



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2020년12월14일  
(11) 등록번호 10-2190866  
(24) 등록일자 2020년12월08일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (52) CPC특허분류  
H01L 51/0052 (2013.01)  
H01L 51/0059 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2019-7000120
- (22) 출원일자(국제) 2017년06월26일  
심사청구일자 2019년09월02일
- (85) 번역문제출일자 2019년01월03일
- (65) 공개번호 10-2019-0021310
- (43) 공개일자 2019년03월05일
- (86) 국제출원번호 PCT/US2017/039279
- (87) 국제공개번호 WO 2018/017288  
국제공개일자 2018년01월25일
- (30) 우선권주장  
62/364,685 2016년07월20일 미국(US)
- (56) 선행기술조사문헌  
KR1020130022071 A\*  
KR1020150043020 A\*  
\*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

- (73) 특허권자  
주식회사 엘지화학  
서울특별시 영등포구 여의대로 128 (여의도동)
- (72) 발명자  
가오, 웨이잉  
미국 19350 펜실베이니아주 란덴버그 체인게이트  
서클 223  
해론, 노만  
미국 19711 델라웨어주 뉴어크 애플 로드 408
- (74) 대리인  
유미특허법인

전체 청구항 수 : 총 4 항

심사관 : 정미나

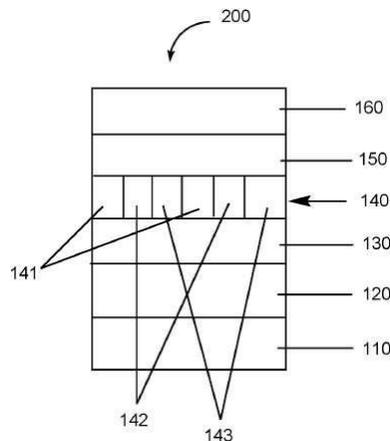
(54) 발명의 명칭 전기 활성 물질

(57) 요약

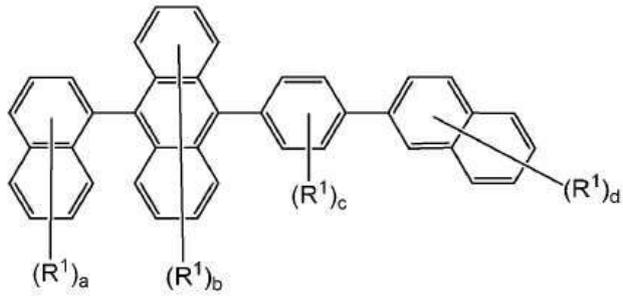
(a) 화학식 I을 갖는 호스트 화합물 및 (b) 광활성 도펀트를 포함하는 전기 활성 조성물이 제공된다. 화학식 I에서, R<sup>1</sup>은 각각의 경우에 동일하거나 상이하며, D, 알킬, 실릴, 게르밀, 중수소화 알킬, 중수소화 실릴, 또는 중수소화 게르밀이고; a는 0~7의 정수이고; b는 0~8의 정수이고; c는 0~4의 정수이고; d는 0~7의 정수이다.

(뒷면에 계속)

대표도 - 도2



[화학식 I]



(52) CPC특허분류

*H01L 51/50* (2013.01)

---

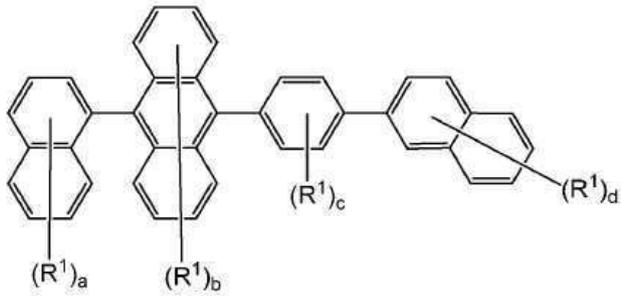
**명세서**

**청구범위**

**청구항 1**

(a) 화학식 I을 갖는 호스트 화합물

[화학식 I]



(여기서,

$R^1$ 은 D이고;

a는 0~7의 정수이고;

b는 0~8의 정수이고;

c는 0~4의 정수이고;

d는 0~7의 정수이고,

$a + b + c + d = 15 \sim 26$ 임); 및

(b) 광활성 도펀트를 포함하는 전기 활성 조성물.

**청구항 2**

삭제

**청구항 3**

삭제

**청구항 4**

삭제

**청구항 5**

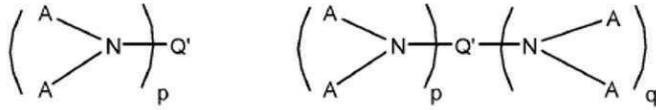
삭제

**청구항 6**

제1항에 있어서, 상기 광활성 도펀트가 화학식 II 또는 화학식 III을 갖는 전기 활성 조성물.

[화학식 II]

[화학식 III]



여기서,

A는 3~60개의 고리 탄소 원자를 갖는 탄화수소 아릴 또는 헤테로아릴기로서 각각의 경우에 동일하거나 상이하고;

Q'는 3~60개의 고리 탄소 원자를 갖는 탄화수소 아릴 또는 헤테로아릴이고;

p 및 q는 독립적으로 1~6의 정수임.

**청구항 7**

제6항에 있어서, Q'가 안트라센, 크리센, 피렌, 벤조플루오렌, 나프토피란, 나프토티피란, 이들의 치환 유도체, 및 이들의 중수소화 유사체로 이루어진 군으로부터 선택되는 화합물로부터 유도되는 전기 활성 조성물.

**청구항 8**

애노드, 캐소드, 및 이들 사이의 광활성층을 포함하되, 상기 광활성층은 제1항의 전기 활성 조성물을 포함하는 유기 전자 장치.

**청구항 9**

삭제

**청구항 10**

삭제

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 선행 출원에 대한 우선권 주장

[0002] 본 출원은 2016년 7월 20일에 출원된 미국 가출원 62/364,685호의 이익을 주장한다.

[0003] 기술분야

[0004] 본 발명은 신규 전기 활성 화합물에 관한 것이다. 본 발명은 또한 이러한 전기 활성 화합물을 포함하는 적어도 하나의 층을 갖는 전자 장치에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0005] 유기 발광 다이오드("OLED") 디스플레이를 구성하는 OLED와 같은 유기 전자 장치에서, 하나 이상의 유기 전기 활성층이 두 개의 전기 접촉층 사이에 개재된다. OLED에서, 전기 접촉층을 가로질러 전압이 인가되면 적어도 하나의 유기 전기 활성층은 투광성 전기 접촉층을 통해 발광한다.

[0006] 발광 다이오드에서 발광 성분으로서 유기 전계발광 화합물을 사용하는 것은 잘 알려져 있다. 간단한 유기 분자, 공액 중합체, 및 유기금속 착물이 사용되어왔다. 발광 물질은 단독으로 사용되거나 전기 활성 호스트 물질에 존재할 수 있다.

[0007] 전계발광 물질을 사용하는 장치는 주로 하나 이상의 전하 수송층을 포함하며, 전하 수송층은 광활성층(예를 들

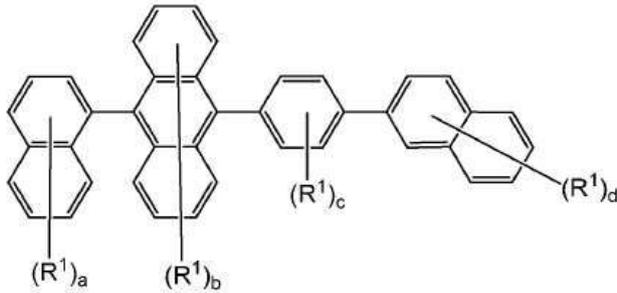
면, 발광층)과 접촉층(정공 주입 접촉층) 사이에 위치한다. 하나의 장치는 둘 이상의 접촉층을 포함할 수 있다. 광활성층과 정공 주입 접촉층 사이에 정공 수송층이 위치할 수 있다. 정공 주입 접촉층은 애노드라 불릴 수도 있다. 광활성층과 전자 주입 접촉층 사이에 전자 수송층이 위치할 수 있다. 전자 주입 접촉층은 캐소드라 불릴 수도 있다.

[0008] 전자 장치에 사용되는 전기 활성 물질에 대한 요구는 계속되고 있다.

**발명의 내용**

[0009] 화학식 I을 갖는 화합물이 제공된다.

[0010] [화학식 I]



[0011]

[0012] 여기서,

[0013] R<sup>1</sup>은 각각의 경우에 동일하거나 상이하며, D, 알킬, 실릴, 게르밀, 중수소화 알킬, 중수소화 실릴, 및 중수소화 게르밀로 이루어진 군으로부터 선택되고;

[0014] a는 0~7의 정수이고;

[0015] b는 0~8의 정수이고;

[0016] c는 0~4의 정수이고;

[0017] d는 0~7의 정수이다.

[0018] (a) 화학식 I을 갖는 호스트 화합물 및 (b) 광활성 도펀트를 포함하는 전기 활성 조성물이 또한 제공된다.

[0019] 임의의 화학식 I을 갖는 화합물을 포함하는 적어도 하나의 층을 갖는 전자 장치가 또한 제공된다.

[0020] 전기 활성 조성물을 포함하는 광활성층을 갖는 전자 장치가 또한 제공된다.

[0021] 전술한 일반적인 설명 및 다음의 상세한 설명은 단지 예시적이고 설명적인 것이며, 첨부된 청구범위에서 정의되는 본 발명을 제한하지 않는다.

**도면의 간단한 설명**

[0022] 본원에 제시된 개념의 이해를 돕기 위해 첨부 도면으로 구현예가 예시된다.

도 1은 본원에 기술된 화합물을 포함하는 유기 전자 장치의 일례에 대한 예시를 포함한다.

도 2는 본원에 기술된 화합물을 포함하는 유기 전자 장치의 다른 예에 대한 예시를 포함한다.

당업자는 도면에서 대상물이 간결하고 명료하게 도시되어 있고, 반드시 일정한 비율로 그려진 것은 아님을 이해한다. 예를 들어, 도면에서 일부 대상물의 치수는 구현예의 이해를 돕기 위해 다른 대상물에 비해 과장될 수 있다.

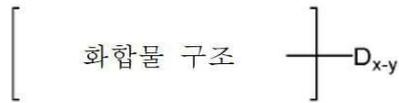
**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0023] 하기에 상세히 기술된 바와 같이, 화학식 I을 갖는 화합물이 제공된다.

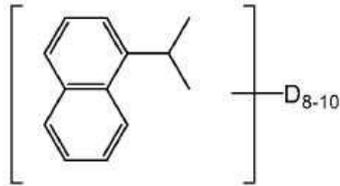
[0024] 하기에 상세히 기술된 바와 같이, (a) 화학식 I을 갖는 호스트 화합물 및 (b) 광활성 도펀트를 포함하는 전기 활성 조성물이 또한 제공된다.

- [0025] 임의의 화학식 I을 갖는 화합물을 포함하는 적어도 하나의 층을 갖는 전자 장치가 또한 제공된다.
- [0026] 또한, 전기 활성 조성물을 포함하는 광활성층을 갖는 전자 장치가 제공된다.
- [0027] 많은 양태 및 구현예가 위에서 설명되었고, 이는 단지 예시적인 것이며 제한적인 것은 아니다. 본 명세서를 읽은 후에, 당업자는 본 발명의 범주를 벗어나지 않고 다른 양태 및 구현예가 가능하다는 것을 이해한다.
- [0028] 임의의 하나 이상의 구현예에 대한 다른 특징 및 이점은 다음의 상세한 설명 및 청구 범위로부터 명백해질 것이다. 상세한 설명은 우선 용어의 정의 및 설명을 다루고, 이어서 화학식 I을 갖는 화합물, 전기 활성 조성물, 전자 장치, 그리고 마지막으로 실시예를 다룬다.
- [0029] 1. 용어의 정의 및 설명
- [0030] 이하에서 기술되는 구현예를 상세히 다루기 전에, 일부 용어를 정의하거나 설명한다.
- [0031] "용어의 정의 및 설명"에서 사용되는 R, R' 및 R" 및 임의의 기타 변수들은 일반적인 명칭이며, 화학식에서 정의되는 것과 동일하거나 다를 수 있다.
- [0032] 용어 "알킬"은 지방족 탄화수소로부터 유도된 기를 의미하고자 하는 것이며, 선형, 분지형, 또는 환형 기를 포함한다. 화합물로 "부터 유도된" 기는 하나 이상의 H 또는 D를 제거함으로써 형성된 라디칼을 나타낸다. 용어 "분지형 알킬"은 적어도 하나의 2차 또는 3차 탄소를 갖는 지방족 탄화수소로부터 유도된 기를 의미하고자 하는 것이다. 일부 구현예에서, 알킬은 1~20개의 탄소 원자를 갖는다.
- [0033] 용어 "방향족 화합물"은 4n+2개의 비편재화  $\pi$  전자를 갖는 적어도 하나의 불포화 환형기를 포함하는 유기 화합물을 의미하고자 하는 것이다.
- [0034] 용어 "아릴"은 적어도 하나의 부착점을 갖는 방향족 화합물로부터 유도된 기를 의미하고자 하는 것이다. 이 용어는 단일 고리를 갖는 기 및 서로 축합되거나 단일 결합에 의해 결합될 수 있는 다중 고리를 갖는 기를 포함한다. 탄화수소 아릴기는 고리 구조 내에 탄소만을 갖는다. 헤테로아릴기는 고리 구조 내에 적어도 하나의 헤테로 원자를 갖는다. 일 구현예에서, 탄화수소 아릴기는 6~30개의 고리 탄소를 갖는다. 일 구현예에서, 헤테로아릴기는 3~30개의 고리 탄소를 갖는다.
- [0035] 용어 "알콕시"는 R이 알킬인 -OR기를 의미하고자 하는 것이다.
- [0036] 용어 "아릴옥시"는 R이 아릴인 -OR기를 의미하고자 하는 것이다.
- [0037] 달리 명시되지 않는 한, 모든 기는 치환되거나 치환되지 않을 수 있다. 알킬 또는 아릴(이에 한정되는 것은 아님)과 같은 선택적으로 치환된 기는 동일하거나 상이할 수 있는 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다. 적합한 치환기는 D, 알킬, 아릴, 니트로, 시아노, -N(R')(R"), 할로, 하이드록시, 카복시, 알케닐, 알킬닐, 시클로알킬, 헤테로아릴, 알콕시, 아릴옥시, 헤테로아릴옥시, 알콕시카보닐, 퍼플루오로알킬, 퍼플루오로알콕시, 아릴알킬, 실릴, 실록시, 실록산, 티오알콕시, -S(O)<sub>2</sub>-, -C(=O)-N(R')(R"), (R')(R")N-알킬, (R')(R")N-알콕시알킬, (R')(R")N-알킬아릴옥시알킬, -S(O)<sub>s</sub>-아릴(s는 0 내지 2) 또는 -S(O)<sub>s</sub>-헤테로아릴(s는 0 내지 2)을 포함한다. 각각의 R'와 R"은 독립적으로 선택적 치환된 알킬, 시클로알킬, 또는 아릴기이다. R' 및 R"은, 이들에 결합된 질소 원자와 함께, 특정 구현예에서 고리 시스템을 형성할 수 있다. 치환기는 가교기일 수도 있다. 유효 수소(available hydrogen)를 갖는 상기 기들 중 임의의 기는 중수소화될 수도 있다.
- [0038] 층, 물질, 부재 또는 구조체를 언급할 때, 용어 "전하 수송"은, 이러한 층, 물질, 부재, 또는 구조체가, 상대적 효율성과 적은 전하 손실을 가지고 이러한 층, 물질, 부재, 또는 구조체의 두께를 통한 이러한 전하의 이동을 용이하게 함을 의미하고자 하는 것이다. 정공 수송 물질은 양 전하를 촉진시키고, 전자 수송 물질은 음 전하를 촉진시킨다. 발광 물질도 약간의 전하 수송 특성을 가질 수 있지만, 용어 "전하 수송층, 전하 수송 물질, 전하 수송 부재, 또는 전하 수송 구조체"는 발광을 주된 기능으로 하는 층, 물질, 부재 또는 구조체를 포함하고자 하는 것은 아니다.
- [0039] 용어 "화합물"은, 화학 결합을 끊지 않고는 물리적 수단에 의해 해당 분자로부터 분리될 수 없는 원자를 더 포함하는 분자로 이루어진 전기적으로 대전되지 않은 물질을 의미하고자 하는 것이다. 이 용어는 올리고머 및 중합체를 포함하고자 하는 것이다.
- [0040] 용어 "중수소화"는 적어도 하나의 수소("H")가 중수소("D")로 치환되었음을 의미하고자 하는 것이다. 용어 "중수소화 유사체"는 하나 이상의 유효 수소가 중수소로 치환된 화합물 또는 기의 구조적 유사체를 지칭한다. 중수

소화 화합물 또는 중수소화 유사체에는, 중수소가 자연에 존재하는 수준의 적어도 100배로 존재한다. 하기의 표기



는 화합물이 임의의 유효 위치에서 중수소화되어 있고 중수소 치환기의 총 수는 x 내지 y임을 나타낸다. 예를 들어, 하기 화합물은 임의의 유효 위치에서 8-10개의 중수소 치환기를 갖는다.



용어 "도펀트"는 호스트 물질을 포함하는 층 내에서, 그 층의 전자 특성(들), 또는 방사선 방출, 수광 또는 필터링의 목표 파장(들)을, 이러한 물질이 존재하지 않는 층의 전자 특성(들), 또는 방사선 방출, 수광 또는 필터링의 파장(들)에 비해 변화시키는 물질을 의미하고자 하는 것이다. 용어 "호스트 물질"은 도펀트가 분산되는 물질을 의미하고자 하는 것이다. 호스트 물질은 전자 특성(들), 또는 방사선을 방출, 수광, 또는 필터링하는 능력을 갖거나 갖지 않을 수 있다. 일부 구현예에서, 호스트 물질은 도펀트보다 높은 농도로 존재한다.

층 또는 물질을 지칭할 때의 용어 "전기 활성"은 장치의 작동을 전자적으로 용이하게 하는 층 또는 물질을 나타내고자 하는 것이다. 전기 활성 물질의 예는 전자 또는 정공일 수 있는 전하를 전도, 주입, 수송, 또는 차단하는 물질, 또는 방사선을 받을 때, 전자-정공 쌍의 농도 변화를 나타내거나 방사선을 방출하는 물질을 포함하나, 이에 한정되는 것은 아니다. 비활성 물질의 예는 평탄화 물질, 절연 물질, 및 환경 장벽 물질을 포함하나, 이에 한정되는 것은 아니다.

접두사 "플루오로"는 하나의 기에서 하나 이상의 수소가 불소로 치환되었음을 나타내고자 하는 것이다.

용어 "게르밀"은 R<sub>3</sub>Ge-기를 지칭하며, 여기서, R은 각각의 경우에 동일하거나 상이하고, H, D, C1-20 알킬, 중수소화 알킬, 플루오로알킬, 아릴, 또는 중수소화 아릴이다.

접두사 "헤테로"는 하나 이상의 탄소 원자가 다른 원자로 치환되었음을 나타낸다. 일부 구현예에서, 헤테로원자는 O, N, S, 또는 이들의 조합이다.

용어 "액체 조성물"은 물질이 용해되어 용액을 형성하는 액체 매질, 물질이 분산되어 분산액을 형성하는 액체 매질, 또는 물질이 현탁되어 현탁액이나 유화액을 형성하는 액체 매질을 의미하고자 하는 것이다.

용어 "광활성"은 (발광 다이오드 또는 화학전지에서와 같이) 인가 전압에 의해 활성화되었을 때 발광하거나, (다운컨버팅 인광 장치에서와 같이) 광자를 흡수한 후 발광하거나, (광검출기 또는 광전지에서와 같이) 복사에너지에 응답하여 인가 바이어스 전압의 존재 또는 부재 하에 신호를 생성하는 물질 또는 층을 나타낸다.

용어 "실록산"은 R<sub>3</sub>SiOR<sub>2</sub>Si-기를 지칭하며, 여기서 R은 각각의 경우에 동일하거나 상이하며, H, D, C1-20 알킬, 중수소화 알킬, 플루오로알킬, 아릴, 또는 중수소화 아릴이다. 일부 구현예에서, R 알킬기에서의 하나 이상의 탄소는 Si로 치환된다.

용어 "실록시"는 R<sub>3</sub>SiO-기를 지칭하며, 여기서, R은 각각의 경우에서 동일하거나 상이하며, H, D, C1-20 알킬, 중수소화 알킬, 플루오로알킬, 아릴, 또는 중수소화 아릴이다.

용어 "실릴"은 R<sub>3</sub>Si-기를 지칭하며, 여기서, R은 각각의 경우에 동일하거나 상이하며, H, D, C1-20 알킬, 중수소화 알킬, 플루오로알킬, 아릴, 또는 중수소화 아릴이다. 일부 구현예에서, R 알킬기에서의 하나 이상의 탄소는 Si로 치환된다.

[0054] 치환기 결합이 아래에 나타낸 바와 같이 하나 이상의 고리를 관통하는 구조에서,



[0055]

[0056] 치환기 R이 하나 이상의 고리 상의 임의의 유효 위치에서 결합될 수 있음을 의미한다.

[0057] 장치 내의 층을 나타내는 데 어구 "~에 인접한"이 사용되는 경우, 하나의 층이 다른 층의 바로 옆에 있음을 반드시 의미하는 것은 아니다. 한편, 어구 "인접한 R기"는 화학식에서 서로 인접한 R기(즉, 결합에 의해 연결된 원자 상에 있는 R기)를 나타내는 데 사용된다. 예시적인 인접한 R기는 아래와 같다.



[0058]

[0059] 본 명세서에서, 명시적으로 달리 언급하거나 용법의 맥락에서 반하여 나타내지 않는 한, 본원 요지의 구현예가 특정 특징 또는 요소를 포함하거나, 내포하거나, 함유하거나, 갖거나, 이로 이루어지거나 또는 이에 의해 또는 이로 구성되는 것으로 언급되거나 기술되는 경우, 명시적으로 언급하거나 기술한 것 이외의 하나 이상의 특징 또는 요소가 구현예에 존재할 수 있다. 개시된 본원 요지의 대안적 구현예는 본질적으로 특정 특징 또는 요소로 이루어지는 것으로 기술되는데, 이러한 구현예에는 구현예의 작동 원리 또는 구별되는 특징을 실질적으로 변화시키는 특징 또는 요소가 존재하지 않는다. 기술된 본원 요지의 또 다른 대안적 구현예는 특정 특징 또는 요소로 이루어지는 것으로 기술되는데, 이러한 구현예 또는 그 비실질적 변형예에는 구체적으로 언급되거나 기술된 특징 또는 요소만이 존재한다.

[0060] 또한, 명확히 반대로 명시되지 않는 한, "또는"은 포함적 논리합을 의미하고, 배타적인 논리합을 의미하는 것이 아니다. 예를 들어, 조건 A 또는 B는 다음 중 임의의 하나에 의해 충족된다: A는 참(또는 존재) B는 거짓(또는 부존재), A는 거짓(또는 부존재) B는 참(또는 존재), 및 A와 B 모두 참(또는 존재).

[0061] 또한, 본원에 기재된 요소들 및 성분들을 설명하기 위해 단수형 명사를 사용한다. 이는 단지 편의와 발명의 범위의 일반적인 의미를 제공하기 위함이다. 이러한 설명은 하나 또는 적어도 하나를 포함하도록 읽어야 하며, 단수형은 명백하게 단수임을 의미하는 것이 아니라면 복수형도 포함한다.

[0062] 원소의 주기율표 내의 열(column)에 대응하는 족(group) 번호는 문헌[CRC Handbook of Chemistry and Physics, 81<sup>st</sup> Edition(2000-2001)]에 나타난 바와 같이 "새로운 표기(New Notation)" 규칙을 사용한다.

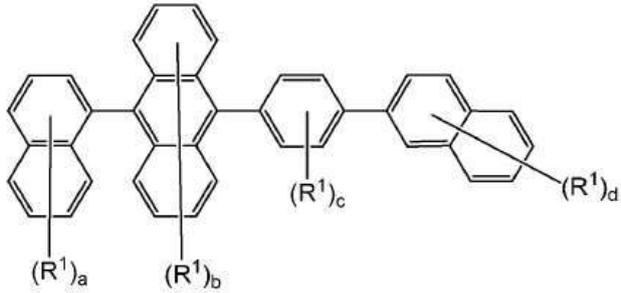
[0063] 달리 정의하지 않는 한, 본원에서 사용되는 모든 기술 및 과학 용어는 본 발명이 속하는 분야의 당업자에 의해 통상적으로 이해되는 바와 동일한 의미를 갖는다. 본원에 기술된 것과 유사하거나 동등한 방법 및 물질이 본 발명의 구현예의 실시 또는 시험에서 사용될 수 있지만, 적절한 방법 및 물질을 이하 설명한다. 특정 구절을 인용하지 않는 한, 본원에 언급된 모든 간행물, 특허 출원, 특허, 및 기타 참고 문헌은 그 전체가 참조로 포함된다. 서로 상충되는 경우, 정의를 포함하는 본 명세서가 우선할 것이다. 또한, 물질, 방법, 및 실시에는 단지 예시적인 것이며, 제한하고자 하는 것은 아니다.

[0064] 본원에 기술되지 않은 범위에서, 특정 재료, 프로세싱 동작 및 회로에 대한 많은 세부 사항은 통상적인 것이며, 유기 발광 다이오드 디스플레이, 광검출기, 광전지 및 반도체 부재 기술 분야의 교본 및 다른 자료에서 찾을 수 있다.

[0065] 2. 화학식 I의 화합물

[0066] 화학식 I을 갖는 화합물이 제공된다.

[0067] [화학식 I]



[0068]

[0069] 여기서,

[0070] R<sup>1</sup>은 각각의 경우에 동일하거나 상이하며, D, 알킬, 실릴, 게르밀, 중수소화 알킬, 중수소화 실릴, 및 중수소화 게르밀로 이루어진 군으로부터 선택되고;

[0071] a는 0~7의 정수이고;

[0072] b는 0~8의 정수이고;

[0073] c는 0~4의 정수이고;

[0074] d는 0~7의 정수이다.

[0075] 화학식 I의 일부 구현예에서, a = 0이다.

[0076] 화학식 I의 일부 구현예에서, a = 1이다.

[0077] 화학식 I의 일부 구현예에서, a = 2이다.

[0078] 화학식 I의 일부 구현예에서, a = 3이다.

[0079] 화학식 I의 일부 구현예에서, a = 4이다.

[0080] 화학식 I의 일부 구현예에서, a = 5이다.

[0081] 화학식 I의 일부 구현예에서, a = 6이다.

[0082] 화학식 I의 일부 구현예에서, a = 7이다.

[0083] 화학식 I의 일부 구현예에서, a > 0이다.

[0084] 화학식 I의 일부 구현예에서, b = 0이다.

[0085] 화학식 I의 일부 구현예에서, b = 1이다.

[0086] 화학식 I의 일부 구현예에서, b = 2이다.

[0087] 화학식 I의 일부 구현예에서, b = 3이다.

[0088] 화학식 I의 일부 구현예에서, b = 4이다.

[0089] 화학식 I의 일부 구현예에서, b = 5이다.

[0090] 화학식 I의 일부 구현예에서, b = 6이다.

[0091] 화학식 I의 일부 구현예에서, b = 7이다.

[0092] 화학식 I의 일부 구현예에서, b = 8이다.

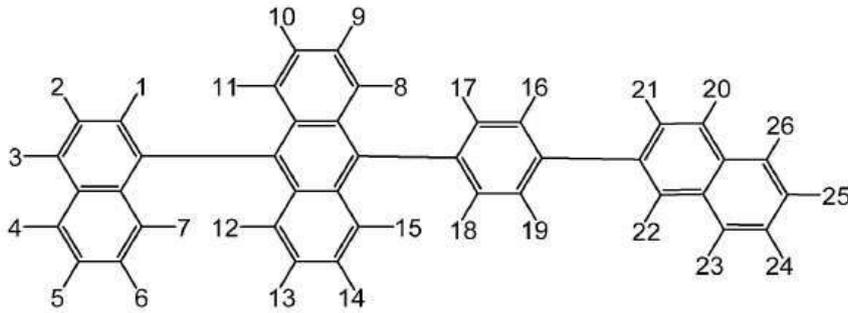
[0093] 화학식 I의 일부 구현예에서, b > 0이다.

[0094] 화학식 I의 일부 구현예에서, c = 0이다.

[0095] 화학식 I의 일부 구현예에서, c = 1이다.

- [0096] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $c = 2$ 이다.
- [0097] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $c = 3$ 이다.
- [0098] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $c = 4$ 이다.
- [0099] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $c > 0$ 이다.
- [0100] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $d = 0$ 이다.
- [0101] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $d = 1$ 이다.
- [0102] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $d = 2$ 이다.
- [0103] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $d = 3$ 이다.
- [0104] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $d = 4$ 이다.
- [0105] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $d = 5$ 이다.
- [0106] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $d = 6$ 이다.
- [0107] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $d = 7$ 이다.
- [0108] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $d > 0$ 이다.
- [0109] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $a = b = c = d = 0$ 이다.
- [0110] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $a + b + c + d = 1\sim 26$ 이다.
- [0111] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $a + b + c + d = 1\sim 10$ 이다.
- [0112] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $a + b + c + d = 1\sim 4$ 이다.
- [0113] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $a + b + c + d = 1\sim 26$ 이고  $R^1 = D$ 이다.
- [0114] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $a + b + c + d = 5\sim 26$ 이고  $R^1 = D$ 이다.
- [0115] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $a + b + c + d = 15\sim 26$ 이고  $R^1 = D$ 이다.
- [0116] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $a + b + c + d = 20\sim 26$ 이고  $R^1 = D$ 이다.
- [0117] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $a + b + c + d = 26$ 이고  $R^1 = D$ 이다.
- [0118] 화학식 I의 일부 구현예에서, a 내지 d 중 적어도 하나는 0이 아니고, 적어도 하나의  $R^1 = D$ 이다.
- [0119] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $a > 0$ 이고, 적어도 하나의  $R^1 = D$ 이다.
- [0120] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $b > 0$ 이고, 적어도 하나의  $R^1 = D$ 이다.
- [0121] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $c > 0$ 이고, 적어도 하나의  $R^1 = D$ 이다.
- [0122] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $d > 0$ 이고, 적어도 하나의  $R^1 = D$ 이다.
- [0123] 화학식 I의 일부 구현예에서, a 내지 d 중 적어도 하나는 0이 아니고, 적어도 하나의  $R^1 = 1\sim 6$ 개의 탄소(일부 구현예에서는 1~4개의 탄소)를 갖는 알킬 또는 중수소화 알킬이다.
- [0124] 화학식 I의 일부 구현예에서, a 내지 d 중 적어도 하나는 0이 아니고, 적어도 하나의  $R^1 =$  트리메틸실릴 또는 이의 중수소화 유사체이다.
- [0125] 화학식 I의 일부 구현예에서, a 내지 d 중 적어도 하나는 0이 아니고, 적어도 하나의  $R^1 =$  트리메틸게르밀 또는 이의 중수소화 유사체이다.

[0126] 화합물 상의 위치는 다음과 같이 표지될 수 있다:



[0127]

[0128] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $a > 0$ 이고, 적어도 하나의  $R^1 = D$ 이다. 일부 구현예에서, 적어도 하나의  $R^1 = D$ 이고, 1-7 중 적어도 하나의 위치에 존재한다.

[0129] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $a > 0$  이고, 적어도 하나의  $R^1$ 은 1~6개의 탄소를 갖는 알킬 또는 중수소화 알킬이다. 일부 구현예에서, 적어도 하나의  $R^1$ 은 알킬 또는 중수소화 알킬이고, 2, 3, 4, 및 5 중 적어도 하나의 위치에 존재한다.

[0130] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $a > 0$ 이고, 적어도 하나의  $R^1$ 은 트리메틸실릴 또는 중수소화 트리메틸실릴이다. 일부 구현예에서, 적어도 하나의  $R^1$ 은 트리메틸실릴 또는 중수소화 트리메틸실릴이고, 2, 3, 4, 및 5 중 적어도 하나의 위치에 존재한다.

[0131] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $a > 0$  이고, 적어도 하나의  $R^1$ 은 트리메틸게르닐 또는 중수소화 트리메틸게르닐이다. 일부 구현예에서, 적어도 하나의  $R^1$ 은 트리메틸게르닐 또는 중수소화 트리메틸게르닐이고, 2, 3, 4, 및 5 중 적어도 하나의 위치에 존재한다.

[0132] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $b > 0$ 이고, 적어도 하나의  $R^1 = D$ 이다. 일부 구현예에서, 적어도 하나의  $R^1 = D$ 이고, 8-15 중 적어도 하나의 위치에 존재한다.

[0133] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $b > 0$  이고, 적어도 하나의  $R^1$ 은 1~6개의 탄소를 갖는 알킬 또는 중수소화 알킬이다. 일부 구현예에서, 적어도 하나의  $R^1$ 은 알킬 또는 중수소화 알킬이고, 9, 10, 13, 및 14 중 적어도 하나의 위치에 존재한다.

[0134] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $b > 0$ 이고, 적어도 하나의  $R^1$ 은 트리메틸실릴 또는 중수소화 트리메틸실릴이다. 일부 구현예에서, 적어도 하나의  $R^1$ 은 트리메틸실릴 또는 중수소화 트리메틸실릴이고, 9, 10, 13, 및 14 중 적어도 하나의 위치에 존재한다.

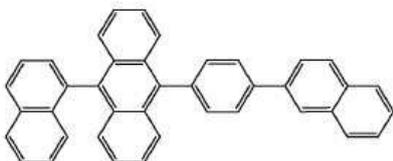
[0135] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $b > 0$  이고, 적어도 하나의  $R^1$ 은 트리메틸게르닐 또는 중수소화 트리메틸게르닐이다. 일부 구현예에서, 적어도 하나의  $R^1$ 은 트리메틸게르닐 또는 중수소화 트리메틸게르닐이고, 9, 10, 13, 및 14 중 적어도 하나의 위치에 존재한다.

[0136] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $c > 0$ 이고, 적어도 하나의  $R^1 = D$ 이다. 일부 구현예에서, 적어도 하나의  $R^1 = D$ 이고, 16-19 중 적어도 하나의 위치에 존재한다.

[0137] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $d > 0$ 이고, 적어도 하나의  $R^1 = D$ 이다. 일부 구현예에서, 적어도 하나의  $R^1 = D$ 이고, 20-26 중 적어도 하나의 위치에 존재한다.

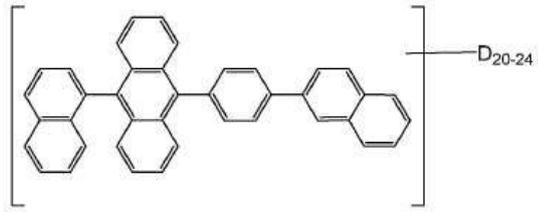
[0138] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $d > 0$  이고, 적어도 하나의  $R^1$ 은 1~6개의 탄소를 갖는 알킬 또는 중수소화 알킬이다. 일부 구현예에서, 적어도 하나의  $R^1$ 은 알킬 또는 중수소화 알킬이고, 20, 23, 24, 25, 및 26 중 적어도 하나의 위치에 존재한다.

- [0139] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $d > 0$ 이고, 적어도 하나의  $R^1$ 은 트리메틸실릴 또는 중수소화 트리메틸실릴이다. 일부 구현예에서, 적어도 하나의  $R^1$ 은 트리메틸실릴 또는 중수소화 트리메틸실릴이고, 20, 23, 24, 25, 및 26 중 적어도 하나의 위치에 존재한다.
- [0140] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $d > 0$  이고, 적어도 하나의  $R^1$ 은 트리메틸게르밀 또는 중수소화 트리메틸게르밀이다. 일부 구현예에서, 적어도 하나의  $R^1$ 은 트리메틸게르밀 또는 중수소화 트리메틸게르밀이고, 20, 23, 24, 25, 및 26 중 적어도 하나의 위치에 존재한다.
- [0141] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $a = 1$ 이고,  $R^1$ 은 2, 3, 4, 및 5 중 하나의 위치에 존재한다.
- [0142] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $b = 1$ 이고,  $R^1$ 은 9, 10, 13, 및 14 중 하나의 위치에 존재한다.
- [0143] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $d = 1$ 이고,  $R^1$ 은 20, 23, 24, 25, 및 26 중 하나의 위치에 존재한다.
- [0144] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $a$  내지  $d$  중 적어도 하나는 0이 아니고, 적어도 하나의  $R^1$ 은 알킬 또는 중수소화 알킬이며, 2, 3, 4, 5, 9, 10, 13, 14, 20, 23, 24, 25, 및 26 중 적어도 하나의 위치에 존재한다.
- [0145] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $a$  내지  $d$  중 적어도 하나는 0이 아니고, 적어도 하나의  $R^1$ 은 트리메틸실릴 또는 중수소화 트리메틸실릴이며, 2, 3, 4, 5, 9, 10, 13, 14, 20, 23, 24, 25, 및 26 중 적어도 하나의 위치에 존재한다.
- [0146] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $a$  내지  $d$  중 적어도 하나는 0이 아니고, 적어도 하나의  $R^1$ 은 트리메틸게르밀 또는 중수소화 트리메틸게르밀이며, 2, 3, 4, 5, 9, 10, 13, 14, 20, 23, 24, 25, 및 26 중 적어도 하나의 위치에 존재한다.
- [0147] 화학식 I의 일부 구현예에서,  $a$  내지  $d$  중 적어도 하나는 0이 아니고, 적어도 하나의  $R^1$ 은 알킬, 트리메틸실릴, 트리메틸게르밀, 및 이들의 중수소화 유사체로 이루어진 군으로부터 선택되며, 2, 3, 4, 5, 9, 10, 13, 14, 20, 23, 24, 25, 및 26 중 적어도 하나의 위치에 존재한다.
- [0148] 상호 배타적이지 않은 한, 화학식 I에 대한 상기 임의의 구현예를 하나 이상의 다른 구현예와 조합할 수 있다. 예를 들어,  $a = 1$ 인 구현예가 적어도 하나의  $R^1$ 이 알킬인 구현예 및  $b = 1$ 이고 적어도 하나의  $R^1$ 이 D인 구현예와 조합될 수 있다. 이는 위에서 논의된 상호 배타적이지 않은 다른 구현예에 대해서도 동일하게 적용된다. 당업자는 어떤 구현예가 상호 배타적인지를 이해할 것이므로, 본 출원에서 고려되는 구현예의 조합을 쉽게 결정할 수 있을 것이다.
- [0149] 화학식 I의 화합물은 C-C 결합을 생성하는 임의의 기술을 이용해 제조될 수 있다. 스즈키(Suzuki), 야마모토(Yamamoto), 및 스틸(Stille) 커플링뿐만 아니라 금속 촉매 산화 직접 아릴화와 같은 다양한 이러한 기술이 공지되어 있다.
- [0150] 중수소화 화합물은 중수소화 전구체 물질을 이용하여 유사한 방식으로 제조될 수 있거나, 보다 일반적으로는, 중수소화되지 않은 화합물을 삼염화알루미늄 또는 이염화에틸알루미늄과 같은 루이스산 H/D 교환 촉매 또는 트리플루오로메탄술폰산과 같은 브뢴스테드산 H/D 교환 촉매의 존재 하에 벤젠-d6과 같은 중수소화 용매로 처리하여 제조될 수 있다.
- [0151] 예시적인 제조는 실시예에서 제공된다.
- [0152] 화학식 I을 갖는 화합물의 일부 비제한적인 예는 다음과 같다.
- [0153] [화합물 1]



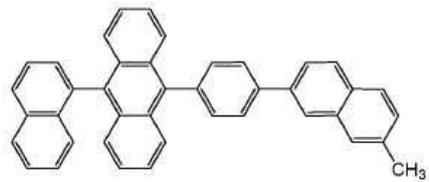
[0154]

[0155] [화합물 2]



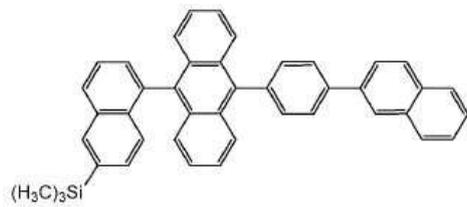
[0156]

[0157] [화합물 3]



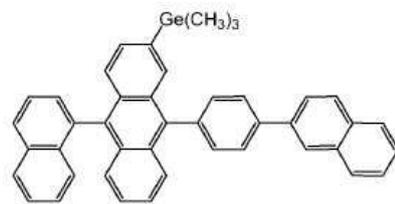
[0158]

[0159] [화합물 4]



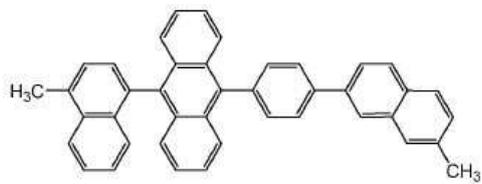
[0160]

[0161] [화합물 5]



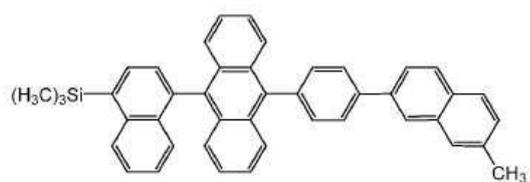
[0162]

[0163] [화합물 6]



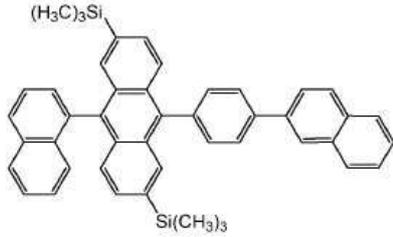
[0164]

[0165] [화합물 7]



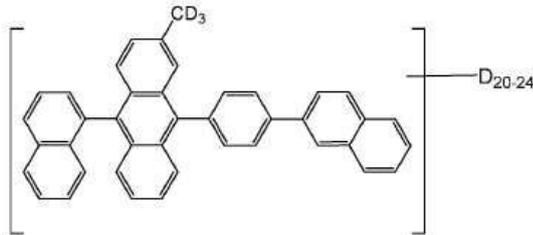
[0166]

[0167] [화합물 8]



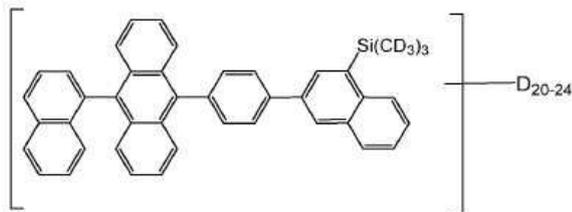
[0168]

[0169] [화합물 9]



[0170]

[0171] [화합물 10]



[0172]

[0173] 화합물은 전자 장치용 층으로 형성될 수 있다. 용어 "층"은 용어 "막"과 상호 교환적으로 사용되며, 원하는 영역을 덮는 코팅을 의미한다. 이 용어는 크기에 의해 제한되지 않는다. 상기 영역은 전체 장치만큼 크거나, 실제 영상 디스플레이와 같은 특정 기능 영역만큼 작거나, 단일 서브픽셀만큼 작을 수 있다. 층과 막은 기상 증착, 액상 증착(연속 및 불연속 기술), 및 열 전사를 비롯한 임의의 종래 증착 기술에 의해 형성될 수 있다. 연속 액상 증착 기술은 스핀 코팅, 그라비아 코팅, 커튼 코팅, 딥 코팅, 슬롯-다이 코팅, 스프레이 코팅, 및 연속 노즐 코팅을 포함하지만, 이에 한정되는 것은 아니다. 불연속 액상 증착 기술은 잉크젯 프린팅, 그라비아 프린팅, 및 스크린 프린팅을 포함하지만, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0174] 일부 구현예에서, 화학식 I을 갖는 신규 화합물은 장치에서 정공 수송 물질로 사용될 수 있다.

[0175] 일부 구현예에서, 화학식 I을 갖는 신규 화합물은 전계발광성이며, 장치에서 발광 물질로 사용될 수 있다.

[0176] 일부 구현예에서, 화학식 I을 갖는 신규 화합물은 전계발광 물질에 대한 호스트로 사용될 수 있다.

[0177] 일부 구현예에서, 화학식 I을 갖는 신규 화합물은 장치에서 전자 수송 물질로 사용될 수 있다.

[0178] 3. 전기 활성 조성물

[0179] 전기 활성 조성물은 (a) 화학식 I을 갖는 호스트 화합물 및 (b) 광활성 도펀트를 포함한다.

[0180] 화학식 I을 갖는 호스트 화합물은 상기에 상세히 기술되어 있다.

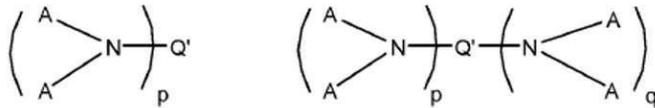
[0181] 전기 활성 조성물에서 도펀트로 사용될 수 있는 전계발광("EL") 물질은 소분자 유기 발광 화합물, 발광 금속 착물, 공액 중합체, 및 이들의 혼합물을 포함하나, 이에 한정되는 것은 아니다. 소분자 발광 유기 화합물의 예는 크리센, 피렌, 페릴렌, 루브렌, 쿠마린, 안트라센, 스틸벤, 티아디아졸, 벤조플루오렌, 나프토피란, 이들의 유도체, 이들의 중수소화 유사체, 및 이들의 혼합물을 포함하나, 이에 한정되는 것은 아니다. 금속 착물의 예는 금속 킬레이트화 옥시노이드 화합물 및 이리듐 및 백금과 같은 금속의 시클로메탈화 착물을 포함하나, 이에 한정되는 것은 아니다. 공액 중합체의 예는, 폴리(페닐렌비닐렌), 폴리플루오렌, 폴리(스피로비플루오렌), 폴리티오펜, 폴리(p-페닐렌), 이들의 공중합체, 이들의 중수소화 유사체, 및 이들의 혼합물을 포함하나, 이에 한정되

는 것은 아니다.

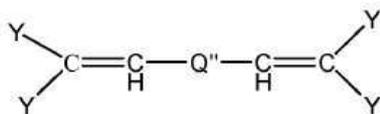
- [0182] 일부 구현예에서, 도펀트는 중수소화된다.
- [0183] 일부 구현예에서, 도펀트는 작은 유기 발광 화합물이다.
- [0184] 일부 구현예에서, 도펀트는 비고분자 스피로비플루오렌 화합물, 플루오란텐 화합물, 이들의 치환 유도체, 및 이들의 중수소화 유사체로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0185] 일부 구현예에서, 도펀트는 아릴 아민기를 갖는 화합물이다. 일부 구현예에서, 도펀트는 하기 화학식 II 또는 화학식 III을 갖는다.

[화학식 II]

[화학식 III]



- [0186]
- [0187] 여기서,
- [0188] A는 3~60개의 고리 탄소 원자를 갖는 탄화수소 아릴 또는 헤테로아릴기로서 각각의 경우에 동일하거나 상이하고;
- [0189] Q'는 3~60개의 고리 탄소 원자를 갖는 탄화수소 아릴 또는 헤테로아릴이고;
- [0190] p 및 q는 독립적으로 1~6의 정수이다.
- [0191] 상기 화학식의 일부 구현예에서, 각각의 화학식의 Q'는 적어도 3개의 축합 고리를 갖는다.
- [0192] 화학식 II 및 화학식 III의 일부 구현예에서, p 및 q는 1이다.
- [0193] 화학식 II 및 화학식 III의 일부 구현예에서 Q'는 스티릴 또는 스티릴페닐기이다.
- [0194] 화학식 II 및 화학식 III의 일부 구현예에서, Q'는 적어도 2개의 축합 고리를 갖는 방향족기이다. 일부 구현예에서, Q'는 나프탈렌, 안트라센, 크리센, 피렌, 테트라센, 잔텐, 페릴렌, 쿠마린, 로다민, 퀴나크리돈, 루브렌, 페난트렌, 벤조플루오렌, 나프토피란, 나프토티피란, 나프토티리피란, 나프토티테트라피란, 이들의 치환 유도체, 및 이들의 중수소화 유사체로 이루어진 군으로부터 선택되는 화합물로부터 유도된다.
- [0195] 화학식 II 및 화학식 III의 일부 구현예에서, Q'는 안트라센, 크리센, 피렌, 벤조플루오렌, 나프토피란, 나프토티피란, 이들의 치환 유도체, 및 이들의 중수소화 유사체로 이루어진 군으로부터 선택되는 화합물로부터 유도된다.
- [0196] 화학식 II 및 화학식 III의 일부 구현예에서, A는 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 나프틸페닐, 안트라세닐, 이들의 치환 유도체, 및 이들의 중수소화 유사체로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0197] 일부 구현예에서, 도펀트는 하기 화학식을 갖는다.



- [0198]
- [0199] 여기서,
- [0200] Y는 3~60개의 탄소 원자를 갖는 방향족기로서 각각의 경우에 동일하거나 상이하고;
- [0201] Q''는 방향족기, 2가 트리페닐아민 잔기, 또는 단일 결합이다.
- [0202] 일부 구현예에서, 도펀트는 아릴 아센이다. 일부 구현예에서, 도펀트는 비대칭 아릴 아센이다.
- [0203] 일부 구현예에서, 도펀트는 청색 발광성이다. 용어 "청색 발광"은 약 400~500 nm 범위의 파장에서 발광 최대치를 갖는 방사선을 방출할 수 있는 물질을 의미하고자 하는 것이다. 일부 구현예에서, 발광 최대치는 약 445~490 nm 범위의 파장에 있다. 일부 구현예에서, 도펀트는 C.I.E. 색도(Commission Internationale de L'Eclairage,

1931)에 따른 0.15 미만; 일부 구현예에서는 0.10 미만; 일부 구현예에서는 0.090 미만의 광루미네선스  $y$ -좌표를 갖는다.

[0204] 일부 구현예에서, 도펀트는,  $p = q = 1$ 이고 Q'가 안트라센, 크리센, 피렌, 벤조플루오렌, 나프토피란, 나프토티피란, 이들의 치환 유도체, 및 이들의 중수소화 유사체로 이루어진 군으로부터 선택되는 화합물로부터 유도되는 화학식 III을 갖는다.

[0205] 일부 구현예에서, 도펀트 대 화학식 I을 갖는 호스트 화합물의 중량비는 2:98 내지 50:50, 일부 구현예에서는, 3:97 내지 30:70, 일부 구현예에서는 5:95 내지 20:80의 범위이다.

[0206] 일부 구현예에서, 놀랍고도 예기치 않게, 본원에 기술된 신규 전기 활성 조성물을 포함하는 장치는 유사한 안트라센 호스트 화합물에 비해 수명이 연장된다. 일부 구현예에서, 화학식 I을 갖는 비중수소화 화합물을 함유한 신규 전기 활성 조성물을 포함하는 장치는 유사한 중수소화 안트라센 호스트 화합물과 거의 동일한 수명을 갖는다.

[0207] 일부 구현예에서, 놀랍고도 예기치 않게, 본원에 기술된 신규 전기 활성 조성물을 포함하는 장치는 유사한 안트라센 호스트 화합물에 비해 효율이 증가된다.

[0208] 4. 전자 장치

[0209] 본원에 기술되는 바와 같이 적어도 하나의 화합물을 포함하는 하나 이상의 층을 가짐으로써 장점을 가질 수 있는 유기 전자 장치는 (1) 전기에너지를 방사선으로 변환하는 장치(예컨대, 발광 다이오드, 발광 다이오드 디스플레이, 점등 장치, 조명기구, 다이오드 레이저); (2) 전자 프로세스를 통해 신호를 검출하는 장치(예컨대, 광검출기, 광전도성 전지, 포토레지스터, 광스위치, 포토트랜지스터, 광튜브, IR 검출기, 바이오센서); (3) 방사선을 전기에너지로 변환하는 장치(예컨대, 광전지 장치 또는 태양전지); (4) 하나의 파장의 빛을 더 긴 파장의 빛으로 변환하는 장치(예컨대, 다운컨버팅 인광 장치); 및 (5) 하나 이상의 유기 반도체층을 포함하는 하나 이상의 전자 부품을 포함하는 장치(예컨대, 트랜지스터 또는 다이오드)를 포함하나, 이에 한정되는 것은 아니다. 본 발명에 따른 조성물의 다른 용도는, 메모리 저장 장치, 정전기 방지막, 바이오 센서, 전기 변색 장치, 고체 전해질 커패시터, 충전지와 같은 에너지 저장 장치, 및 전자기 차폐 장치 응용 제품용 코팅 재료를 포함한다.

[0210] 본원에 기술된 신규 조성물을 포함하는 유기 전자 장치 구조의 일례가 도 1에 도시되어 있다. 장치(100)는 제1 전기 접촉층인 애노드층(110), 제2 전기 접촉층인 캐소드층(160), 및 이들 사이의 광활성층(140)을 갖는다. 추가적인 층이 선택적으로 존재할 수 있다. 애노드에 인접하여, 때로는 버퍼층이라고 하는 정공 주입층(120)이 있을 수 있다. 정공 주입층에 인접하여, 정공 수송 물질을 포함하는 정공 수송층(130)이 있을 수 있다. 캐소드에 인접하여, 전자 수송 물질을 포함하는 전자 수송층(150)이 있을 수 있다. 선택적으로, 장치에는, 애노드(110) 옆의 하나 이상의 추가적인 정공 주입층 또는 정공 수송층(미도시), 및/또는 캐소드(160) 옆의 하나 이상의 추가적인 전자 주입층 또는 전자 수송층(미도시)이 사용될 수 있다. 층(120 내지 150)은, 개별적으로 그리고 집합적으로, 유기 활성층으로 지칭된다.

[0211] 일부 구현예에서, 완전색(full color)을 달성하기 위해, 발광층은 각각의 상이한 색상에 대한 서브픽셀 단위로 픽셀화된다. 픽셀화된 장치에 대한 일례가 도 2에 도시되어 있다. 장치(200)는 애노드(110), 정공 주입층(120), 정공 수송층(130), 광활성층(140), 전자 수송층(150), 및 캐소드(160)를 갖는다. 광활성층은 층에 걸쳐 반복되는 서브픽셀(141, 142, 143)로 분할된다. 일부 구현예에서, 서브픽셀은 적색, 청색, 및 녹색 방출을 나타낸다. 도 2에는 3개의 상이한 서브픽셀 단위가 도시되어 있지만, 2개 또는 3개보다 많은 서브픽셀 단위가 사용될 수 있다.

[0212] 상이한 층들은 도 1을 참조하여 본원에서 더 논의될 것이다. 그러나, 논의는 도 2 및 다른 구성에도 적용된다.

[0213] 일부 구현예에서, 서로 다른 층들은 다음과 같은 두께 범위를 갖는다: 애노드(110), 500~5000 Å, 일부 구현예에서는 1000~2000 Å; 정공 주입층(120), 50~2000 Å, 일부 구현예에서는 200~1000 Å; 정공 수송층(130), 50~3000 Å, 일부 구현예에서는 200~2000 Å; 광활성층(140), 10~2000 Å, 일부 구현예에서는 100~1000 Å; 전자 수송층(150), 50~2000 Å, 일부 구현예에서는 100~1000 Å; 캐소드(160), 200~10000 Å, 일부 구현예에서는 300~5000 Å. 층 두께의 원하는 비율은 사용되는 물질의 정확한 특성에 따라 달라질 것이다.

[0214] 본원에 기술된 화학식 I을 갖는 신규 화합물 중 하나 이상이 장치의 전기 활성층 중 하나 이상에 존재할 수 있다.

- [0215] 일부 구현예에서, 화학식 I을 갖는 신규 화합물은 층(130)에서 정공 수송 물질로서 유용하다.
- [0216] 일부 구현예에서, 화학식 I을 갖는 신규 화합물은 층(140)에서 광활성 물질로서 유용하다. 일부 구현예에서, 화학식 I을 갖는 신규 화합물은 하나 이상의 호스트 물질 내에 광활성 도펀트 물질로서 존재한다.
- [0217] 일부 구현예에서, 화학식 I을 갖는 화합물 및 도펀트를 포함하는 신규 조성물은 광활성층(140)으로서 유용하다.
- [0218] 일부 구현예에서, 유기 전자 장치는 애노드, 캐소드, 및 이들 사이의 적어도 하나의 유기 활성층을 포함하며, 유기 활성층은 화학식 I의 화합물을 포함한다.
- [0219] 일부 구현예에서, 유기 전자 장치는 애노드, 캐소드, 및 이들 사이의 광활성층을 포함하며, 광활성층은 화학식 I을 갖는 화합물 및 도펀트를 포함하는 조성물을 포함한다.
- [0220] 일부 구현예에서, 유기 전자 장치는 애노드, 캐소드, 및 이들 사이의 광활성층을 포함하며, 화학식 I의 화합물을 포함하는 추가적인 유기 활성층을 더 포함한다. 일부 구현예에서, 추가적인 유기 활성층은 정공 수송층이다.
- [0221] 애노드(110)는 양전하 캐리어 주입에 특히 효율적인 전극이다. 이는, 예를 들어 금속, 혼합 금속, 합금, 금속 산화물 또는 혼합 금속 산화물을 함유하는 물질로 이루어질 수 있거나, 전도성 중합체 및 이들의 혼합물일 수 있다. 적절한 금속은 11족 금속, 4족, 5족 및 6족의 금속, 및 8족 내지 10족의 전이 금속을 포함한다. 애노드가 투광성이어야 경우, 인듐-주석-산화물과 같은 12족, 13족 및 14족 금속의 혼합 금속 산화물이 일반적으로 사용된다. 애노드는 문헌 ["Flexible light-emitting diodes made from soluble conducting polymer", Nature vol. 357, pp 477 479 (1992년 6월 11일)]에 기재된 바와 같이, 폴리아닐린과 같은 유기 물질을 포함할 수도 있다. 애노드와 캐소드 중 적어도 하나는 생성된 광이 관찰될 수 있도록 적어도 부분적으로 투명해야 한다.
- [0222] 선택적 정공 주입층(120)은 정공 주입 물질을 포함한다. 용어 "정공 주입층" 또는 "정공 주입 물질"은, 전기 전도성 또는 반도체성(semiconductive) 물질을 의미하고자 하는 것이며, 유기 전자 장치에서 하나 이상의 기능(하부층의 평탄화, 전하 수송 및/또는 전하 주입 특성, 산소 또는 금속 이온과 같은 불순물의 제거, 및 유기 전자 장치의 성능을 용이하게 하거나 향상시키기 위한 다른 양태를 포함하나, 이에 한정되는 것은 아님)을 가질 수 있다. 정공 주입 물질은 중합체, 올리고머, 또는 소분자일 수 있고, 용액, 분산액, 현탁액, 유화액, 콜로이드 혼합물, 또는 다른 조성물의 형태일 수 있다.
- [0223] 정공 주입층은, 흔히 프로톤산으로 도핑되는, 폴리아닐린(PANI) 또는 폴리에틸렌디옥시티오펜(PEDOT)과 같은 고분자 재료로 형성될 수 있다. 프로톤산은, 예를 들어, 폴리(스티렌술폰산), 폴리(2-아크릴아미도-2-메틸-1-프로판술폰산) 등일 수 있다. 정공 주입층(120)은, 구리 프탈로시아닌 및 테트라티아폴발렌-테트라시아노퀴노디메탄계(TTF-TCNQ)와 같은, 전하 수송 화합물 등을 포함할 수 있다. 일부 구현예에서, 정공 주입층(120)은 전도성 중합체와 콜로이드-형성 고분자산의 분산액으로 제조된다. 이러한 물질은, 예를 들어, 미국 공개 특허 출원 2004-0102577, 2004-0127637, 및 2005-0205860에 기재되어 있다.
- [0224] 층(130)은 정공 수송 물질을 포함한다.
- [0225] 일부 구현예에서, 층(130)은 화학식 I을 갖는 화합물을 포함한다. 일부 구현예에서, 층(130)은 화학식 I을 갖는 화합물만을 포함하며, 층의 작동 원리 또는 특유의 특징을 실질적으로 변화시키는 추가 물질은 존재하지 않는다.
- [0226] 일부 구현예에서, 층(130)은 다른 정공 수송 물질을 포함한다. 정공 수송층용 정공 수송 물질의 예는, 예를 들어, 문헌[Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, Fourth Edition, Vol. 18, p. 837-860, 1996, Y. Wang저]에 요약되어 있다. 정공 수송 소분자 및 중합체 모두 사용될 수 있다. 일반적으로 사용되는 정공 수송 분자는 다음을 포함하나, 이에 한정되는 것은 아니다: 4,4',4"-트리스(N,N-디페닐-아미노)-트리페닐아민(TDATA); 4,4',4"-트리스(N-3-메틸페닐-N-페닐-아미노)-트리페닐아민(MTDATA); N,N'-디페닐-N,N'-비스(3-메틸페닐)-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD); 4,4'-비스(카바졸-9-일)비페닐(CBP); 1,3-비스(카바졸-9-일)벤젠(mCP); 1,1-비스[(디-4-톨릴아미노)페닐]시클로헥산(TAPC); N,N'-비스(4-메틸페닐)-N,N'-비스(4-에틸페닐)-[1,1'-(3,3'-디메틸)비페닐]-4,4'-디아민(ETPD); 테트라키스-(3-메틸페닐)-N,N,N',N'-2,5-페닐렌디아민(PDA); α-페닐-4-N,N-디페닐아미노스티렌(TPS); p-(디에틸아미노)벤즈알데하이드 디페닐히드라존(DEH); 트리페닐아민(TPA); 비스[4-(N,N-디에틸아미노)-2-메틸페닐](4-메틸페닐)메탄(MPMP); 1-페닐-3-[p-(디에틸아미노)스티릴]-5-[p-(디에틸아미노)페닐]피라졸린(PPR 또는 DEASP); 1,2-트랜스-비스(9H-카바졸-9-일)시클로부탄(DCZB); N,N,N',N'-테트라키스(4-메틸페닐)-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민(TTB); N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스-(페닐)벤지딘(α-NPB); 및 구리 프탈로시아닌과 같은 포르피린 화합물. 일반적으로 사용되는 정공 수송 중합체는

폴리비닐카바졸, (페닐메틸)폴리실란, 폴리(디옥시티오펜), 폴리아닐린, 및 폴리피롤을 포함하나, 이에 한정되는 것은 아니다. 폴리스티렌 및 폴리카보네이트와 같은 중합체에 상기 언급된 것과 같은 정공 수송 분자를 도핑함으로써, 정공 수송 중합체를 얻는 것도 가능하다. 일부 경우, 트리아릴아민 중합체, 특히 트리아릴아민-플루오렌 공중합체가 사용된다. 일부 경우, 중합체와 공중합체는 가교 가능하다. 가교성 정공 수송 중합체의 예는, 예를 들어 미국 공개 특허 출원 2005-0184287 및 공개 PCT 출원 WO 2005/052027에서 확인할 수 있다. 일부 구현예에서, 정공 수송층은 테트라플루오로테트라시아노퀴노디메탄 및 페릴렌-3,4,9,10-테트라카복실릭-3,4,9,10-디안하이드리드와 같은 p-도펀트로 도핑된다.

- [0227] 장치의 용도에 따라, 광활성층(140)은 (발광 다이오드 또는 발광 전기화학전지에서와 같이) 인가 전압에 의해 활성화되는 발광층, (다운컨버팅 인광 장치에서와 같이) 빛을 흡수하고 보다 긴 파장을 가진 빛을 방출하는 물질의 층, 또는 (광검출기 또는 광전지 장치에서와 같이) 복사에너지에 응답하여 인가 바이어스 전압의 존재 또는 부재 하에 신호를 생성하는 물질의 층일 수 있다.
- [0228] 일부 구현예에서, 광활성층은 광활성 물질로서 화학식 I을 갖는 화합물을 포함한다. 일부 구현예에서, 광활성층은 호스트 물질을 더 포함한다. 호스트 물질의 예는 크리센, 페난트렌, 트리페닐렌, 페난트롤린, 트리아진, 나프탈렌, 안트라센, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 퀴녹살린, 페닐피리딘, 카바졸, 인돌로카바졸, 인돌로인돌, 퓨란, 벤조퓨란, 디벤조퓨란, 벤조디퓨란, 나프토피란, 나프토티디퓨란, 금속 퀴놀리네이트 착물, 이들의 치환 유도체, 이들의 중수소화 유사체, 및 이들의 조합을 포함하나, 이에 한정되는 것은 아니다. 일부 구현예에서, 호스트 물질은 중수소화된다.
- [0229] 일부 구현예에서, 광활성층은 호스트 물질로서 화학식 I을 갖는 화합물 및 광활성 도펀트를 포함한다. 광활성 도펀트는 상기에 상세히 기술된 바와 같이, 유기 전계발광("EL") 물질일 수 있다.
- [0230] 일부 구현예에서, 광활성층은 제2 호스트 물질을 더 포함한다. 제2 호스트 물질의 예는 크리센, 페난트렌, 트리페닐렌, 페난트롤린, 트리아진, 나프탈렌, 안트라센, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 퀴녹살린, 페닐피리딘, 카바졸, 인돌로카바졸, 인돌로인돌, 퓨란, 벤조퓨란, 디벤조퓨란, 벤조디퓨란, 나프토피란, 나프토티디퓨란, 금속 퀴놀리네이트 착물, 이들의 치환 유도체, 및 이들의 중수소화 유사체를 포함하나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0231] 일부 구현예에서, 제2 호스트는 트리페닐렌, 카바졸, 인돌로카바졸, 인돌로인돌, 퓨란, 벤조퓨란, 디벤조퓨란, 나프토티디퓨란, 이들의 치환 유도체, 및 이들의 중수소화 유사체로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0232] 일부 구현예에서, 화학식 I을 갖는 호스트 물질 대 제2 호스트 물질의 중량비는 10:1 내지 1:10; 일부 구현예에서는 3:1 내지 1:3의 범위이다.
- [0233] 일부 구현예에서, 광활성층(140)은 광활성 도펀트 및 화학식 I을 갖는 호스트 물질을 포함한다.
- [0234] 일부 구현예에서, 광활성층(140)은 광활성 도펀트 및 화학식 I을 갖는 호스트 물질만을 포함하며, 층의 작동 원리 또는 특유의 특징을 실질적으로 변화시키는 추가 물질은 존재하지 않는다.
- [0235] 일부 구현예에서, 광활성층(140)은 광활성 도펀트, 화학식 I을 갖는 호스트 물질, 및 제2 호스트 물질을 포함한다.
- [0236] 일부 구현예에서, 광활성층(140)은 광활성 도펀트, 화학식 I을 갖는 제1 호스트 물질, 및 제2 호스트 물질만을 포함하며, 층의 작동 원리 또는 특유의 특징을 실질적으로 변화시키는 추가 물질은 존재하지 않는다.
- [0237] 도펀트 대 총 호스트 물질의 중량비는 2:98 내지 50:50, 일부 구현예에서는, 3:97 내지 30:70, 일부 구현예에서는 5:95 내지 20:80의 범위이다.
- [0238] 선택적 층(150)은 전자 수송을 용이하게 할 뿐만 아니라 층 계면에서 엑시톤의 퀵칭을 방지하는 구속층 역할을 하는 기능을 할 수 있다. 바람직하게, 이러한 층은 전자 이동성을 촉진하고 엑시톤 퀵칭을 감소시킨다.
- [0239] 일부 구현예에서, 층(150)은 다른 전자 수송 물질을 포함한다. 선택적 전자 수송층(150)에 사용될 수 있는 전자 수송 물질의 예는 트리스(8-하이드록시퀴놀라토)알루미늄(AIQ), 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀라토)(p-페닐페놀라토)알루미늄(BAIq), 테트라키스-(8-하이드록시퀴놀라토)haf늄(HfQ), 및 테트라키스-(8-하이드록시퀴놀라토)지르코늄(ZrQ)과 같은 금속 퀴놀레이트 유도체를 포함하는 금속 킬레이트 옥시노이드 화합물; 2-(4-비페닐일)-5-(4-t-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸(PBD), 3-(4-비페닐일)-4-페닐-5-(4-t-부틸페닐)-1,2,4-트리아졸(TAZ), 및 1,3,5-트리(페닐-2-벤즈이미다졸)벤젠(TPBI)과 같은 아졸 화합물; 2,3-비스(4-플루오로페닐)퀴녹살린과 같은 퀴녹살린 유도체; 4,7-디페닐-1,10-페난트롤린(DPA) 및 2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린(DDPA)과 같은

페난트롤린; 트리아진; 풀러렌; 및 이들의 혼합물을 포함한다. 일부 구현예에서, 전자 수송 물질은 금속 퀴놀레이트 및 페난트롤린 유도체로 이루어진 군으로부터 선택된다. 일부 구현예에서, 전자 수송층은 n-도펀트를 더 포함한다. N-도펀트 물질은 잘 알려져 있다. n-도펀트는 1족 및 2족 금속; 1족 및 2족 금속염, 예컨대 LiF, CsF, 및 Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>; 1족 및 2족 금속 유기 화합물, 예컨대 Li 퀴놀레이트; 및 분자 n-도펀트, 예컨대 류코 염료, 금속 착물, 예컨대 W<sub>2</sub>(hpp)<sub>4</sub>(hpp=1,3,4,6,7,8-헥사하이드로-2H-피리미도-[1,2-a]-피리미딘) 및 코발토센, 테트라티아나프타센, 비스(에틸렌디티오)테트라티아폴발렌, 헤테로환 라디칼 또는 디라디칼, 및 헤테로환 라디칼 또는 디라디칼의 이합체, 저중합체, 중합체, 디스피로 화합물 및 폴리사이클을 포함하나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0240] 전자 수송층 상에 선택적 전자 주입층이 증착될 수 있다. 전자 주입 물질의 예는 Li-함유 유기금속 화합물, LiF, Li<sub>2</sub>O, Li 퀴놀레이트, Cs-함유 유기금속 화합물, CsF, Cs<sub>2</sub>O, 및 Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>를 포함하나, 이에 한정되는 것은 아니다. 이러한 층은, 하부의 전자 수송층, 상부의 캐소드, 또는 둘 다와 반응할 수 있다. 전자 주입층이 존재할 경우, 증착되는 물질의 양은 일반적으로 1~100 Å(일부 구현예에서는 1~10 Å)의 범위이다.

[0241] 캐소드(160)는 전자 또는 음전하 캐리어 주입에 특히 효율적인 전극이다. 캐소드는 애노드보다 낮은 일 함수(work function)를 갖는 임의의 금속 또는 비금속일 수 있다. 캐소드용 물질은 1족의 알칼리 금속(예를 들어 Li, Cs), 2족 금속(알칼리 토금속), 희토류 원소 및 란타늄 원소를 포함하는 12족 금속, 및 악티늄족 원소부터 선택될 수 있다. 알루미늄, 인듐, 칼슘, 바륨, 사마륨 및 마그네슘과 같은 물질뿐만 아니라 그 조합도 사용될 수 있다.

[0242] 유기 전자 장치는 기타 층을 갖는 것으로 알려져 있다. 예를 들어, 애노드(110)와 정공 주입층(120) 사이에, 양 전하의 주입량을 제어하고/하거나, 층의 밴드갭 매칭을 제공하거나, 보호층으로서 기능하기 위한 층(미도시)이 있을 수 있다. 구리 프탈로시아닌, 실리콘 산질화물, 플로오로카본, 실란, 또는 Pt와 같은 금속의 초박막층과 같은 당업계에 알려진 층이 사용될 수 있다. 대안적으로, 애노드층(110), 활성층(120, 130, 140 및 150), 또는 캐소드층(160)의 일부 또는 전부는 전하 캐리어 수송 효율을 증가시키기 위해 표면처리될 수 있다. 각각의 구성 요소 층을 위한 물질의 선택은 바람직하게는, 높은 전계발광 효율을 갖는 장치를 제공하기 위해 이미터층에서의 양전하와 음전하의 균형을 맞추어 결정된다.

[0243] 각각의 기능층은 둘 이상의 층으로 구성될 수 있는 것으로 이해된다.

[0244] 장치층은 기상 증착, 액상 증착 및 열 전사를 비롯한 임의의 증착 기술 또는 기술의 조합에 의해 형성될 수 있다. 유리, 플라스틱, 및 금속과 같은 기판이 사용될 수 있다. 열 증발, 화학 기상 증착 등과 같은 종래 기상 증착 기술이 사용될 수 있다. 유기층은 스핀-코팅, 딥-코팅, 롤-투-롤 기술, 잉크젯 프린팅, 연속 노즐 프린팅, 스크린 프린팅, 그라비아 프린팅 등을 포함(이에 한정되는 것은 아님)하는 종래의 코팅 또는 프린팅 기술을 이용해 적절한 용매 중의 용액 또는 분산액으로부터 도포될 수 있다.

[0245] 액상 증착 방법의 경우, 특정 화합물 또는 관련된 종류의 화합물에 적합한 용매는 당업자에 의해 용이하게 결정될 수 있다.

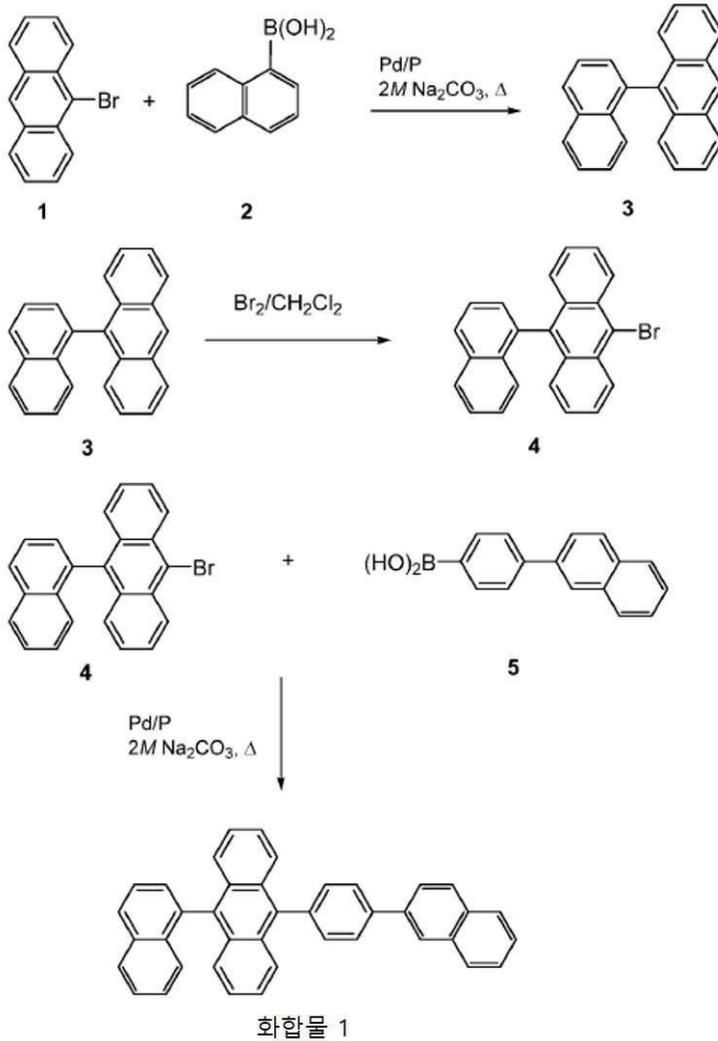
[0246] 일부 구현예에서, 정공 수송층은 액체 매질 중의 정공 수송 물질 및 임의의 추가 물질을 액상 증착함으로써 형성된다. 일부 구현예에서, 액체 매질은 하나 이상의 유기 용매를 포함한다. 일부 구현예에서, 유기 용매는 방향족 용매이다. 일부 구현예에서, 유기 액체는 클로로포름, 디클로로메탄, 클로로벤젠, 디클로로벤젠, 톨루엔, 자일렌, 메시틸렌, 아니솔, N-메틸-2-피롤리돈, 테트라린, 1-메톡시나프탈렌, 시클로헥실벤젠, 및 이들의 혼합물로부터 선택된다. 정공 수송 물질은 0.2 내지 5%(w/v), 일부 구현예에서는 0.4 내지 3%(w/v)의 농도로 액체 매질에 존재할 수 있다.

[0247] 일부 구현예에서, 광활성층은 액체 매질 중의 광활성 물질 및 임의의 호스트 물질을 액상 증착함으로써 형성된다. 액체 매질로서 사용될 수 있는 적절한 종류의 용매는 지방족 탄화수소(예컨대, 데칸, 헥사데칸, 및 데칼린), 할로겐화 탄화수소(예컨대, 염화메틸렌, 클로로포름, 클로로벤젠, 벤조트리플루오라이드, 및 퍼플루오로헥탄), 방향족 탄화수소(예컨대, 비치환 및 알킬- 및 알콕시-치환 벤젠, 톨루엔 및 자일렌), 방향족 에테르(예컨대, 아니솔, 디벤질 에테르, 및 플루오르화 유도체), 헤테로방향족(예컨대, 피리딘) 극성 용매(예컨대, 테트라하이드로피란, 디메틸아세트아미드, N-메틸 피롤리돈, 및 아세트니트릴과 같은 니트릴), 에스테르(예컨대, 에틸아세테이트, 프로필렌 카보네이트, 벤조산메틸, 및 트리부틸포스페이트와 같은 포스페이트 에스테르), 알코올 및 글리콜(예컨대, 이소프로판올 및 에틸렌 글리콜), 글리콜 에테르 및 유도체(예컨대, 프로필렌 글리콜 메틸 에테르 및 프로필렌 글리콜 메틸 에테르 아세테이트), 케톤(예컨대, 시클로펜타논 및 디이소부틸 케톤), 및 이

들의 혼합물을 포함하나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [0248] 일부 구현예에서, 장치는 모든 층의 기상 증착에 의해 제작된다.
- [0249] 일부 구현예에서, 장치는 정공 주입층, 정공 수송층, 및 광활성층의 액상 증착에 의해, 그리고 애노드, 전자 수송층, 전자 주입층 및 캐소드의 기상 증착에 의해 제작된다.
- [0250] 본원에 기술된 신규 조성물로 제조된 장치의 효율은, 장치 내의 다른 층을 최적화함으로써 더 향상될 수 있는 것으로 이해된다. 예를 들어, Ca, Ba 또는 LiF와 같은 더 효율적인 캐소드가 사용될 수 있다. 동작 전압을 감소시키거나 양자 효율을 증가시키는 신규 정공 수송 물질 및 성형 기판도 적용 가능하다. 다양한 층의 에너지 준위를 맞추고 전계발광을 용이하게 하기 위한 추가 층이 추가될 수도 있다.
- [0251] 일부 구현예에서, 장치는 다음의 구조를 순서대로 갖는다: 애노드, 정공 주입층, 정공 수송층, 광활성층, 전자 수송층, 전자 주입층, 캐소드.
- [0252] 본원에 기술된 것과 유사하거나 동등한 방법 및 물질이 본 발명의 실시 또는 시험에서 사용될 수 있지만, 적절한 방법 및 물질을 이하 설명한다. 또한, 물질, 방법, 및 실시예는 단지 예시적인 것이며, 제한하고자 하는 것은 아니다. 본원에 언급된 모든 간행물, 특허 출원, 특허 및 기타 참고 문헌은 그 전체가 참조로 포함된다.
- [0253] 실시예
- [0254] 본원에 설명된 개념이 다음의 실시예에서 더 설명되지만, 이는 청구범위에 기재된 본 발명의 범위를 제한하지 않는다.
- [0255] 합성예 1
- [0256] 본 실시예는 화학식 I을 갖는 화합물인 화합물 1의 제조를 예시한다.

[0257] 화합물은 다음의 반응식에 따라 제조될 수 있다:



[0258]

[0259] 여기서, Pd/P는 포스핀 화합물과 결합된 팔라듐 촉매를 나타내고 Δ는 가열을 나타낸다.

[0260] 등몰량의 물질 1과 물질 2를 톨루엔에 용해시킬 수 있다. 여기에 4 몰 당량의 2M Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 용액을 첨가할 수 있고, 이 용액에 아르곤을 30분 동안 분사하였다. 여기에 0.05 몰 당량의 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>를 첨가할 수 있고, 이 혼합물을 90 °C에서 6시간 동안 교반하였다. 냉각 후, 반응 혼합물을 여과하고 농축시켜 물질 3을 얻을 수 있다.

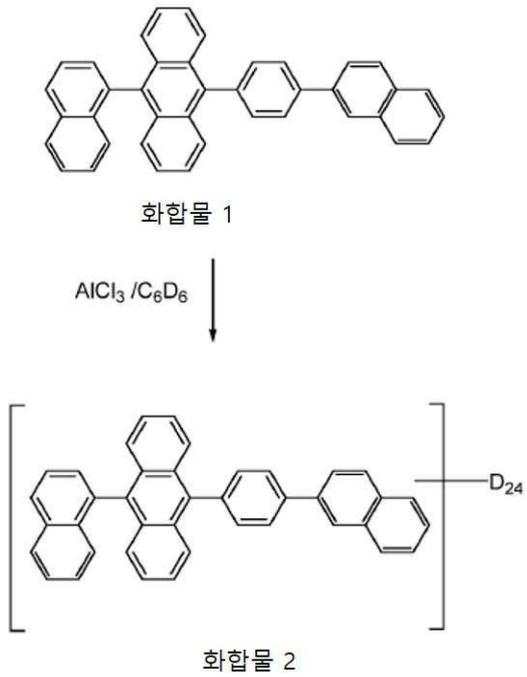
[0261] 디클로로메탄에서 Br<sub>2</sub>로 물질 3을 브롬화하여 물질 4를 얻을 수 있다.

[0262] 등몰량의 물질 4와 물질 5를 톨루엔에 용해시킬 수 있다. 여기에 4 몰 당량의 2M Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 용액을 첨가할 수 있고, 이 용액에 아르곤을 30분 동안 분사하였다. 여기에 0.05 몰 당량의 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>를 첨가할 수 있고, 이 혼합물을 90 °C에서 6시간 동안 교반하였다. 냉각 후, 반응 혼합물을 여과하고 농축시켜 화합물 1을 얻을 수 있다. 화합물 1을 컬럼 크로마토그래피로 정제할 수 있다.

[0263] 합성예 2

[0264] 본 실시예는 화학식 I을 갖는 화합물인 화합물 2의 제조를 예시한다.

[0265] 화합물은 다음의 반응식에 따라 제조될 수 있다:

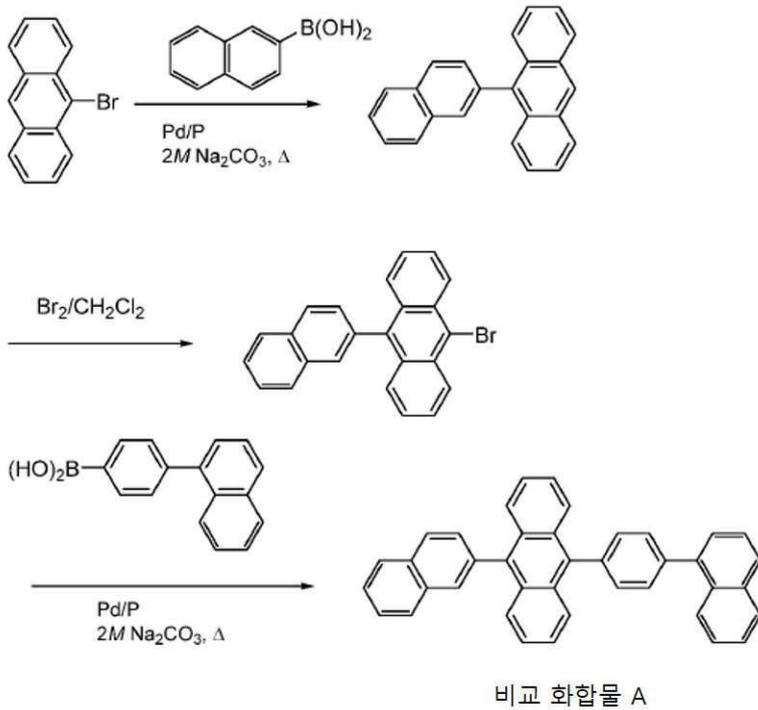


[0266]

[0267] 퍼듀테로벤젠에 용해된 합성에 1로부터 얻은 10 몰 당량의 화합물 1에 4 몰 당량의  $\text{AlCl}_3$ 을 질소 분위기 하에서 첨가할 수 있다. 생성된 혼합물을 실온에서 6시간 동안 교반한 후  $\text{D}_2\text{O}$ (50 mL)를 첨가할 수 있다. 층들을 분리하고 유기층을 건조 및 농축시켜 화합물 2를 얻을 수 있다. 미정제 생성물을 컬럼 크로마토그래피로 정제할 수 있다.

[0268] 비교 합성에 A

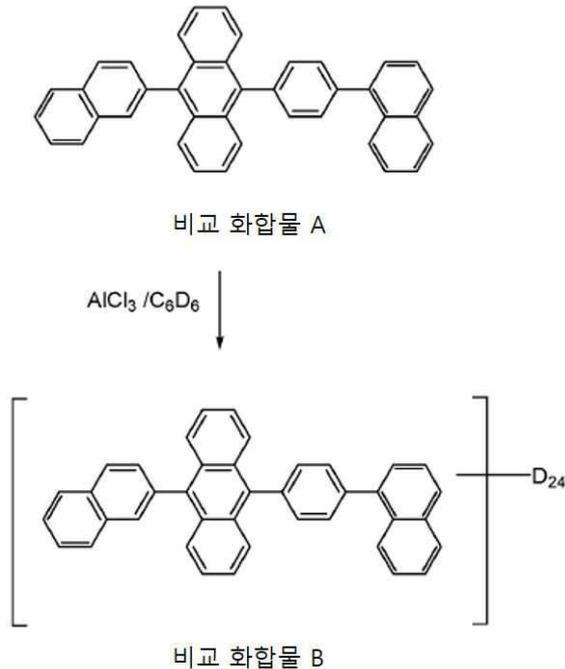
[0269] 다음의 반응식에 나타낸 바와 같이, 합성에 1과 유사한 방식으로 비교 화합물 A를 제조할 수 있다.



[0270]

[0271] 비교 합성에 B

[0272] 다음의 반응식에 나타낸 바와 같이, 합성에 2와 유사한 방식으로 비교 화합물 B를 제조할 수 있다.



[0273]

[0274] 장치 실시예

[0275] (1) 물질

[0276] 비교 화합물 B는 상기 도시된 구조를 갖는다.

[0277] 도펀트 D-1은 비스(디아릴아미노)벤조플루오렌이다. 이러한 물질들은, 예를 들어 미국 특허 US 8,465,848호에 기재되어 있다.

[0278] ET-1은 아릴 포스핀 옥사이드이다.

[0279] ET-2는 리튬 퀴놀레이트이다.

[0280] HIJ-1은 전기 전도성 중합체와 고분자 플루오르화 설폰산의 수분산액으로 제조된 정공 주입 물질이다.

[0281] HIJ-2는 1,4,5,8,9,12-헥사아자트리페닐렌헥사카보니트릴이다.

[0282] HTM-1은 아릴아미노-페난트렌이다.

[0283] NPD는 N,N'-(1-나프틸)-N,N'-디페닐-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민이다.

[0284] (2) 장치 제작

[0285] 용액 처리와 열증발 기술의 조합에 의해 OLED 장치를 제작하였다. Thin Film Devices, Inc로부터 입수한 패터닝된 인듐 주석 산화물(ITO) 코팅 유리 기판을 사용하였다. 이들 ITO 기판은 30 옴/스퀘어(ohms/square)의 시트 저항과 80%의 투광률을 갖는 ITO로 코팅된 Corning 1737 유리를 기반으로 한다. 패터닝된 ITO 기판을 수성 세제 용액에서 초음파 세척하고 증류수로 세정하였다. 이어서, 패터닝된 ITO를 아세톤에서 초음파 세척하고, 이소프로판올로 세정하고, 질소 스트림에서 건조시켰다.

[0286] 장치 제작 직전에, 세척한 패터닝된 ITO 기판을 UV 오존으로 10분 동안 처리하였다. 냉각 직후, HIJ-1의 수분산액을 ITO 표면 위에 스핀 코팅하고 가열하여 용매를 제거함으로써 단락 감소층("SRL")을 형성시켰다. 이어서, 작업편을 진공 챔버에 넣었다. 이어서, 정공 주입 물질, 제1 정공 수송 물질, 제2 정공 수송 물질, 광활성 및 호스트 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질, 및 Al 캐소드를 적절한 마스크를 사용해 열증발에 의해 순차적으로 증착하여 정공 주입층("HIL"), 하나 이상의 정공 수송층("HTL"), 광활성층 또는 발광층("EML"), 전자 수송층("ETL"), 및 전자 주입층("EIL")에 이어 캐소드를 형성시켰다. 챔버를 배기하고, 유리 덮개, 건조제, 및 UV 경화성 에폭시를 사용해 장치를 캡슐화하였다.

- [0287] (3) 장치 특성화
- [0288] (1) 전류-전압(I-V) 곡선, (2) 전계발광 방사휘도 대 전압, 및 (3) 전계발광 스펙트럼 대 전압을 측정하여 OLED 장치를 특성화하였다. 세 가지 측정 모두 동일한 시간에 수행하였고 컴퓨터로 제어하였다. 특정 전압에서 장치의 전류 효율은, LED의 전계발광 방사휘도를 장치의 작동에 필요한 전류 밀도로 나눔으로써 결정된다. 단위는 cd/A이다. 전력 효율은 전류 효율을 작동 전압으로 나눈 값이다. 단위는 lm/W이다. 색좌표는 Minolta CS-100 미터 또는 Photoresearch PR-705 미터를 이용해 측정하였다.
- [0289] 장치 실시예 1 내지 3
- [0290] 이 실시예들은 호스트 물질로서 화학식 I을 갖는 신규 화합물을 포함하는 광활성층을 갖는 장치의 성능을 예시한다.
- [0291] 순서별 장치 구조(모든 백분율은 층의 총 중량을 기준으로 한 중량 백분율임):
- [0292] 유리 기판
- [0293] 애노드: ITO (50 nm)
- [0294] SRL: HIJ-1 (100 nm)
- [0295] HIL: HIJ-2 (7 nm)
- [0296] HTL1: NPD (90 nm)
- [0297] HTL2: HTM-1(20 nm)
- [0298] EML: 표 1에 나타낸 바와 같은 호스트 및 도펀트 D-1 (25 nm)
- [0299] ETL: ET-1:ET-2 (1:1 중량비) (26.2 nm)
- [0300] EIL: ET-2 (3.5 nm)
- [0301] 캐소드: Al (100 nm)
- [0302] 결과를 표 1에 나타내었다.

**표 1**

장치 결과

실시예	호스트	비율	CE	EQE	CIEx	CIEy	V	T80
1	화합물 1	20:1	9.8	12.1	0.142	0.087	5.6	1050
2	화합물 1	13:1	10.2	12.1	0.140	0.093	5.6	1120
3	화합물 1	32:1	10.0	12.3	0.141	0.089	5.6	800

달리 명시되지 않는 한, 모든 데이터는 1000 니트(nit) 기준이다. 비는 호스트:도펀트 중량비이고; CE는 전류 효율(cd/A)이고; EQE는 외부 양자 효율(%)이고; CIEx 및 CIEy는 C.I.E 색도(Commission Internationale de L'Eclairage, 1931)에 따른 x 및 y 색좌표를 의미하고; V는 15 mA/cm<sup>2</sup>에서의 전압이고; T80은 16.5 mA/cm<sup>2</sup>의 전류 밀도 및 50℃에서 장치가 초기 휘도의 80%에 도달하는 데 소요되는 시간(h)이다.

- [0303]
- [0304] 장치 실시예 4 내지 6 및 비교예 A
- [0305] 이 실시예들은 호스트 물질로서 화학식 I을 갖는 신규 화합물을 포함하는 광활성층을 갖는 장치의 성능을 예시한다.

- [0306] 호스트 및 비율이 표 2에 주어진 것을 제외하고, 장치는 장치 실시예 1 내지 3에서와 동일한 구조를 가졌다.
- [0307] 결과를 표 2에 나타내었다.

**표 2**

장치 결과

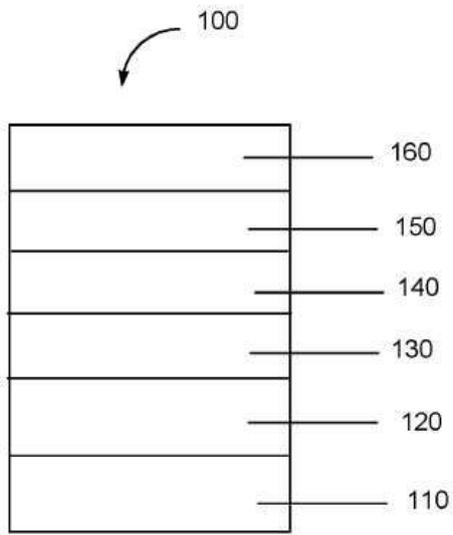
실시예	호스트	비율	CE	EQE	CIE <sub>x</sub>	CIE <sub>y</sub>	V	T80
A	B	20:1	10.3	12.1	0.140	0.095	5.6	1400
4	화합물 2	20:1	10.5	12.3	0.140	0.096	5.6	2100
5	화합물 2	13:1	10.2	11.8	0.139	0.098	5.5	1900
6	화합물 2	32:1	10.1	12.3	0.141	0.090	5.6	1570

달리 명시되지 않는 한, 모든 데이터는 1000 니트(nit) 기준이다. 비는 호스트:도펀트 중량비이고; CE는 전류 효율(cd/A)이고; EQE는 외부 양자 효율(%)이고; CIE<sub>x</sub> 및 CIE<sub>y</sub>는 C.I.E 색도(Commission Internationale de L'Eclairage, 1931)에 따른 x 및 y 색좌표를 의미하고; V는 15 mA/cm<sup>2</sup>에서의 전압이고; T80은 16.5 mA/cm<sup>2</sup>의 전류 밀도 및 50℃에서 장치가 초기 휘도의 80%에 도달하는 데 소요되는 시간(h)이다.

- [0308]
- [0309] 참고로, 전반적인 설명 또는 실시예에서 전술한 모든 행위가 요구되는 것은 아니며, 특정 행위의 일부가 요구되지 않을 수 있고, 설명된 것 이외에 하나 이상의 추가 행위가 수행될 수 있다. 또한, 나열된 행위의 순서가 반드시 행위의 수행 순서는 아니다.
- [0310] 전술한 명세서에서, 특정 구현예를 참조하여 개념을 설명하였다. 그러나, 당업자는 아래의 청구범위에 명시된 본 발명의 범위에서 벗어나지 않고 다양한 변형 및 변경이 이루어질 수 있음을 이해한다. 따라서, 본 명세서 및 도면은 제한적 의미라기보다는 예시적인 것으로 간주되어야 하고, 이러한 모든 변형은 발명의 범위 내에 포함되는 것으로 의도된다.
- [0311] 이점, 다른 장점, 및 문제 해결책을 특정 구현예와 관련하여 상술하였다. 그러나, 이점, 장점, 문제 해결책, 그리고 임의의 이점, 장점, 또는 해결책을 발생시키거나 보다 명확하게 할 수 있는 임의의 특징(들)을, 임의의 또는 모든 청구범위의 중요한 특징, 필요한 특징, 또는 필수적인 특징인 것으로 해석해서는 안 된다.
- [0312] 명확성을 위해 개별적인 구현예의 맥락에서 본원에 설명된 특정 특징들이 단일 구현예에서 조합으로 제공될 수도 있음을 이해해야 한다. 반대로, 간결성을 위해 단일 구현예의 맥락에서 설명된 다양한 특징이 개별적으로 또는 임의의 하위 조합으로 제공될 수도 있다. 본원에 명시된 다양한 범위의 수치 사용은 명시된 범위 내의 최소값과 최대값 모두의 앞에 "약"이라는 단어가 붙은 것처럼 근사치로 서술된다. 이러한 방식으로, 명시된 범위의 약간의 상하 편차가 사용되어 범위 내의 값과 실질적으로 동일한 결과를 달성할 수 있다. 또한, 이들 범위의 개시는, 하나의 값의 일부 성분이 다른 값의 성분과 혼합될 때 나타날 수 있는 분수 값을 포함하는, 최소 평균값과 최대 평균값 사이의 모든 값을 포함하는 연속 범위로서 의도된다. 또한, 더 넓은 범위 및 더 좁은 범위가 개시되는 경우, 한 범위의 최소값을 다른 범위의 최대값에 맞추는 것과 그 반대의 경우는 본 발명의 사상 내에 있다.

도면

도면1



도면2

