	380	431	0.39
4		-4.77	-1.19	-3.58	399	458	0.40
5		-4.76	-1.2	-3.55	401	459	0.39

[0213]

[0214] 광발광(PL) 스펙트럼은 화합물 1에 대하여 기록하였다(표 2에 제시함). 도 4는 1 및 2로 표시한 실온(RT) 및 77 K에서 2-MeTHF 중의 화합물 1에 대한 PL 스펙트럼을 도시한다. 광발광은 상기 온도 모두에서 강하다. 77 K에서의 피크 위치에 기초하여, S1-T1 갭은 0.25 eV이다. PMMA:화합물 1 박막(100:5 중량비)의 실온에서의 PL 효율은 18%이다. 박막에 대한 PL 스펙트럼은 도 4에서 3으로 표시한다. 아릴, 헤테로아릴 및/또는 아미노 유사체는 더 높은 PL 효율을 나타낼 것으로 예상된다.

[0215] 합성예

[0216] 일부 붕소-질소 폴리방향족 화합물은 하기와 같이 합성하였다.

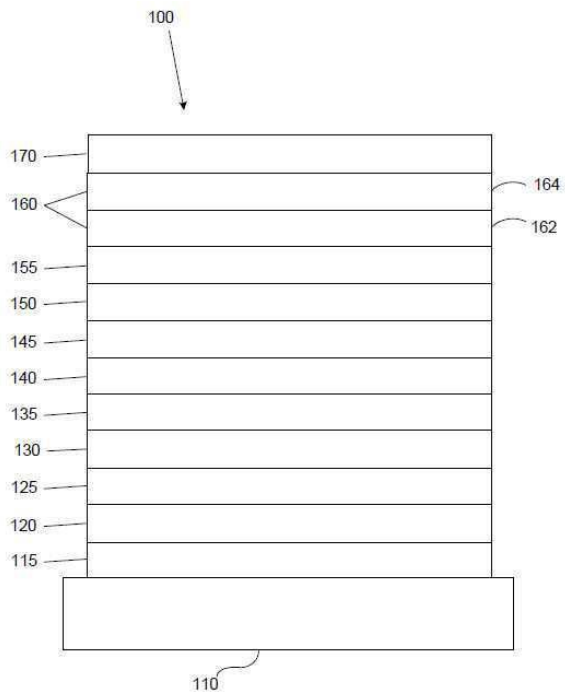
[0217] 화합물 1의 합성

[0218] 화합물 1은 문헌[Hatakeyama et al., *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 133, pp. 18614-17 (2011)]에 기재된 바와 유사한 방법을 사용하여 합성할 수 있다.

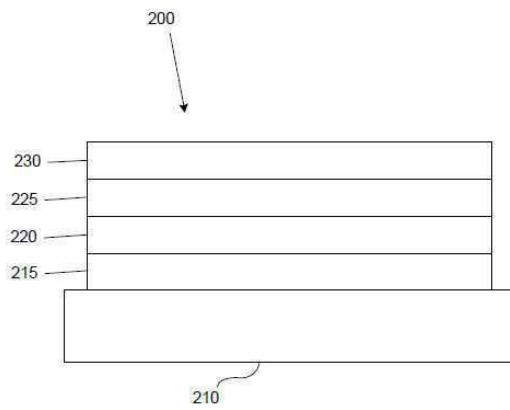
[0219] 본원에 기재된 다양한 실시양태는 단지 예시를 위한 것이며, 본 발명의 범주를 한정하고자 하는 것이 아닌 것으로 이해하여야 한다. 예를 들면, 본원에 기재된 다수의 물질 및 구조는 본 발명의 정신으로부터 벗어남이 없이 기타의 물질 및 구조로 치환될 수 있다. 청구된 바와 같은 본 발명은 당업자에게 자명한 바와 같이 본원에 기재된 특정한 예 및 바람직한 실시양태로부터의 변형을 포함한다. 본 발명이 작동되는 이유와 관련한 다양한 이론은 제한을 의도하는 것이 아닌 것으로 이해하여야 한다.

도면

도면1



도면2



도면3



도면4

