



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2015-0036529
(43) 공개일자 2015년04월07일

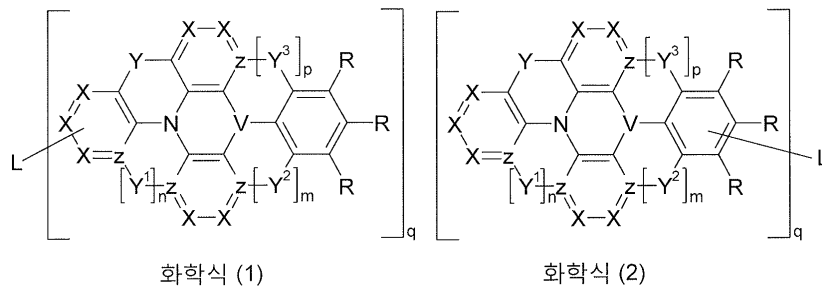
- | | |
|--|--|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) C07D 519/00 (2006.01)</p> <p>(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
C07D 519/00 (2013.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2015-7003585</p> <p>(22) 출원일자(국제) 2013년06월12일
심사청구일자 없음</p> <p>(85) 번역문제출일자 2015년02월10일</p> <p>(86) 국제출원번호 PCT/EP2013/001724</p> <p>(87) 국제공개번호 WO 2014/008967
국제공개일자 2014년01월16일</p> <p>(30) 우선권주장
12005099.2 2012년07월10일
유럽특허청(EPO)(EP)</p> | <p>(71) 출원인
메르크 파텐트 게엠베하
독일 64293 다름슈타트 프랑크푸르터 스트라세 250</p> <p>(72) 발명자
파르함 아미르 호싸인
독일 65929 프랑크푸르트 암 마인 프란츠-헨레-슈트라세 4</p> <p>플롬 크리스토프
독일 64291 다름슈타트 비른가르텐벡 131
(뒷면에 계속)</p> <p>(74) 대리인
특허법인코리아나</p> |
|--|--|

전체 청구항 수 : 총 16 항

(54) 발명의 명칭 유기 전계발광 소자용 재료

(57) 요약

본 발명은 전자 소자, 특히 유기 전계발광 소자에 사용되기에 적합한 화학식 (1) 또는 화학식 (2) 의 화합물에 관한 것이다:



(52) CPC특허분류

C09K 2211/1011 (2013.01)
C09K 2211/1033 (2013.01)
C09K 2211/1037 (2013.01)
C09K 2211/1044 (2013.01)
C09K 2211/1048 (2013.01)
C09K 2211/1051 (2013.01)
C09K 2211/1074 (2013.01)
C09K 2211/1088 (2013.01)
C09K 2211/1092 (2013.01)

(72) 발명자

야치 안야

독일 60486 프랑크푸르트 암 마인 폴타슈트라쎄 6
9아

에베를레 토마스

독일 76829 란다우 빌리-브란트-슈트라쎄 6

크뢰버 요나스 팔렌틴

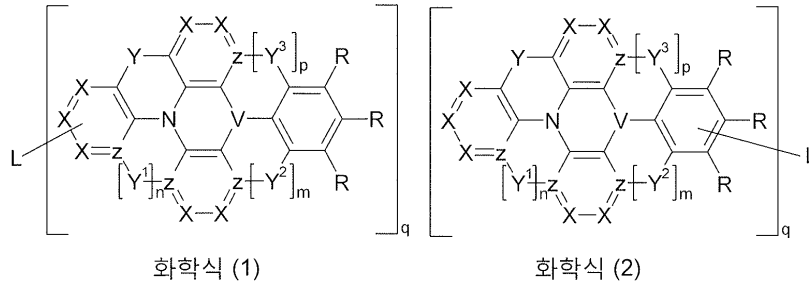
독일 60311 프랑크푸르트 암 마인 파르가쎄 4

명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 (1) 또는 (2) 의 화합물:



[식 중, 사용된 기호 및 지수에 하기가 적용됨:

V 는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, N, P 또는 P=O 이고;

X 는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, CR 또는 N 이거나; 또는 X 는 C 를 나타내고 (L 기가 이러한 X 기에 결합되는 경우);

Y, Y¹, Y², Y³ 은 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 단일 결합 또는 C(R¹)₂, NR¹, O, S, C=O, C=NR¹, C=C(R¹)₂, Si(R¹)₂, BR¹, PR¹, P(=O)R¹, SO, SO₂ 이고; 단, Y 및 Y¹ 은 동시에 단일 결합을 나타내지 않고 상기 Y² 및 Y³ 은 동시에 단일 결합을 나타내지 않고;

Z 는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, CR 또는 N 이거나; 또는 Z 는 C 를 나타내고 (Y¹ 또는 Y² 또는 Y³ 기가 이러한 Z 기에 결합되는 경우);

L 은, 동일하게 또는 상이하게, R (q = 1 인 경우) 이거나 또는 2가, 3가, 4가, 5가 또는 6가의 탄소수 1 내지 40의 직쇄 알킬렌, 알킬리렌, 알킬렌옥시 또는 티오알킬렌옥시 기 또는 탄소수 3 내지 40의 분지형 또는 시클릭 알킬렌, 알킬리렌, 알킬렌옥시 또는 티오알킬렌옥시 기 또는 탄소수 2 내지 40의 알케닐렌 또는 알킬닐렌 기 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R² 에 의해 치환될 수 있고, 이때 각 경우 하나 이상의 비-인접 CH₂ 기는 -R²C=CR²-, -C≡C-, Si(R²)₂, C=O, C=NR², P(=O)R², S=O, SO₂, -O-, -S- 또는 -CONR²- 에 의해 대체될 수 있고, 이때 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂ 에 의해 대체될 수 있음), 또는 2가, 3가, 4가, 5가 또는 6가의 방향족 고리원자수 5 내지 40의 방향족 고리계 (이는 하나 이상의 라디칼 R² 에 의해 치환될 수 있음), 또는 방향족 고리원자수 5 내지 60의 헤테로방향족 고리계 (이는 헤테로아릴 기로서, 배제적으로 황-함유 또는 산소-함유 헤테로아릴 기를 함유하고, 이는 하나 이상의 라디칼 R² 에 의해 치환될 수 있음), 또는 P(R²)_{3-r}, P(=O)(R²)_{3-r}, C(R²)_{4-r}, Si(R²)_{4-r}, N(Ar)_{3-r} (이때 r 은 2, 3 또는 4 를 나타내고, 단, r 은 L 의 최대 원자수를 초과하지 않음) 이거나; 또는 L 은 화학 결합이고 (q = 2 인 경우), 여기서 L 의 원자가 = q + 1 이고;

n, m, p 는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 0 또는 1 이고(이때 n = 0 또는 m = 0 또는 p = 0 이란, 상응하는 기 Y¹ 또는 Y² 또는 Y³ 가 각각 존재하지 않고 R 기가 Y² 또는 Y³ 대신 상응하는 탄소 원자에 결합함을 의미함);

q 는 1, 2, 3, 4, 5 또는 6 이고;

R, R¹ 은 각 경우 동일하게 또는 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, C(=O)Ar, C(=O)R², P(=O)(Ar)₂, 탄소수 1 내지 40의 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 탄소수 3 내지 40의 분지형 또는 시클릭 알킬, 알

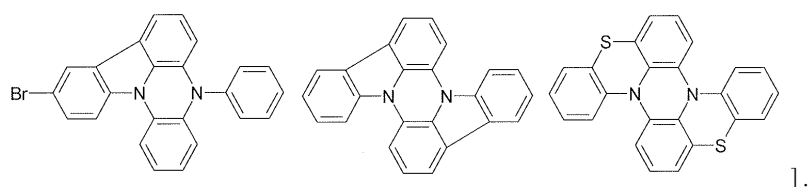
족시 또는 티오알킬 기 또는 탄소수 2 내지 40의 알케닐 또는 알킬- 기 (이의 각각은 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있고, 이때 하나 이상의 비-인접 CH_2 기는 $R^2C=CR^2$, $C\equiv C$, $Si(R^2)_2$, $C=O$, $C=NR^2$, $P(=O)(R^2)$, SO , SO_2 , NR^2 , O , S 또는 $CONR^2$ 에 의해 대체될 수 있고, 이때 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수 있음), 방향족 고리원자수 6 내지 60의 방향족 고리계 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있음), 방향족 고리원자수 5 내지 60의 헤테로방향족 고리계 (이는 헤테로아릴- 기로서, 황-함유 또는 산소-함유 헤테로아릴 기를 함유하고 이는 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있음), 방향족 고리원자수 5 내지 60의 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있음), 또는 방향족 고리원자수 5 내지 60의 아르알킬 또는 헤테로아르알킬 기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있고, 이때 동일한 Y 기에 결합되는 2개의 치환기 R^1 은 임의적으로는 서로 함께 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성할 수 있고, 이는 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있음)로 구성된 군에서 선택되며; 더욱이, 2개의 인접 라디칼 R은 축합된 벤조 고리를 형성할 수 있고, 이는 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있고; 화학식 (2)에서 R 기는 존재하지 않고 (L 기가 상응하는 탄소 원자에 결합되는 경우);

R^2 는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO_2 , $C(=O)Ar$, $C(=O)R^3$, $P(=O)(Ar)_2$, 탄소수 1 내지 40의 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 탄소수 3 내지 40의 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 탄소수 2 내지 40의 알케닐 또는 알킬- 기 (이의 각각은 하나 이상의 라디칼 R^3 에 의해 치환될 수 있고, 이때 하나 이상의 비-인접 CH_2 기는 $R^3C=CR^3$, $C\equiv C$, $Si(R^3)_2$, $C=O$, $C=NR^3$, $P(=O)(R^3)$, SO , SO_2 , NR^3 , O , S 또는 $CONR^3$ 에 의해 대체될 수 있고, 이때 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수 있음), 방향족 고리원자수 5 내지 60의 방향족 고리계 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^3 에 의해 치환될 수 있음), 방향족 고리원자수 5 내지 60의 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^3 에 의해 치환될 수 있음), 또는 방향족 고리원자수 5 내지 60의 아르알킬 또는 헤테로아르알킬- 기로 구성된 군에서 선택되고;

Ar은 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 방향족 고리원자수 5 내지 30의 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 하나 이상의 비-방향족 라디칼 R^3 에 의해 치환될 수 있음) 이고; 동일한 P 원자에 결합되는 2개의 라디칼 Ar은 단일 결합 또는 $N(R^3)$, $C(R^3)_2$, O 또는 S 에서 선택되는 가교에 의해 서로 가교될 수 있고;

R^3 은 H, D, F, CN, 탄소수 1 내지 20의 지방족 탄화수소 라디칼 또는 방향족 고리원자수 5 내지 30의 방향족 고리계 (이때 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I 또는 CN에 의해 대체될 수 있음)으로 구성된 군에서 선택되고;

하기 화합물은 본 발명에서 배제됨:

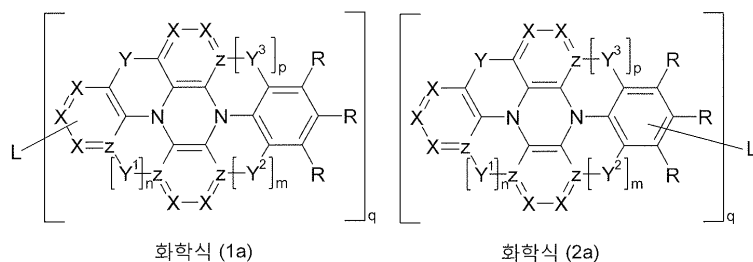


청구항 2

제 1 항에 있어서, Y, Y^1 , Y^2 및 Y^3 가 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 단일 결합, $C(R^1)_2$, NR^1 , O 또는 S 를 나타내는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 3

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서, 화학식 (1a) 또는 (2a) 의 화합물에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:



[식 중, 사용되는 기호에는 하기가 적용된다:

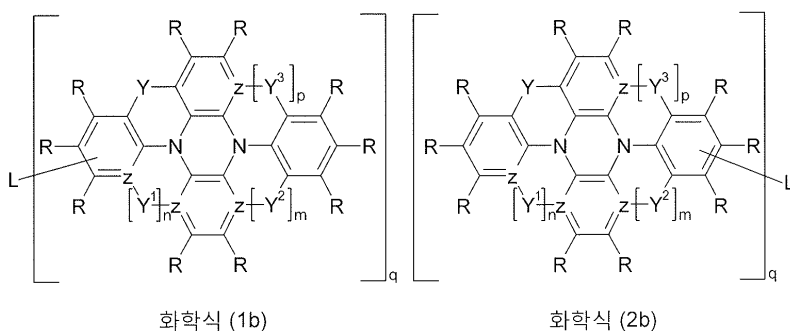
Y, Y^1, Y^2, Y^3 은, 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 단일 결합, $C(R^1)_2$, NR^1 , O 또는 S 이고;

X, Z 는 CR 또는 N 이고, 단, 고리 당 X 및 Z 기 중 최대 하나가 N 을 나타내고, 이러한 고리에서 다른 X 및 Z 기가 CR 을 나타내거나, 또는 Z 는 C 를 나타내고 (Y^1 또는 Y^2 또는 Y^3 기가 이러한 Z 기에 결합되는 경우), X 는 C 를 나타내고 (L 기가 이러한 X 에 결합되는 경우);

사용되는 다른 기호 및 지수는 제 1 항에 정의된 의미를 가짐].

청구항 4

제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 (1b) 또는 (2b) 의 화합물에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:



[식 중, 사용되는 기호에는 하기가 적용된다:

Y, Y^1, Y^2, Y^3 은, 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 단일 결합, $C(R^1)_2$, NR^1 , O 또는 S, 특히 단일 결합 또는 $C(R^1)_2$ 이고;

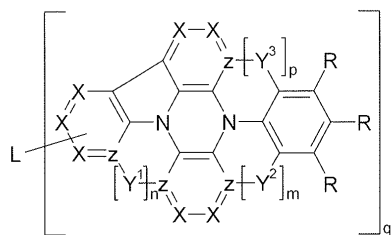
Z 는 CR, 또는 Z 는 C 이고 (Y^1 또는 Y^2 또는 Y^3 기가 이러한 Z 에 결합되는 경우) 이고;

사용되는 다른 기호 및 지수는 제 1 항에서 주어진 의미를 갖고;

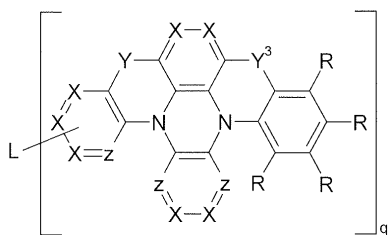
L 기가 이러한 위치에서 결합되는 경우 라디칼 R 은 여기서 존재하지 않음].

청구항 5

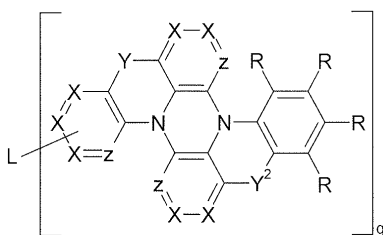
제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 (3) 내지 (8) 의 화합물에서 선택되는 화합물:



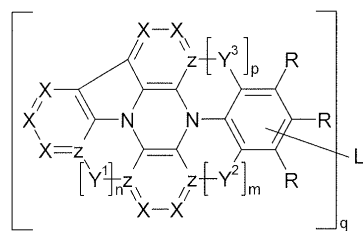
화학식 (3)



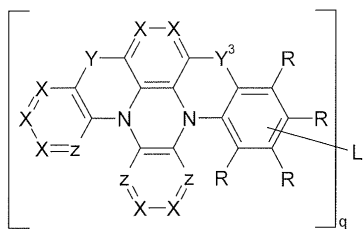
화학식 (4)



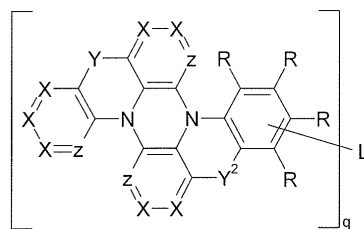
화학식 (5)



화학식 (6)



화학식 (7)



화학식 (8)

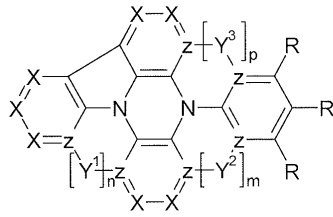
[식 중,

사용되는 기호 및 지수는 제 1 항에 주어진 의미를 갖고;

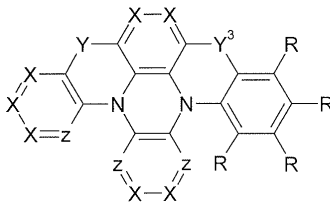
L 기가 이러한 위치에서 결합되는 경우 R 기는 존재하지 않음].

청구항 6

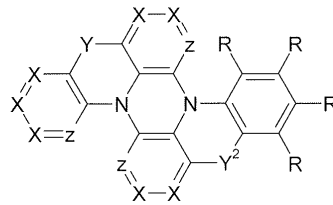
제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 (3a), (4a) 또는 (5a) 의 화합물에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:



화학식 (3a)



화학식 (4a)

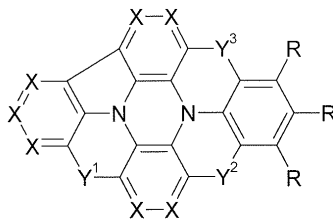


화학식 (5a)

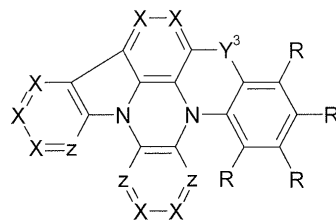
[식 중, 사용되는 기호 및 지수는 청구항 제 1 항에 주어진 의미를 가짐].

청구항 7

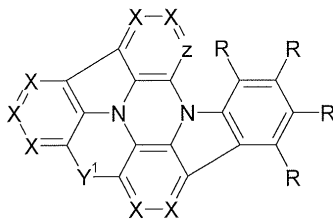
제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 (3) 의 화합물이 화학식 (19) 내지 (23) 의 화합물에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:



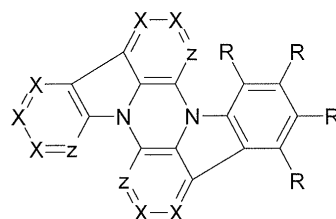
화학식 (19)



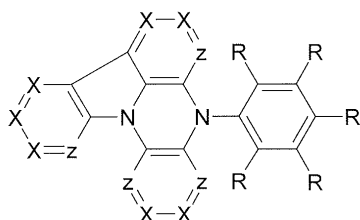
화학식 (20)



화학식 (21)



화학식 (22)

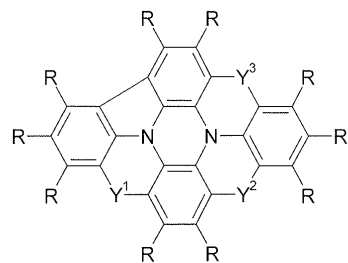


화학식 (23)

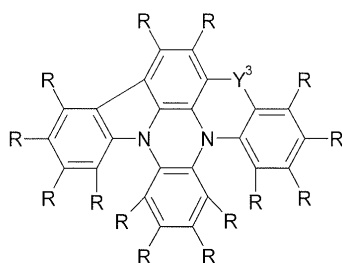
[식 중, 사용되는 기호 및 지수는 제 1 항에 정의된 바와 같음].

청구항 8

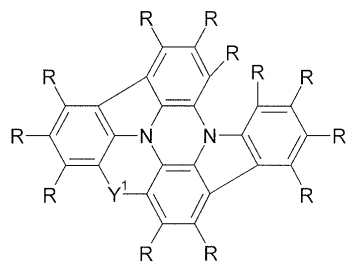
제 1 항 내지 제 7 항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 (19a) 내지 (23a), (24) 또는 (25) 의 화합물에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:



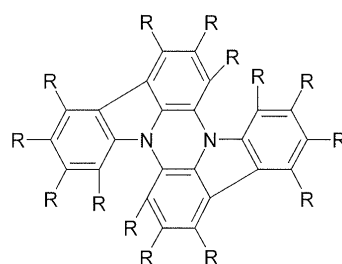
화학식 (19a)



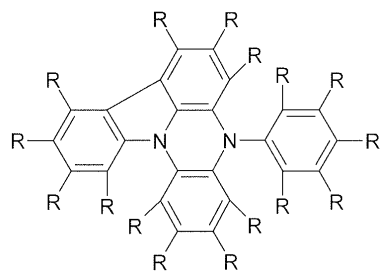
화학식 (20a)



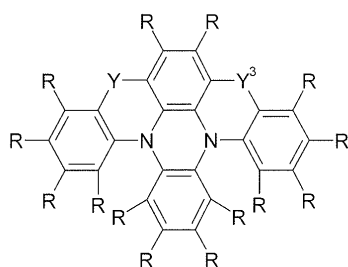
화학식 (21a)



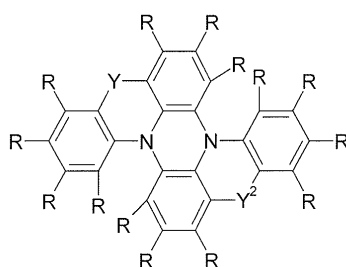
화학식 (22a)



화학식 (23a)



화학식 (24)



화학식 (25)

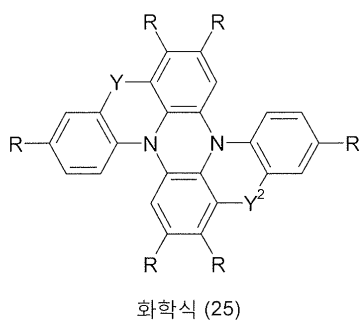
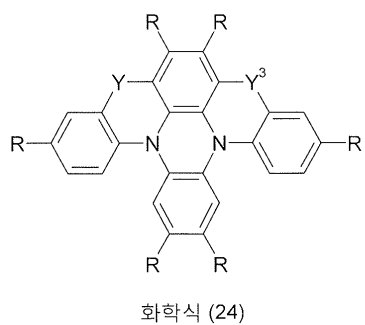
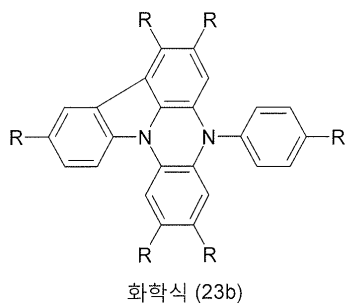
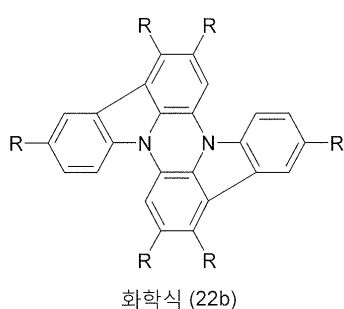
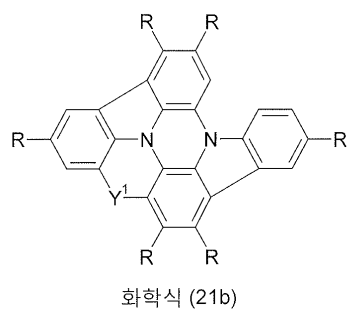
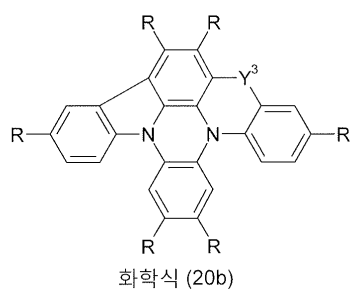
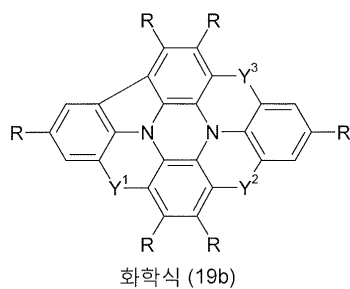
[식 중,

사용되는 기호는 제 1 항에 주어진 의미를 갖고;

Y, Y² 및 Y³ 은 바람직하게는 각 경우 동일하게 또는 상이하게 단일 결합, C(R¹)₂, NR¹, O 또는 S 를 나타냄].

청구항 9

제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 (19b) 내지 (23b), (24a) 또는 (25a) 의 화합물로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:



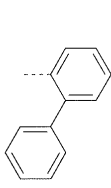
[식 중,

사용되는 기호는 제 1 항에 주어진 의미를 갖고;

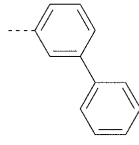
Y, Y² 및 Y³ 은 바람직하게는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 단일 결합, C(R¹)₂, NR¹, O 또는 S 를 나타냄].

청구항 10

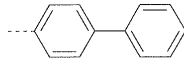
제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 있어서, R 이 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 나타내는 경우 R 은 화학식 (26) 내지 (58) 의 기에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:



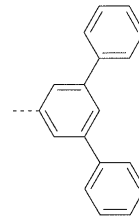
화학식 (26)



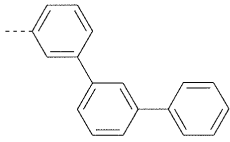
화학식 (27)



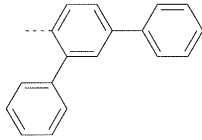
화학식 (28)



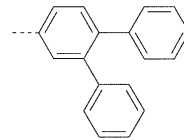
화학식 (29)



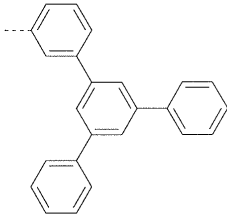
화학식 (30)



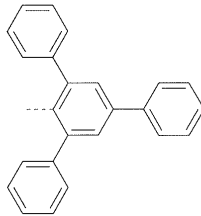
화학식 (31)



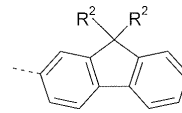
화학식 (32)



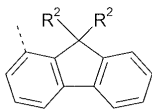
화학식 (33)



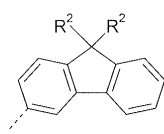
화학식 (34)



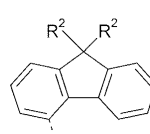
화학식 (35)



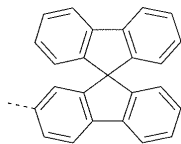
화학식 (36)



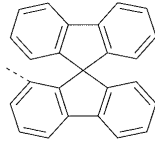
화학식 (37)



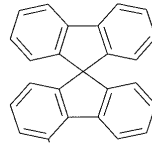
화학식 (38)



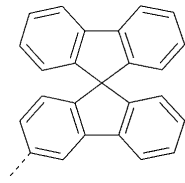
화학식 (39)



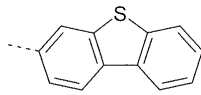
화학식 (40)



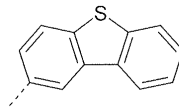
화학식 (41)



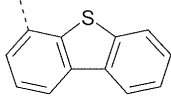
화학식 (42)



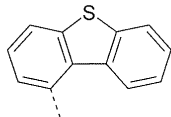
화학식 (43)



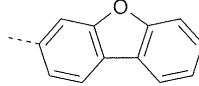
화학식 (44)



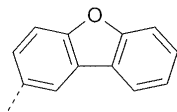
화학식 (45)



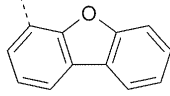
화학식 (46)



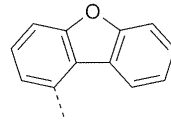
화학식 (47)



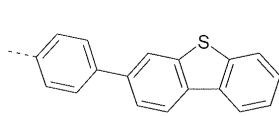
화학식 (48)



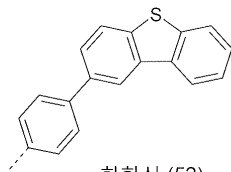
화학식 (49)



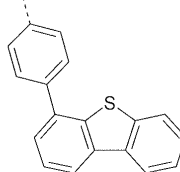
화학식 (50)



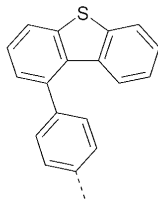
화학식 (51)



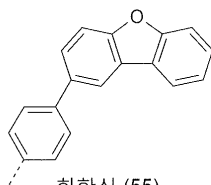
화학식 (52)



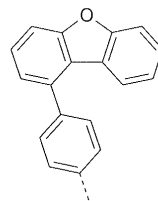
화학식 (53)



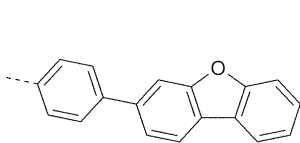
화학식 (54)



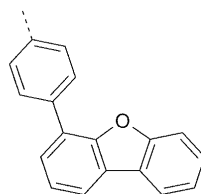
화학식 (55)



화학식 (56)



화학식 (57)



화학식 (58)

[식 중, 파선 결합은 기본 구조로의 결합을 나타내고 상기 기는 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있음].

청구항 11

하기 반응 단계를 포함하는, 제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 따른 화합물의 제조 방법:

- 가교 Y를 함유하지 않는 상응하는 기본 구조의 합성 단계; 및
- Y기의 도입 단계.

청구항 12

제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 따른 하나 이상의 화합물 및 하나 이상의 추가 화합물을 포함하는 혼합물.

청구항 13

제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 따른 하나 이상의 화합물 또는 제 12 항에 따른 혼합물 및 하나 이상의 용매를 포함하는 제형, 특히 용액, 현탁액 또는 미니에멀전.

청구항 14

제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 따른 화합물 또는 제 12 항에 따른 혼합물의 전자 소자에서의 용도.

청구항 15

제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 따른 하나 이상의 화합물 또는 제 12 항에 따른 혼합물을 포함하는 전자 소자, 바람직하게는 유기 전계발광 소자, 유기 집적 회로, 유기 전계효과 트랜지스터, 유기 박막 트랜지스터, 유기 발광 트랜지스터, 유기 태양 전지, 유기 염료-감응성 태양 전지, 유기 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 전계-켄치 소자, 발광 전기화학 전지, 유기 레이저 다이오드 및 "유기 플라즈몬 방출 소자" 로 구성된 군에서 선택되는 전자 소자.

청구항 16

제 15 항에 있어서, 제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 따른 화합물이 전자-차단 또는 여기-차단 층에서 및/또는 정공-수송 또는 정공-주입 층에서 형광 또는 인광 발광체용 매트릭스 물질로서 사용되는 것을 특징으로 하는, 유기 전계발광 소자인 전자 소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 전자 소자, 특히 유기 전계발광 소자에 사용되기에 적합한 재료에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 반도체를 기능성 재료로서 활용하는 유기 전계발광 소자 (OLED) 의 구조는, 예를 들어 US 4539507, US 5151629, EP 0676461 및 WO 98/27136 에 기재되어 있다. 본원에서 활용되는 발광 재료는 갈수록 더 형광 대신 인광을 나타내는 유기 금속 착물이다 (M. A. Baldo et al., *Appl. Phys. Lett.* **1999**, *75*, 4-6). 양자역학적 이유로, 인광 발광체로서 유기금속 화합물을 사용하여 4 배 이상의 에너지 및 전력 효율이 가능하다. 그러나, 일반적으로, 특히 효율, 작동 전압 및 수명과 관련하여, OLED 의 경우, 특히 또한 삼중항 발광 (인광) 을 나타내는 OLED 의 경우 여전히 개선점이 요구된다. 이는, 특히 비교적 짧은-파장 범위, 즉 녹색 또는 청색에서 발광하는 OLED 에 적용된다.

[0003] 인광 OLED 의 특성이 활용되는 삼중항 발광체에 의해서만 결정되는 것은 아니다. 특히, 사용되는 다른 재료, 예컨대 매트릭스 재료, 정공-차단 재료, 전자-수송 재료, 정공-수송 재료 및 전자- 또는 여기자-차단 재료도 여기서 특히 중요하다. 따라서, 이들 재료의 개선도 OLED 특성을 현저히 개선할 수 있다. 또한, 형광 OLED 용 이들 재료의 경우 개선이 여전히 요구된다.

[0004] 본 발명의 목적은, 형광 또는 인광 OLED, 특히 인광 OLED 에서 예를 들어 매트릭스 물질 또는 정공-수송/물질 또는 여기-차단 물질로서 사용되는데 적합한 화합물을 제공하는 것이다.

[0005] 놀랍게도, 이하에서 더욱 상세히 기재되는 화합물이 이러한 목적을 달성하고, 유기 전계발광 소자에서, 특히 수명, 효율 및/또는 작동 전압에 관하여, 개선을 유도한다는 것이 밝혀졌다. 이는, 특히 본 발명에 따른 화합물을 매트릭스 재료로서 사용시 적용되나, 정공-수송 물질 또는 정공-주입 물질로서 사용시에도 적용된다. 그러므로, 본 발명은 이들 물질 및 이러한 유형의 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자에 관한 것이다.

[0006] WO 2011/042107 는 트리아진 또는 다른 전자-결핍 헤테로아릴 기로 치환된 가교된 카르바졸 유도체를 개시하고 있으며, 여기서 전자-결핍 헤테로아릴 기에 의한 상기 치환은 필수적이다. 이들 화합물은 특히 인광 발광체

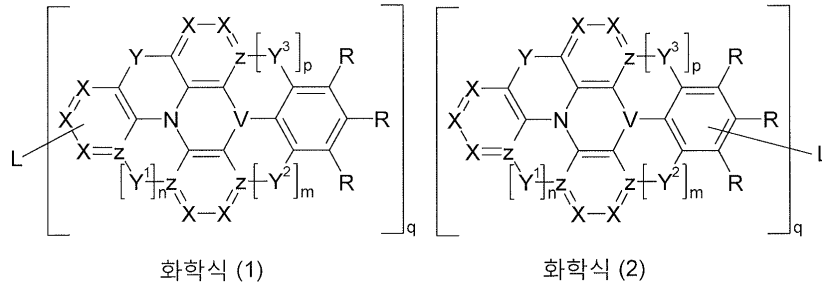
용 매트릭스 물질로서 기술되어 있다. 이러한 치환 패턴이 없는 화합물은 개시되어 있지 않다.

[0007] WO 2011/088877 은 디아릴아미노, 트리아릴아미노 또는 카르바졸 기에 의해 치환된 가교된 카르바졸 유도체를 개시하고 있으며, 여기서 이들 기에 의한 상기 치환은 필수적이다. 이러한 치환 패턴이 없는 화합물은 개시되어 있지 않다.

발명의 내용

[0008] 놀랍게도, 양호한 전자 특성을 나타내는 유기 전계발광 소자에서의 본 발명에 따른 화합물의 용도가 밝혀졌다.

[0009] 따라서, 본 발명은 하기 화학식 (1) 또는 (2) 의 화합물에 관한 것이다:



[0010]

[0011] [식 중, 사용된 기호 및 지수에 하기가 적용됨:

[0012] V 는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, N, P 또는 P=O 이고;

[0013] X 는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, CR 또는 N 이거나; 또는 X 는 C 를 나타내고 (L 기가 이러한 X 기에 결합되는 경우);

[0014] Y, Y¹, Y², Y³ 은 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 단일 결합 또는 C(R¹)₂, NR¹, O, S, C=O, C=NR¹, C=C(R¹)₂, Si(R¹)₂, BR¹, PR¹, P(=O)R¹, SO, SO₂ 이고; 단, Y 및 Y¹ 은 동시에 단일 결합을 나타내지 않고 상기 Y² 및 Y³ 은 동시에 단일 결합을 나타내지 않고;

[0015] Z 는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, CR 또는 N 이거나; 또는 Z 는 C 를 나타내고 (Y¹ 또는 Y² 또는 Y³ 기가 이러한 Z 기에 결합되는 경우);

[0016] L 은, 동일하게 또는 상이하게, R (q = 1 인 경우) 이거나 또는 2가, 3가, 4가, 5가 또는 6가 직쇄 알킬렌, 알킬리덴, 알킬렌옥시 또는 티오알킬렌옥시 기 (탄소수 1 내지 40) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬렌, 알킬리덴, 알킬렌옥시 또는 티오알킬렌옥시 기 (탄소수 3 내지 40) 또는 알케닐렌 또는 알키닐렌 기 (탄소수 2 내지 40) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R² 에 의해 치환될 수 있고, 이때 각 경우 하나 이상의 비-인접 CH₂ 기는 -R²C=CR²-, -C≡C-, Si(R²)₂, C=O, C=NR², P(=O)R², S=O, SO₂, -O-, -S- 또는 -CONR²- 에 의해 대체될 수 있고, 이때 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂ 에 의해 대체될 수 있음), 또는 2가, 3가, 4가, 5가 또는 6가 방향족 고리계 (방향족 고리원자수 5 내지 40), (이는 하나 이상의 라디칼 R² 에 의해 치환될 수 있음), 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 5 내지 60) (이는 헤테로아릴 기로서, 배제적으로 황-함유 또는 산소-함유 헤테로아릴 기를 함유하고, 이는 하나 이상의 라디칼 R² 에 의해 치환될 수 있음), 또는 P(R²)_{3-r}, P(=O)(R²)_{3-r}, C(R²)_{4-r}, Si(R²)_{4-r}, N(Ar)_{3-r} (이때 r 은 2, 3 또는 4 를 나타내고, 단, r 은 L 의 최대 원자수를 초과하지 않음) 이거나; 또는 L 은 화학 결합이고 (q = 2 인 경우), 여기서 L 의 원자가 = q + 1 이고;

[0017] n, m, p 는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 0 또는 1 이고(이때 n = 0 또는 m = 0 또는 p = 0 이란, 상응하는 기 Y¹ 또는 Y² 또는 Y³ 가 각각 존재하지 않고 R 기가 Y² 또는 Y³ 대신 상응하는 탄소 원자에 결합함을 의미함);

[0018] q 는 1, 2, 3, 4, 5 또는 6 이고;

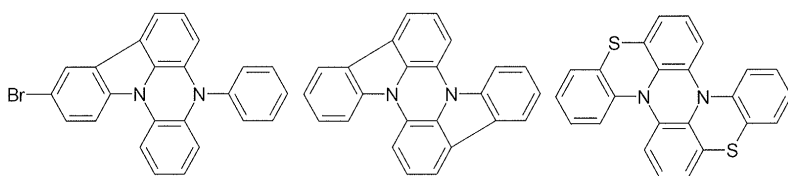
[0019] R, R^1 은 각 경우 동일하게 또는 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, C(=O)Ar, C(=O)R², P(=O)(Ar)₂, 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (탄소수 1 내지 40) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (탄소수 3 내지 40) 또는 알케닐 또는 알킬닐- 기 (탄소수 2 내지 40) (이의 각각은 하나 이상의 라디칼 R²에 의해 치환될 수 있고, 이때 하나 이상의 비-인접 CH₂ 기는 R²C=CR², C≡C, Si(R²)₂, C=O, C=NR², P(=O)(R²), SO, SO₂, NR², O, S 또는 CONR²에 의해 대체될 수 있고, 이때 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂에 의해 대체될 수 있음), 방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 60) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R²에 의해 치환될 수 있음), 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 5 내지 60) (이는 헤테로아릴- 기로서, 황-함유 또는 산소-함유 헤테로아릴 기를 함유하고 이는 하나 이상의 라디칼 R²에 의해 치환될 수 있음), 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기 (방향족 고리원자수 5 내지 60), (이는 하나 이상의 라디칼 R²에 의해 치환될 수 있음), 또는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬 기 (방향족 고리원자수 5 내지 60) (이는 하나 이상의 라디칼 R²에 의해 치환될 수 있고, 이때 동일한 Y 기에 결합되는 2개의 치환기 R¹은 임의적으로는 서로 함께 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성할 수 있고, 이는 하나 이상의 라디칼 R²에 의해 치환될 수 있음)로 구성된 군에서 선택되며; 더욱이, 2개의 인접 라디칼 R은 축합된 벤조 고리를 형성할 수 있고, 이는 하나 이상의 라디칼 R²에 의해 치환될 수 있고; 화학식 (2)에서 R 기는 존재하지 않고 (L 기가 상응하는 탄소 원자에 결합되는 경우);

[0020] R^2 는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, C(=O)Ar, C(=O)R³, P(=O)(Ar)₂, 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (탄소수 1 내지 40) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (탄소수 3 내지 40) 또는 알케닐 또는 알킬닐- 기 (탄소수 2 내지 40), (이의 각각은 하나 이상의 라디칼 R³에 의해 치환될 수 있고, 이때 하나 이상의 비-인접 CH₂ 기는 R³C=CR³, C≡C, Si(R³)₂, C=O, C=NR³, P(=O)(R³), SO, SO₂, NR³, O, S 또는 CONR³에 의해 대체될 수 있고, 이때 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂에 의해 대체될 수 있음), 방향족 고리계 (방향족 고리원자수 5 내지 60) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R³에 의해 치환될 수 있음), 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기 (방향족 고리원자수 5 내지 60) (이는 하나 이상의 라디칼 R³에 의해 치환될 수 있음), 또는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬- 기 (방향족 고리원자수 5 내지 60)로 구성된 군에서 선택되고;

[0021] Ar 은 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 5 내지 30) (이는 하나 이상의 비-방향족 라디칼 R³에 의해 치환될 수 있음) 이고; 동일한 P 원자에 결합되는 2개의 라디칼 Ar은 단일 결합 또는 N(R³), C(R³)₂, O 또는 S에서 선택되는 가교에 의해 서로 가교될 수 있고;

[0022] R^3 은 H, D, F, CN, 지방족 탄화수소 라디칼 (탄소수 1 내지 20) 또는 방향족 고리계 (방향족 고리원자수 5 내지 30) (이때 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I 또는 CN에 의해 대체될 수 있음)으로 구성된 군에서 선택되고;

[0023] 하기 화합물은 본 발명에서 배제됨:



[0024]

[0025] 인접 라디칼 R은 서로 직접 연결되는 탄소 원자에 결합되는 라디칼 R을 의미하는 것으로 한다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0026]

본 발명의 의미 내에서, 아릴기는 6 내지 60 개의 C 원자를 포함하고; 본 발명의 의미 내에서, 헤테로아릴기는 2 내지 60 개의 C 원자 및 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고, 단 C 원자 및 헤테로원자의 합은 5 이상이다.

헤테로원자는 바람직하게는 N, O 및/또는 S로부터 선택된다. 아릴기 또는 헤테로아릴기는 여기서 단순한 방향족 고리, 즉 벤젠 또는 단순한 헤테로방향족 고리, 예를 들어 피리딘, 피리미딘, 티오펜 등, 또는 축합된 (융합된) 아릴 또는 헤테로아릴기, 예를 들어 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 퀴놀린, 이소퀴놀린 등을 의미한다. 단일 결합에 의해 서로 연결된 방향족 고리들, 예를 들어 바이페닐은 대조적으로 아릴 또는 헤테로아릴기가 아니라, 대신에 방향족 고리계로 칭한다.

[0027]

본 발명의 의미 내에서, 황-함유 또는 산소-함유 헤테로아릴 기는 하나 이상의 황 원자 또는 산소 원자를 함유하는 헤테로아릴 기이며, 특히 푸란, 티오펜, 벤조푸란, 벤조티오펜, 디벤조푸란 및 디벤조티오펜이다.

[0028]

본 발명의 의미 내에서, 방향족 고리계는 고리계에 6 내지 80 개의 C 원자를 포함한다. 본 발명의 의미 내에서, 헤테로방향족 고리계는 고리계에 2 내지 60 개의 C 원자 및 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고, 단 C 원자 및 헤테로원자의 합은 5 이상이다. 헤테로원자는 바람직하게는 O 및/또는 S 및 임의적으로 추가적으로 N로부터 선택된다. 헤테로방향족 고리계에 존재하는 헤테로아릴 기는 배제적인 황-함유 또는 산소-함유 기이다. 본 발명의 의미 내에서, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계는 아릴 또는 헤테로아릴기만을 필수적으로 포함하는 것은 아니지만, 대신에 추가로 다수의 아릴 또는 헤테로아릴기가 하나 이상의 C 원자에 의해 연결될 수 있는 계를 의미한다. 따라서, 예를 들어 플루오렌, 9,9'-스피로바이플루오렌, 9,9-디아릴플루오렌, 트리아릴아민, 디아릴 에테르, 스틸벤 등과 같은 계가, 또한 2 개 이상의 아릴기가, 예를 들어 짧은 알킬기에 의해 단속되는 계인 것과 같이, 본 발명의 의미 내에서 방향족 고리계인 것으로 취해지는 것으로 의도된다. 더욱이, 단일 결합에 의해 서로 연결되는 방향족 고리는 본원에서 방향족 고리계로서 지칭된다.

[0029]

본 발명의 목적을 위해, 전형적으로 1 내지 40 개 또는 또한 1 내지 20 개의 C 원자를 포함할 수 있고, 또한 개별 H 원자 또는 CH₂ 기가 상기 언급된 기로 치환될 수 있는, 지방족 탄화수소 라디칼 또는 알킬기 또는 알케닐 또는 알킬닐기는 바람직하게는 라디칼 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, s-부틸, t-부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, s-펜틸, 시클로펜틸, n-헥실, 시클로헥실, n-헵틸, 시클로헵틸, n-옥틸, 시클로옥틸, 2-에틸헥실, 트리플루오로메틸, 펜타플루오로에틸, 2,2,2-트리플루오로에틸, 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 시클로펜테닐, 헥세닐, 시클로헥세닐, 헵테닐, 시클로헵테닐, 옥테닐, 시클로옥테닐, 에티닐, 프로피닐, 부티닐, 펜티닐, 헥시닐, 헵티닐 및 옥티닐을 의미한다. 1 내지 40 개의 C 원자를 갖는 알콕시기는 바람직하게는 메톡시, 트리플루오로메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, s-부톡시, t-부톡시, n-펜톡시, s-펜톡시, 2-메틸부톡시, n-헥소키, 시클로헥실옥시, n-헵톡시, 시클로헵틸옥시, n-옥틸옥시, 시클로옥틸옥시, 2-에틸헥실옥시, 펜타플루오로에톡시 또는 2,2,2-트리플루오로에톡시를 의미한다. 1 내지 40 개의 C 원자를 갖는 티오알킬기는, 특히 메틸티오, 에틸티오, n-프로필티오, i-프로필티오, n-부틸티오, i-부틸티오, s-부틸티오, t-부틸티오, n-펜틸티오, s-펜틸티오, n-헥실티오, 시클로헥실티오, n-헵틸티오, 시클로헵틸티오, n-옥틸티오, 시클로옥틸티오, 2-에틸헥실티오, 트리플루오로메틸티오, 펜타플루오로에틸티오, 2,2,2-트리플루오로에틸티오, 에테닐티오, 프로페닐티오, 부테닐티오, 펜테닐티오, 시클로펜테닐티오, 헥세닐티오, 시클로헥세닐티오, 헵테닐티오, 시클로헵테닐티오, 옥테닐티오, 시클로옥테닐티오, 에티닐티오, 프로피닐티오, 부티닐티오, 펜티닐티오, 헥시닐티오, 헵티닐티오 또는 옥티닐티오를 의미한다. 일반적으로, 본 발명에 따라 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기는 직쇄, 분지형 또는 고리형일 수 있고, 여기서 하나 이상의 비-인접 CH₂ 기는 상기 언급된 기에 의해 대체될 수 있고; 나아가, 하나 이상의 H 원자는 또한 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂, 바람직하게는 F, Cl 또는 CN, 더욱 바람직하게는 F 또는 CN, 특히 바람직하게는 CN에 의해 대체될 수 있다.

[0030]

5 - 80 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (각 경우에 또한 상기 언급된 라디칼 R² 또는 R³에 의해 치환될 수 있고, 임의의 목적하는 위치를 통해 방향족 또는 헤테로방향족 기에 연결될 수 있음)가, 특히 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센, 페난트렌, 벤조페난트렌, 피렌, 크리센, 페릴렌, 플루오란텐, 나프타센, 펜타센, 벤조피렌, 바이페닐, 바이페닐렌, 티페닐, 트리페닐렌, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 디히드로페난트렌, 디히드로피렌, 테트라히드로피렌, 시스- 또는 트랜스-인데노플루오렌, 트록센, 이소트록센, 스피로트록센, 스피로이소트록센, 푸란, 벤조푸란, 이소벤조푸란, 디벤조푸란, 티오펜, 벤조티오펜, 이소벤조티오펜, 디벤조티오펜, 페노티아진, 페녹사진, 옥사졸, 벤즈옥사졸, 나프톡사졸, 안트톡사졸, 페난트톡사졸, 이속사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 페노티아진, 벤조트리아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아

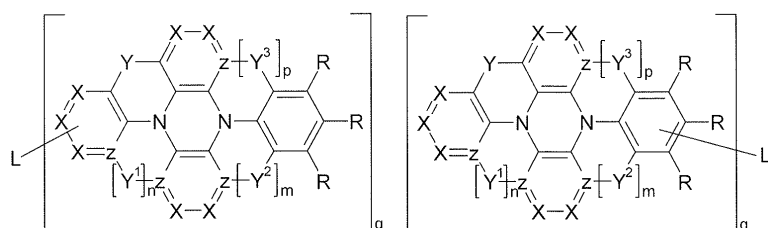
줄, 1,2,5-옥사디아졸, 1,3,4-옥사디아졸, 1,2,3-티아디아졸, 1,2,4-티아디아졸, 1,2,5-티아디아졸, 1,3,4-티아디아졸 및 벤조티아디아졸 유래의 기 또는 이들 계의 조합을 의미한다.

[0031] 본 발명의 바람직한 구현예에서, V 는 N 을 나타낸다.

[0032] 본 발명의 바람직한 추가 구현예에서, Y, Y¹, Y² 및 Y³ 은, 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 단일 결합, C(R¹)₂, NR¹, O 또는 S, 특히 바람직하게는 단일 결합 또는 C(R¹)₂ 을 나타낸다.

[0033] 본 발명의 바람직한 추가 구현예에서, 고리 당 X 및 Z 기 중 최대 하나가 N 을 나타내고 이러한 고리에서 다른 X 및 Z 기가 CR 을 나타내거나, 또는 Z 는 C 를 나타내고 (Y¹ 또는 Y² 또는 Y³ 기가 이러한 Z 기에 결합되는 경우) X 는 C 를 나타낸다 (L 기가 이에 결합되는 경우). 특히 바람직하게는, 모든 X 및 Z 가 CR 을 나타내거나, 또는 Z 는 C 를 나타내고 (Y¹ 또는 Y² 또는 Y³ 기가 이러한 Z 에 결합되는 경우), X 는 C 를 나타내고 (L 기가 이러한 X 에 결합되는 경우).

[0034] 따라서, 화학식 (1) 또는 (2) 의 바람직한 구현예는 하기 화학식 (1a) 또는 (2a) 의 화합물이고:



화학식 (1a)

화학식 (2a)

[0035]

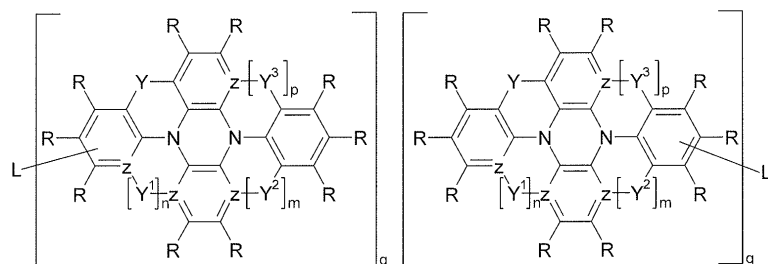
[0036] [식 중, 사용되는 기호에 하기가 적용된다:

[0037] Y, Y¹, Y², Y³ 은, 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 단일 결합, C(R¹)₂, NR¹, O 또는 S 이고;

[0038] X, Z 는 CR 또는 N 이고, 단, 고리 당 X 및 Z 기 중 최대 하나가 N 을 나타내고, 이러한 고리에서 다른 X 및 Z 기가 CR 을 나타내거나, 또는 Z 는 C 를 나타내고 (Y¹ 또는 Y² 또는 Y³ 기가 이러한 Z 에 결합되는 경우) X 는 C 를 나타내고 (L 기가 이러한 X 에 결합되는 경우);

[0039] 사용되는 다른 기호 및 지수는 상기 주어진 의미를 가짐].

[0040] 화학식 (1) 또는 (2) 의 특히 바람직한 구현예는 하기 화학식 (1b) 또는 (2b) 의 화합물이며:



화학식 (1b)

화학식 (2b)

[0041]

[0042] 식 중, 사용되는 기호에는 하기가 적용된다:

[0043] Y, Y¹, Y², Y³ 은, 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 단일 결합, C(R¹)₂, NR¹, O 또는 S, 특히 단일 결합 또는 C(R¹)₂ 이고;

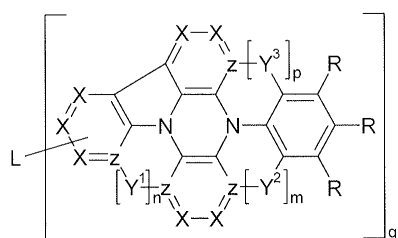
[0044] Z 는 CR 이거나, 또는 Z 는 C 이고 (Y¹ 또는 Y² 또는 Y³ 기가 이러한 Z 에 결합되는 경우);

[0045] 사용되는 다른 기호 및 지수는 상기 주어진 의미를 갖고;

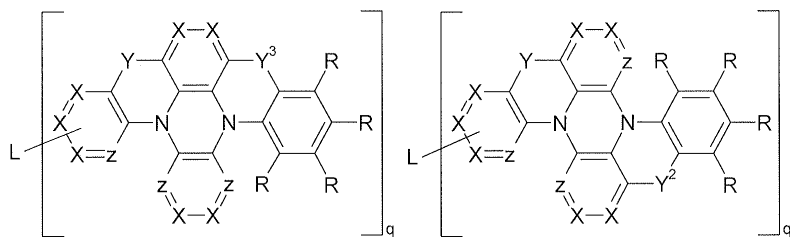
[0046] L 기가 이러한 위치에서 결합되는 경우 라디칼 R 은 여기서 존재하지 않는다.

[0047] 바람직한 것은 화학식 (1), (1a), (1b) 또는 (2), (2a), (2b) 의 화합물에서, Y 가 단일 결합을 나타내는 것이다. 바람직한 것은 마찬가지로 화학식 (1) 또는 (2) 의 화합물에서, Y 가 $C(R^1)_2$, NR^1 , O 또는 S 를 나타내고, Y^2 가 동일하게 또는 상이하게, $C(R^1)_2$, NR^1 , O 또는 S 를 나타내고, $n = 0$ 및 $p = 0$ 인, 화합물이다. 바람직한 것은 마찬가지로 화학식 (1) 또는 (2) 의 화합물에서, Y 가 $C(R^1)_2$, NR^1 , O 또는 S 를 나타내고 Y^3 가 동일하게 또는 상이하게, $C(R^1)_2$, NR^1 , O 또는 S 를 나타내고 $n = 0$ 및 $m = 0$ 인, 화합물이다.

[0048] 따라서, 화학식 (1) 또는 (1a) 또는 (1b) 의 바람직한 구현에는 하기 화학식 (3) 내지 (5) 의 화합물이고 화학식 (2) 또는 (2a) 또는 (2b) 의 바람직한 구현에는 하기 화학식 (6) 내지 (8) 의 화합물이다:

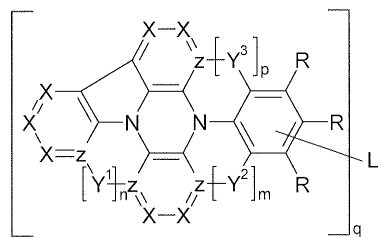


화학식 (3)

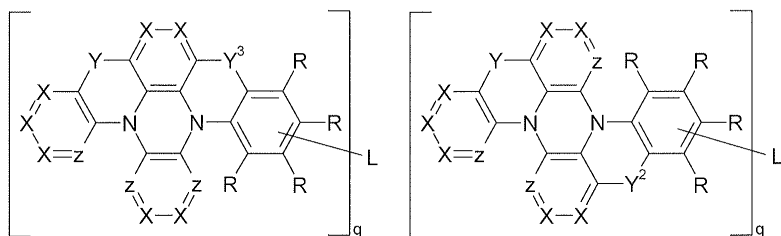


화학식 (4)

화학식 (5)



화학식 (6)



화학식 (7)

화학식 (8)

[0049]

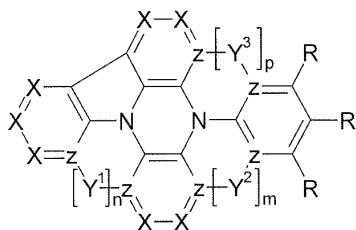
[0050] 식 중 사용되는 기호 및 지수는 상기 주어진 의미를 갖고 L 기가 이러한 위치에서 결합되는 경우 R 기는 존재하지 않는다.

[0051] 화학식 (1) 또는 화학식 (2) 의 화합물의 바람직한 구현에 또는 상기 언급된 바람직한 구현에서, 지수 $q = 1$

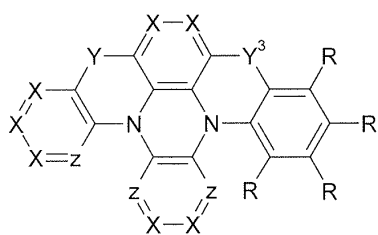
이고 L 은 R 기를 나타낸다.

[0052]

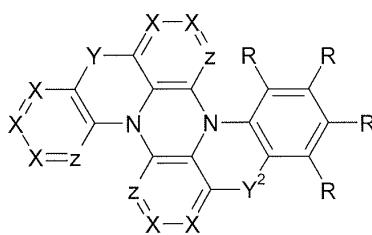
따라서 화학식 (3) 내지 (8) 의 화합물의 바람직한 구현예는 하기 화학식 (3a), (4a) 및 (5a) 의 화합물이다:



화학식 (3a)



화학식 (4a)



화학식 (5a)

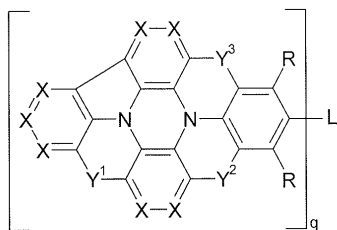
[0053]

식 중 사용되는 기호 및 지수는 상기 주어진 의미를 갖는다.

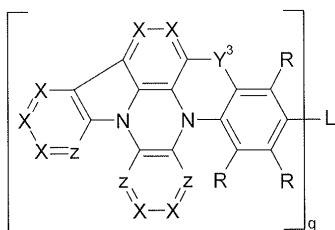
[0054]

[0055]

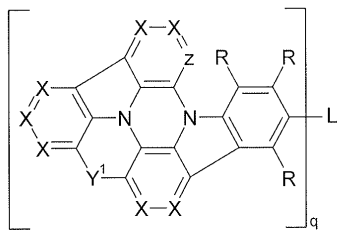
화학식 (3) 의 화합물의 바람직한 구현예는 하기 화학식 (9) 내지 (13) 의 화합물이며, 화학식 (6) 의 화합물의 바람직한 구현예는 하기 화학식 (14) 내지 (18) 의 화합물이다:



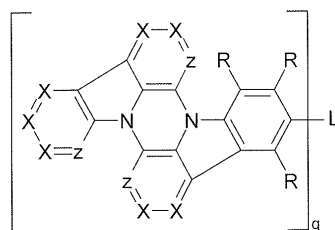
화학식 (9)



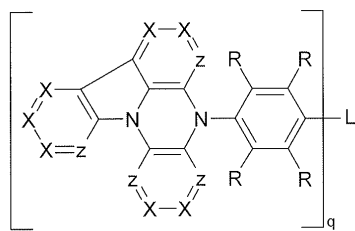
화학식 (10)



화학식 (11)

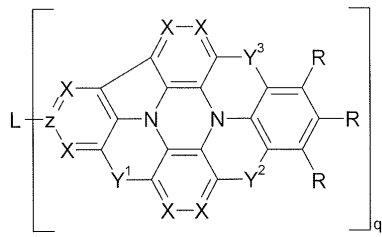


화학식 (12)

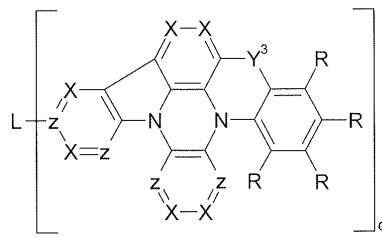


화학식 (13)

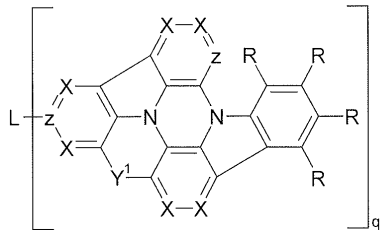
[0056]



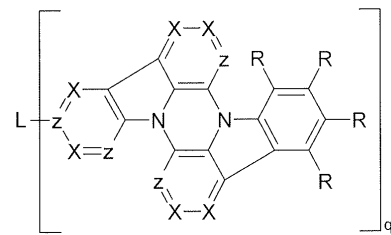
화학식 (14)



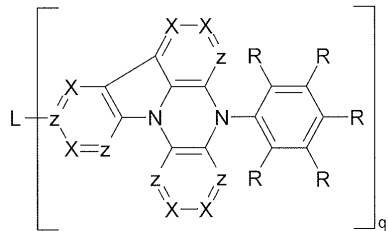
화학식 (15)



화학식 (16)



화학식 (17)



화학식 (18)

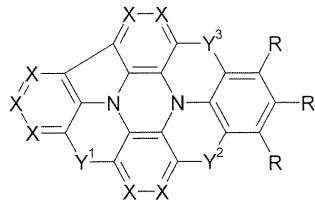
[0057]

[0058]

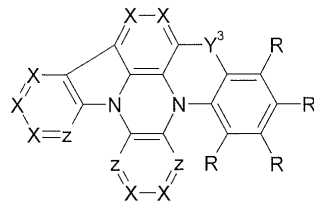
식 중 사용되는 기호 및 지수는 상기 주어진 의미를 갖는다. 화학식 (9), (10), (14) 및 (15) 에서, Y^3 은 바람직하게는 단일 결합을 나타낸다.

[0059]

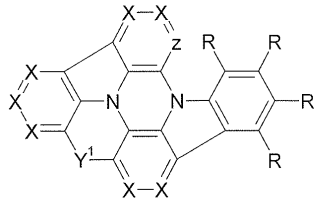
화학식 (3a) 의 화합물의 바람직한 구현예는 하기 화학식 (19) 내지 (23) 의 화합물이다:



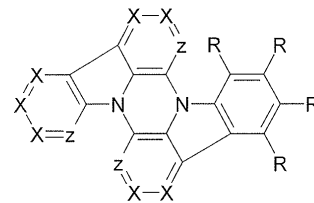
화학식 (19)



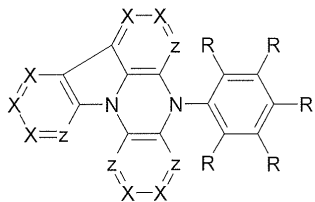
화학식 (20)



화학식 (21)



화학식 (22)



화학식 (23)

[0060]

[0061]

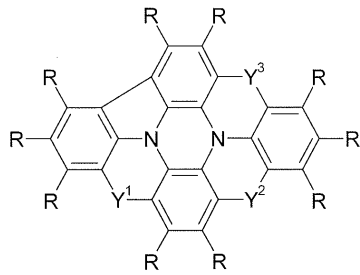
식 중 사용되는 기호 및 지수는 상기 주어진 의미를 갖는다. 화학식 (19) 및 (20) 에서, Y^3 은 바람직하게는 단일 결합을 나타낸다.

[0062]

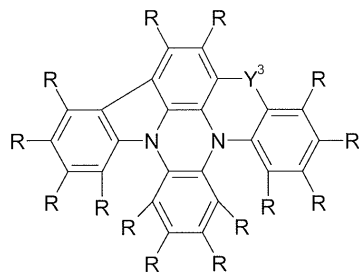
본 발명의 바람직한 구현예에서, 고리 당 화학식 (3) 내지 (23) 의 화합물에서 합계로 최대 하나의 X 및 Z 기가 N 을 나타낸다. 특히 바람직하게는, 모든 X 및 Z 기가 CR 또는 C 를 나타낸다.

[0063]

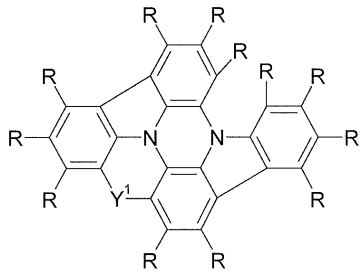
따라서, 본 발명의 특히 바람직한 구현예는 하기 화학식 (19a) 내지 (23a) 의 화합물이다:



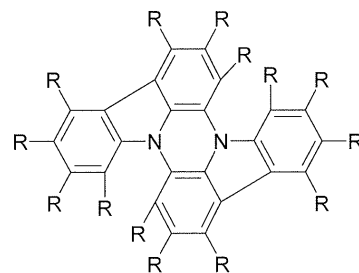
화학식 (19a)



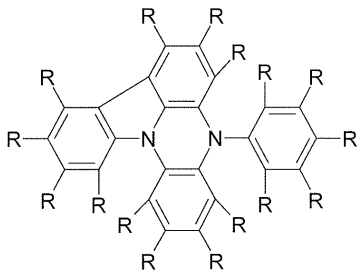
화학식 (20a)



화학식 (21a)



화학식 (22a)



화학식 (23a)

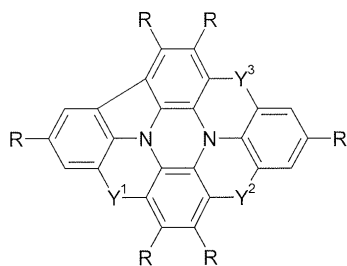
[0064]

[0065]

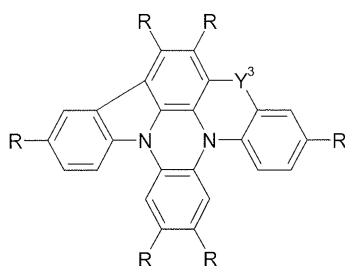
식 중 사용되는 기호 및 지수는 상기 주어진 의미를 갖는다. 화학식 (19a) 및 (20a) 에서, Y^3 은 바람직하게는 단일 결합을 나타낸다.

[0066]

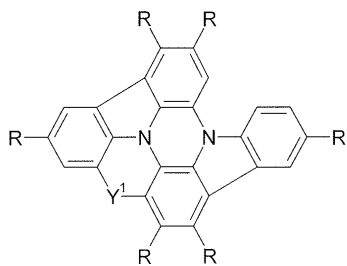
매우 본 발명의 특히 바람직한 구현에는 하기 화학식 (19b) 내지 (23b) 의 화합물이다:



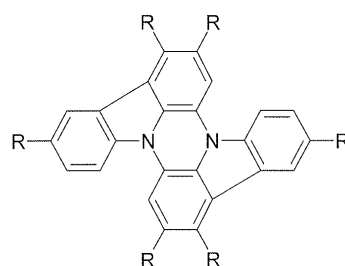
화학식 (19b)



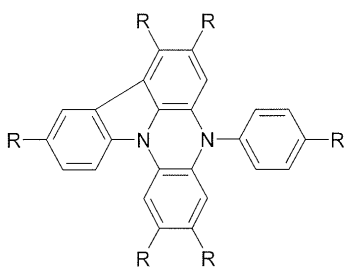
화학식 (20b)



화학식 (21b)



화학식 (22b)



화학식 (23b)

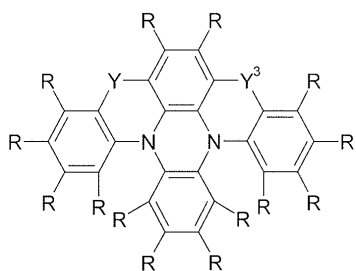
[0067]

[0068]

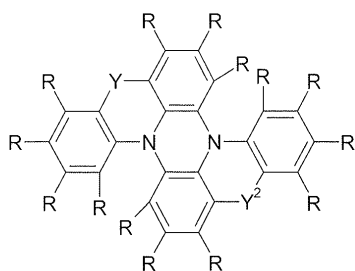
식 중 사용되는 기호 및 지수는 상기 주어진 의미를 갖는다. 화학식 (19b) 및 (20b) 에서, Y^3 은 바람직하게는 단일 결합을 나타낸다.

[0069]

화학식 (4a) 및 (5a) 의 바람직한 구현에는 하기 화학식 (24) 및 (25) 의 화합물이다:



화학식 (24)



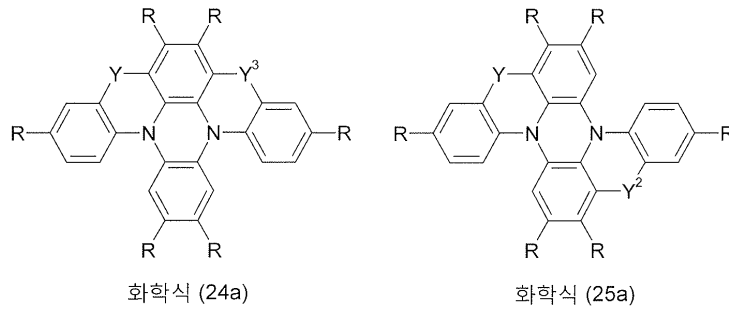
화학식 (25)

[0070]

[0071]

식 중 사용되는 기호는 상기 주어진 의미를 갖고 Y , Y^2 및 Y^3 은 바람직하게는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 단일 결합, $C(R^1)_2$, NR^1 , O 또는 S 를 나타내고, 특히, 동일하게 또는 상이하게, 단일 결합 또는 $C(R^1)_2$ 를 나타낸다.

[0072] 화학식 (24) 및 (25) 의 바람직한 구현에는 하기 화학식 (24a) 및 (25a) 의 화합물이다:



[0073]

[0074] 식 중 사용되는 기호는 상기 주어진 의미를 갖고 Y, Y² 및 Y³ 은 바람직하게는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 단일 결합, C(R¹)₂, NR¹, O 또는 S, 을 나타내고, 특히 동일하게 또는 상이하게, 단일 결합 또는 C(R¹)₂ 를 나타낸다.

[0075]

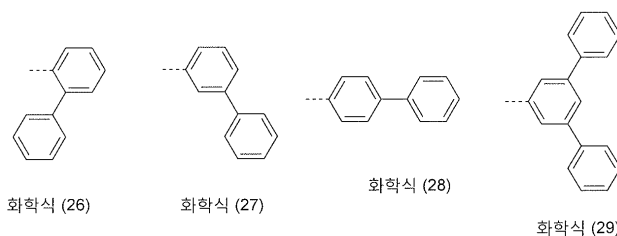
바람직한 치환기 R 은, 각 경우 동일하게 또는 상이하게, H, D, F, CN, C(=O)Ar, C(=O)R², P(=O)(Ar)₂, 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 10) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (탄소수 3 내지 10) (이의 각각은 하나 이상의 라디칼 R²에 의해 치환될 수 있고, 이때 하나 이상의 비-인접 CH₂ 기는 O 또는 S 에 의해 대체될 수 있고, 이때 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 에 의해 대체될 수 있음), 방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 24) (이는 하나 이상의 라디칼 R²에 의해 치환될 수 있음), 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 5 내지 24) (이는 헤테로아릴 기로서, 배제적으로 황-함유 또는 산소-함유 헤테로아릴 기를 함유하고, 이는 하나 이상의 라디칼 R²에 의해 치환될 수 있음), 또는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬 기 (방향족 고리원자수 5 내지 24) (이는 하나 이상의 라디칼 R²에 의해 치환될 수 있고, 이때 2개의 인접 치환기 R 은 임의적으로는 서로 함께 축합된 벤조 고리 (이는 하나 이상의 라디칼 R²에 의해 치환될 수 있음) 를 형성할 수 있음) 로 구성된 군에서 선택된다.

[0076]

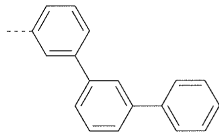
특히 바람직한 치환기 R 은, 각 경우 동일하게 또는 상이하게, H, 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 4), 특히 메틸, 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (탄소수 3 내지 8) (이의 각각은 하나 이상의 라디칼 R²에 의해 치환될 수 있음), 방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 24) (이는 하나 이상의 라디칼 R²에 의해 치환될 수 있음), 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 5 내지 24) (이는 헤테로아릴 기로서, 배제적으로 황-함유 또는 산소-함유 헤테로아릴 기를 함유하고 이는 하나 이상의 라디칼 R²에 의해 치환될 수 있음) 로 구성된 군에서 선택된다.

[0077]

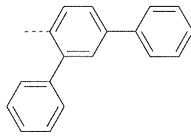
R 이 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 나타내는 경우, 이는 바람직하게는 하기 화학식 (26) 내지 (58) 의 기로부터 선택된다:



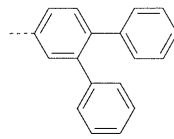
[0078]



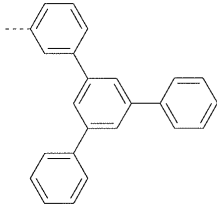
화학식 (30)



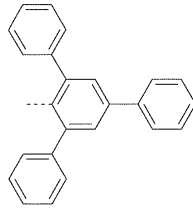
화학식 (31)



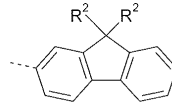
화학식 (32)



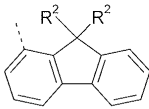
화학식 (33)



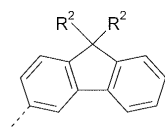
화학식 (34)



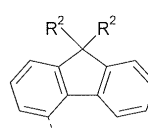
화학식 (35)



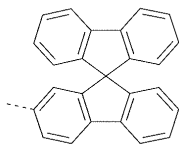
화학식 (36)



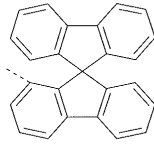
화학식 (37)



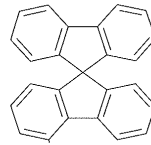
화학식 (38)



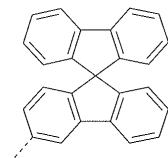
화학식 (39)



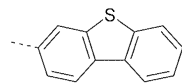
화학식 (40)



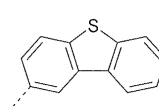
화학식 (41)



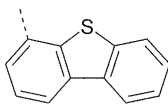
화학식 (42)



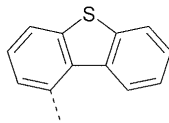
화학식 (43)



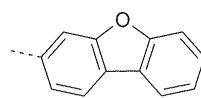
화학식 (44)



화학식 (45)

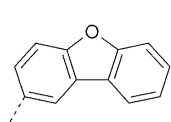


화학식 (46)

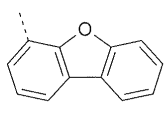


화학식 (47)

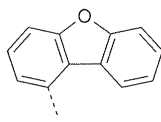
[0079]



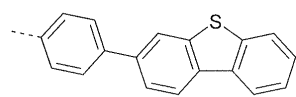
화학식 (48)



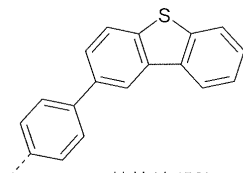
화학식 (49)



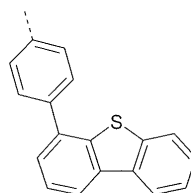
화학식 (50)



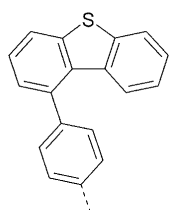
화학식 (51)



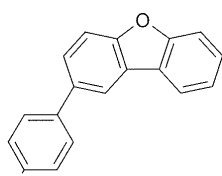
화학식 (52)



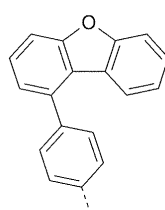
화학식 (53)



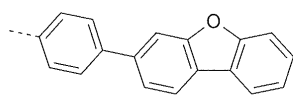
화학식 (54)



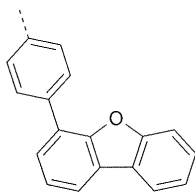
화학식 (55)



화학식 (56)



화학식 (57)



화학식 (58)

[0080]

[0081]

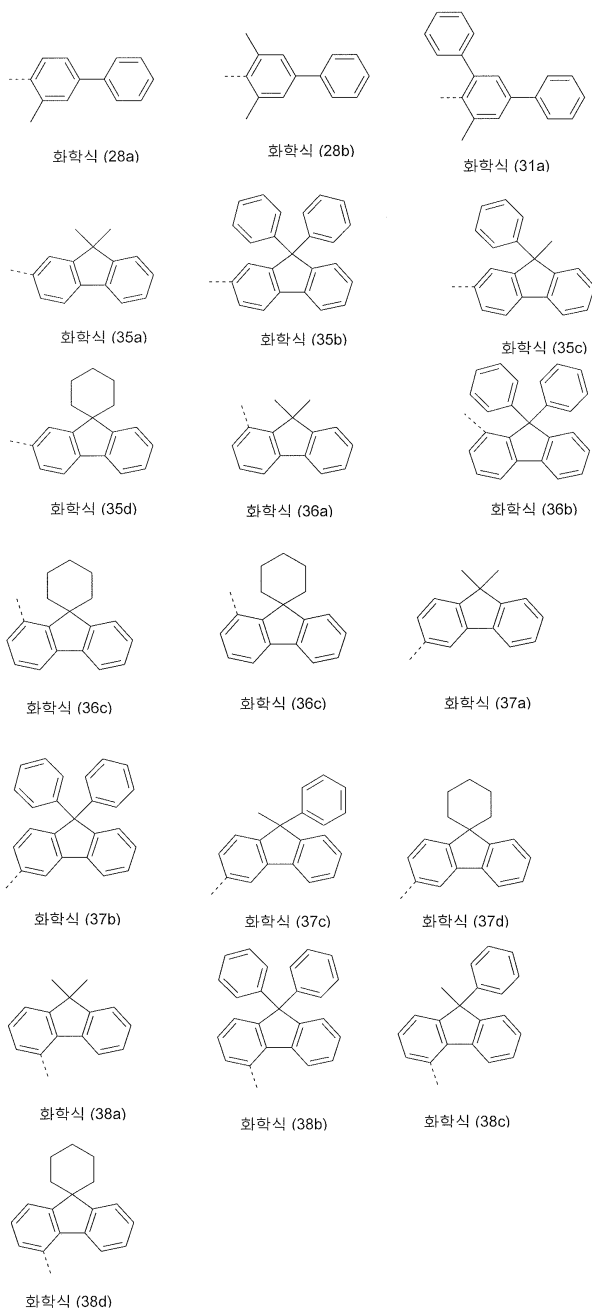
식 중, 파선 결합은 기본 구조로의 결합을 나타내고 상기 기 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있으나, 바람직하게는 치환되지 않는다.

[0082]

화학식 (35) 내지 (38)의 기에서 R^2 는 바람직하게는, 동일하게 또는 상이하게, 알킬 기 (탄소수 1 내지 10), 특히 메틸, 또는 페닐 기를 나타내며, 이는 하나 이상의 라디칼 R^3 에 의해 치환될 수 있다.

[0083]

화학식 (28)의 바람직한 치환 구현예는 하기 화학식 (28a) 및 (28b)이며, 화학식 (31)의 바람직한 구현예는 화학식 (31a)이며, 화학식 (35)의 바람직한 구현예는 하기 화학식 (35a), (35b), (35c) 및 (35d)이며, 화학식 (36)의 바람직한 구현예는 하기 화학식 (36a), (36b), (36c) 및 (36d)이며, 화학식 (37)의 바람직한 구현예는 하기 화학식 (37a), (37b), (37c) 및 (37d)이고, 및 화학식 (38)의 바람직한 구현예는 하기 화학식 (38a), (38b), (38c) 및 (38d)이다:



식 중, 파선 결합은 기본 구조로의 결합을 나타낸다.

Y 또는 Y^1 또는 Y^2 또는 Y^3 이 $C(R^1)_2$ 을 나타내는 경우, R^1 은 바람직하게는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, H, D, F, 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 10) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (탄소수 3 내지 10) (이의 각각은 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있음), 이때 하나 이상의 비-인접 CH_2 기 0 또는 S 로 대체될 수 있고 이때 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 에 의해 대체될 수 있음), 방향족 고리계 (방향족 고리원자수 5 내지 24) (이는 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있음), 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 5 내지 24), (이는 헤테로아릴 기로서 배제적으로 황-함유 또는 산소-함유 헤테로아릴 기를 함유하고 이는 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있음), 또는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬 기 (방향족 고리원자수 5 내지 24) (이는 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있고, 이때 동일한 탄소 원자에 결합되는 치환기 R^1 은 임의적으로는 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 서로 함께 형성할 수 있고 따라서 이는 스

피로 계 (이는 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있음) 를 형성할 수 있음) 로 구성된 군에서 선택된다.

R^1 은 특히 바람직하게는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 4), 특히 메틸, 또는 분지형 알킬 기 (탄소수 3 내지 10) (이의 각각은 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있음), 또는 페닐 또는 오르쏘-, 메타- 또는 파라-바이페닐 기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있고, 이때 동일한 탄소 원자에 결합되는 치환기 R^1 은 임의적으로는 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 서로 함께 형성할 수 있고, 따라서 스피로 계 (이는 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있음) 를 형성할 수 있음) 로 구성된 군에서 선택된다.

[0088]

Y 또는 Y^1 또는 Y^2 또는 Y^3 이 $N(R^1)$ 을 나타내는 경우, R^1 은 바람직하게는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 10) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (탄소수 3 내지 10) (이의 각각은 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있고, 이때 질소에 직접 결합되지 않는 하나 이상의 비-인접 CH_2 기는 O 또는 S 로 대체될 수 있고 이때 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 에 의해 대체될 수 있음), 방향족 고리계 (방향족 고리원자수 5 내지 24) (이는 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있음), 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 5 내지 24) (이는 헤테로아릴 기로서, 배제적으로 황-함유 또는 산소-함유 헤테로아릴 기를 함유하고, 이는 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있음), 또는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬 기 (방향족 고리원자수 5 내지 24) (이는 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있음) 로 구성된 군에서 선택된다.

[0089]

R^1 은 특히 바람직하게는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 방향족 고리계 (방향족 고리원자수 5 내지 24) (이는 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있음), 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 5 내지 24) (이는 헤테로아릴 기로서, 배제적으로 황-함유 또는 산소-함유 헤테로아릴 기를 함유하고, 이는 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있음) 로 구성된 군에서 선택된다.

[0090]

진공 증발에 의해 가공되는 화합물에 대해서, 라디칼 R 및 R^1 에서 알킬기는 바람직하게는 4개 이하의 C 원자, 특히 바람직하게는 하나 이하의 C 원자를 갖는다. 용액으로부터 가공되는 화합물에 대해서, 올리고-아릴렌 기, 예를 들어 오르쏘-, 메타-, 파라- 또는 분지형 테르페닐- 기 또는 쿼테르페닐- 기 또는 오르쏘-, 메타- 또는 파라-바이페닐- 기에 의해 치환되는 탄소수 10 이하의 알킬 기에 의해 치환되는 화합물이 또한 적합하다.

[0091]

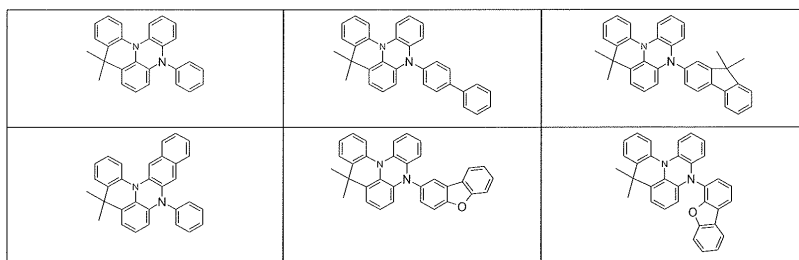
본 발명의 바람직한 추가 구현예에서, L 이 2가 또는 다가 직쇄 알킬렌 또는 알킬리렌 기 (탄소수 1 내지 10) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬렌 또는 알킬리렌 기 (탄소수 3 내지 10) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있고, 이때 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 에 의해 대체될 수 있음), 또는 적어도 2가 방향족 고리계 (방향족 고리원자수 5 내지 24) (이는 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있음), 또는 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 5 내지 24) (이는 헤테로아릴 기로서 배제적으로 황-함유 또는 산소-함유 헤테로방향족 기를 함유하고, 이는 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있음) 이거나, 또는 L 은 화학 결합이다.

[0092]

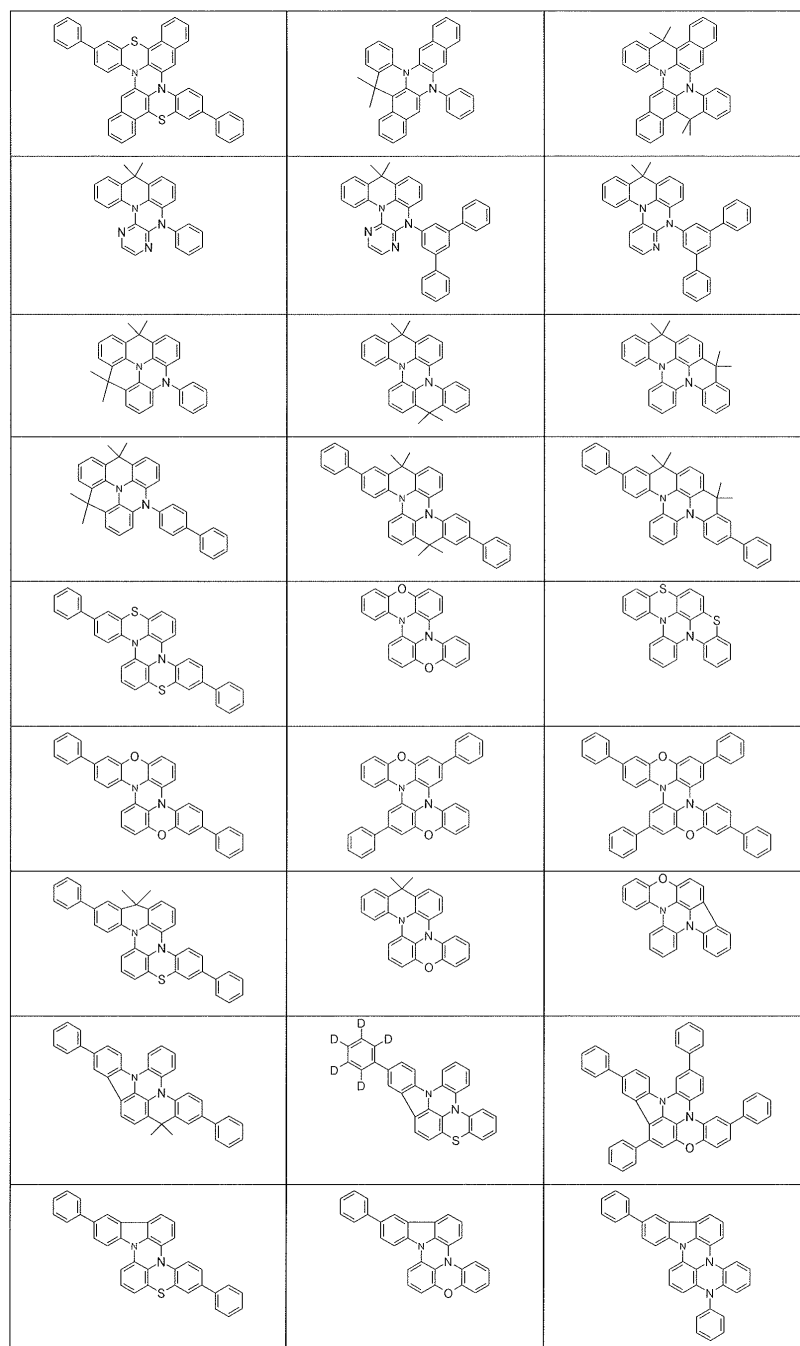
본 발명의 상기 언급된 구현예는 필요에 따라 서로 조합될 수 있다. 본 발명의 상기 언급된 구현예는 서로 조합되는 것이 특히 바람직하다.

[0093]

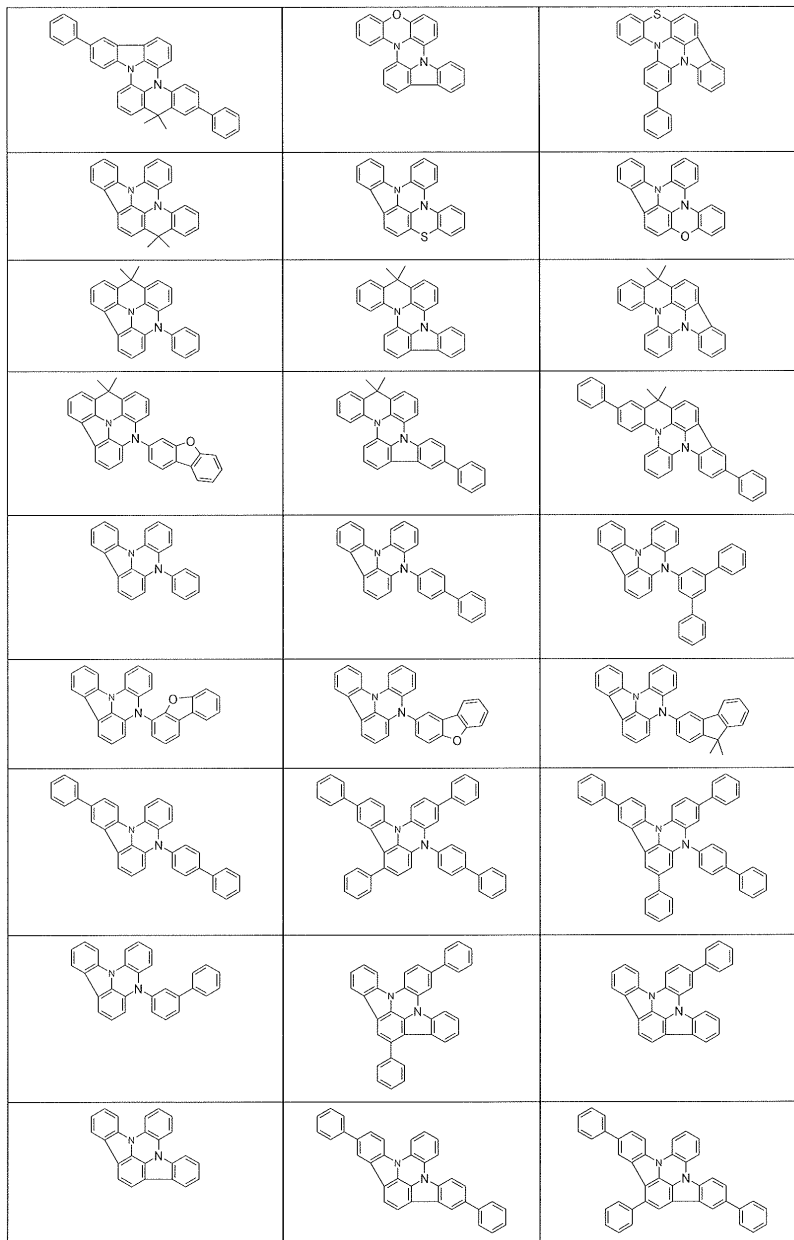
바람직하게는 전자 소자에서 사용될 수 있는 화합물로서 상기 언급된 구현예에 따른 바람직한 화합물의 예는 하기 화합물이다:



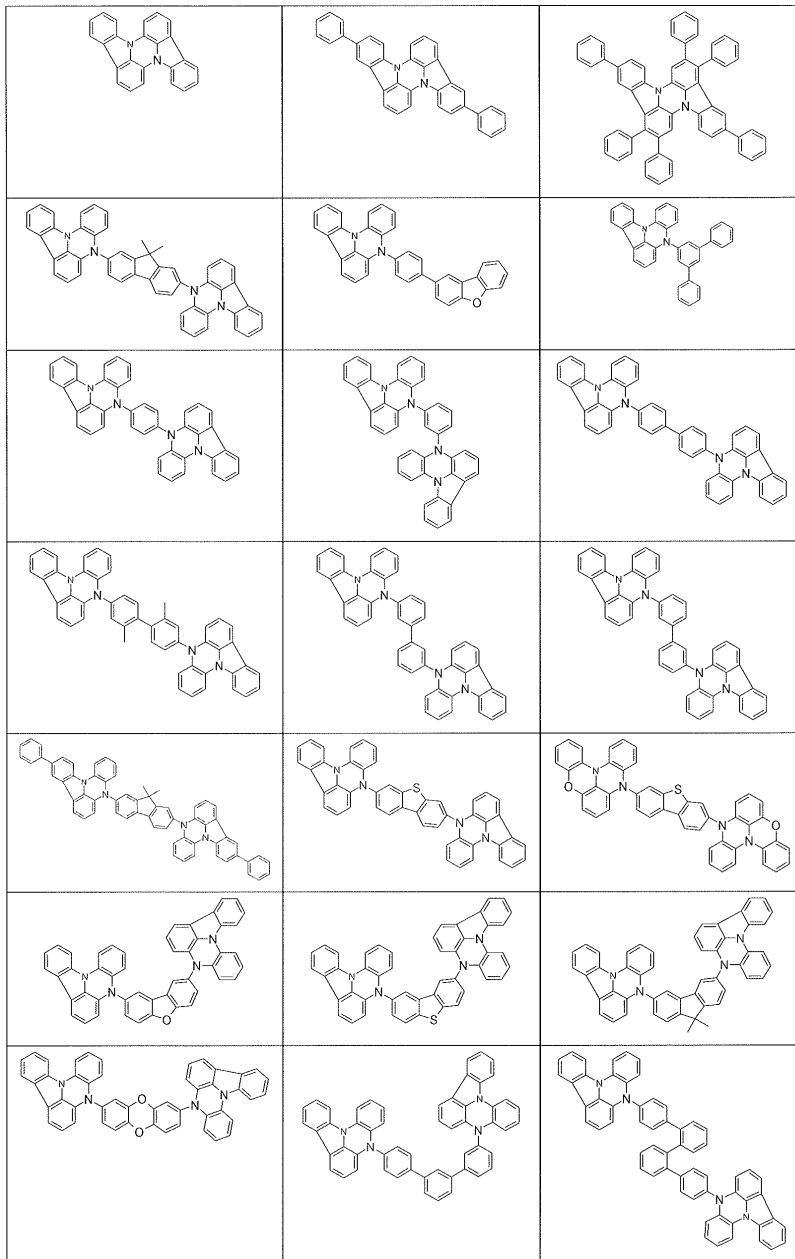
[0094]



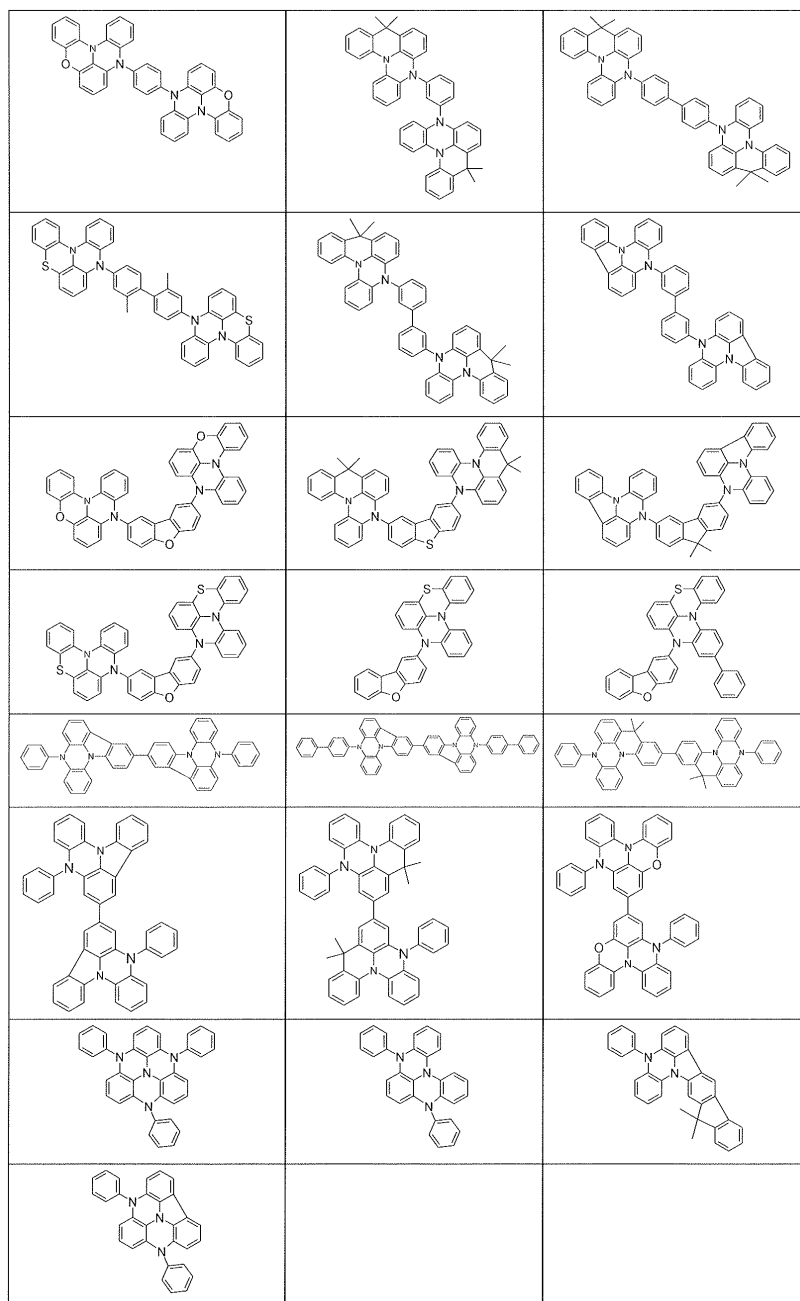
[0095]



[0096]



[0097]



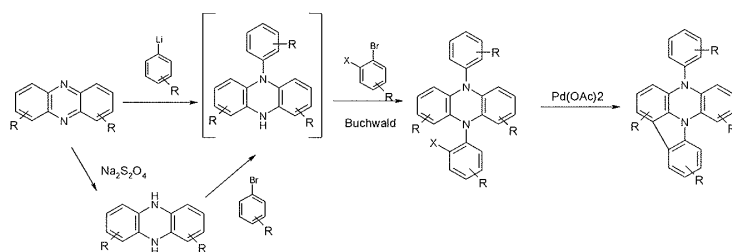
[0098]

[0099]

본 발명에 따른 화합물의 일반적 합성을 반응식 1 내지 반응식 3 에 나타낸다.

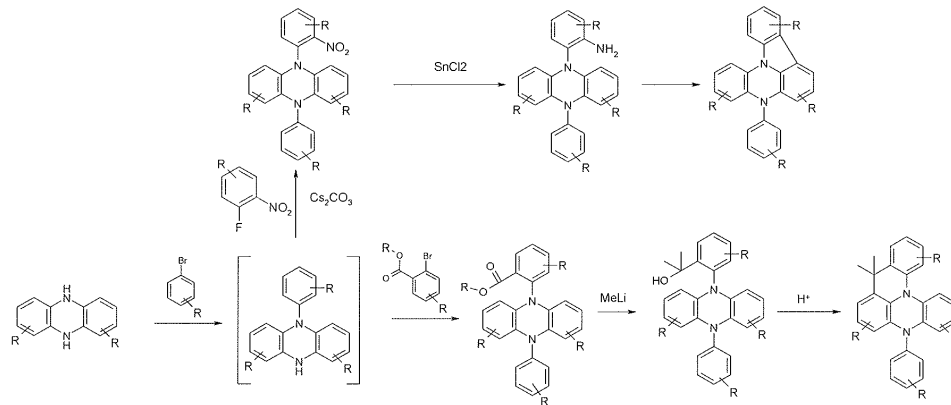
[0100]

반응식 1

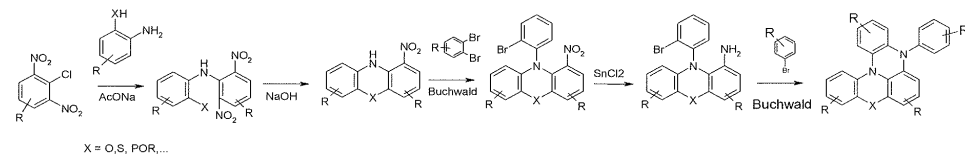


[0101]

반응식 2



반응식 3



따라서, 본 발명은 하기 반응 단계를 포함하는, 화학식 (1)의 화합물의 제조 방법에 관한 것이다:

- 가교 Y를 함유하지 않는 상응하는 기본 구조의 합성 단계; 및
- Y기의 도입 단계.

게다가, 본 발명은 본 발명에 따른 하나 이상의 화합물 및 하나 이상의 추가 화합물을 포함하는 혼합물에 관한 것이다. 추가 화합물은, 본 발명에 따른 화합물이 매트릭스 재료로서 사용되는 경우, 예를 들어 형광 또는 인광 도펀트일 수 있다. 적합한 도펀트가 유기 전계발광 소자와 관련하여 하기 제시되고, 또한 본 발명에 따른 혼합물에 있어서 바람직하다. 추가 화합물은 본 발명에 따른 화합물이 정공-수송 또는 전자-수송 화합물로서 사용되는 경우 도펀트일 수 있다. 적합한 도펀트는 유기 전계발광 소자와 관련하여 이하에 나타낸다.

용액 또는 액체상으로부터, 예를 들어 스핀 코팅 또는 인쇄 공정에 의한 가공의 경우, 본 발명에 따른 화합물 또는 혼합물의 용액 또는 제형물이 필요하다. 2종 이상의 용매의 혼합물을 사용하는 것이 바람직할 수 있다. 적합하고 바람직한 용매는, 예를 들어 톨루엔, 아니솔, o-, m- 또는 p-자일렌, 메틸 벤조에이트, 디메틸 아니솔, 메시틸렌, 테트라린, 베라트올, THF, 메틸-THF, THP, 클로로벤젠, 디옥산 또는 이들 용매의 혼합물이다.

따라서, 나아가 본 발명은 본 발명에 따른 하나 이상의 화합물 또는 혼합물 및 하나 이상의 용매, 특히 유기 용매를 포함하는 제형물, 특히 용액, 현탁물 또는 미니-에멀전에 관한 것이다. 상기 유형의 용액이 제조될 수 있는 방식은 당업자에게 공지되어 있고, 예를 들어, WO 2002/072714, WO 2003/019694 및 본원에 인용된 문헌에 기재되어 있다.

본 발명에 따른 화합물 및 혼합물은 전자 소자에 사용하기에 적합하다. 여기서, 전자 소자는 하나 이상의 유기 화합물을 포함하는 하나 이상의 층을 포함하는 소자를 의미한다. 그러나, 여기서 부품은 무기 재료 또는 또한 전적으로 무기 재료로부터 형성된 층을 또한 포함할 수 있다.

그러므로, 나아가 본 발명은 전자 소자, 특히 유기 전계발광 소자에 있어서의, 본 발명에 따른 화합물 또는 혼합물의 용도에 관한 것이다.

나아가, 다시 본 발명은 상기 언급된 본 발명에 따른 화합물 또는 혼합물 중 하나 이상을 포함하는 전자 소자에 관한 것이다. 화합물에 대해 상기 언급된 바람직한 것들이 또한 전자 소자에 적용된다.

전자 소자는 바람직하게는 유기 전계발광 소자 (OLED, PLED), 유기 집적 회로 (O-IC), 유기 전계-효과 트랜지스터 (O-FET), 유기 박막 트랜지스터 (O-TFT), 유기 발광 트랜지스터 (O-LET), 유기 태양 전지 (O-SC), 유기 염

료-감응형 태양 전지, 유기 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 전계-퀀치 (quench) 소자 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 "유기 플라스몬 발광 소자" (D. M. Koller *et al.*, *Nature Photonics* **2008**, 1-4), 바람직하게는 유기 전계발광 소자 (OLED, PLED), 특히 바람직하게는 인광 OLED로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0116] 유기 전계발광 소자는 캐소드, 애노드 및 하나 이상의 발광층을 포함한다. 이들 층 외에, 추가의 층, 예를 들어 각 경우에 하나 이상의 정공-주입층, 정공-수송층, 정공-차단층, 전자-수송층, 전자-주입층, 여기자-차단층, 전자-차단층 및/또는 전하-생성층을 또한 포함할 수 있다. 마찬가지로, 예를 들어 여기자-차단 기능을 갖는 중간층 (interlayer) 이 2 개의 발광층 사이에 도입되는 것이 가능하다. 그러나, 이들 층 각각이 반드시 존재할 필요는 없다는 점에 주목해야 한다. 여기서, 유기 전계발광 소자는 하나의 발광층 또는 복수의 발광층을 포함할 수 있다. 복수의 발광층이 존재하는 경우, 이들은 바람직하게는 전체로서 380 nm 와 750 nm 사이에 복수의 발광 최대치를 가져, 전체적으로 백색 발광을 유도하며, 즉 형광 또는 인광을 발할 수 있는 다양한 발광 화합물이 발광층에 사용된다. 3 개의 발광층을 갖는 시스템이 특히 바람직하며, 여기서 3 개의 층은 청색, 녹색 및 주황색 또는 적색 발광을 나타낸다 (기본 구조에 관해, 예를 들어 WO 2005/011013 참조). 이들은 형광 또는 인광 발광층이 서로 조합된 형광 또는 인광 발광층 또는 혼성 시스템일 수 있다.

[0117] 상기 지시된 구현예에 따른 본 발명에 따른 화합물은 정밀 구조에 따라 여러 층에 활용될 수 있다. 정밀 치환에 따라, 형광 또는 인광 발광체용, 특히 인광 발광체용 매트릭스 재료로서, 및/또는 전자-수송층 및/또는 전자-차단 또는 여기자 차단층 및/또는 정공-수송층에 본 발명에 따른 화합물 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 상기 지시된 바람직한 구현예에는 유기 전자 소자에 있어서 상기 재료의 용도에 또한 적용된다.

[0118] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 화합물 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물은 발광층에서 형광 또는 인광 화합물용, 특히 인광 화합물용 매트릭스 재료로서 활용된다. 여기서, 유기 전계발광 소자는 하나의 발광층 또는 복수의 발광층을 포함할 수 있으며, 여기서 하나 이상의 발광층은 매트릭스 재료로서 본 발명에 따른 하나 이상의 화합물을 포함한다.

[0119] 본 발명에 따른 화합물 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물이 발광층에서 발광 화합물용 매트릭스 재료로서 활용되는 경우, 바람직하게는 하나 이상의 인광 재료 (삼중항 발광체) 와의 조합으로 활용된다. 본 발명의 의미에서 인광은 스핀 다중도 > 1 의 여기된 상태로부터의, 특히 여기된 삼중항 상태로부터의 발광을 의미한다. 이러한 적용 목적을 위해, 모든 발광성 전이 금속 착물 및 발광성 란타네 착물, 특히 모든 이리듐, 백금 및 구리 착물이 인광 화합물로 여겨져야 한다.

[0120] 본 발명에 따른 화합물 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물 및 발광 화합물을 포함하는 혼합물은 발광체 및 매트릭스 재료를 포함하는 전체 혼합물에 기초하여 99 내지 1 부피%, 바람직하게는 98 내지 10 부피%, 특히 바람직하게는 97 내지 60 부피%, 특히 95 내지 80 부피% 의 본 발명에 따른 화합물 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물을 포함한다. 상응하게는, 혼합물은 발광체 및 매트릭스 재료를 포함하는 전체 혼합물에 기초하여 1 내지 99 부피%, 바람직하게는 2 내지 90 부피%, 특히 바람직하게는 3 내지 40 부피%, 특히 5 내지 20 부피% 의 발광체를 포함한다.

[0121] 본 발명의 추가의 바람직한 구현예는 추가의 매트릭스 재료와 조합된 인광 발광체용 매트릭스 재료로서의, 본 발명에 따른 화합물 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물의 용도이다. 본 발명에 따른 화합물 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물과 조합하여 활용될 수 있는 특히 적합한 매트릭스 재료는, 예를 들어 WO 2004/013080, WO 2004/093207, WO 2006/005627 또는 WO 2010/006680 에 따른 방향족 케톤, 방향족 포스핀 산화물 또는 방향족 술폰시드 또는 술폰, WO 2005/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527 또는 WO 2008/086851 에 개시된 트리아릴아민, 카르바졸 유도체, 예를 들어 CBP (N,N-비스카르바졸릴바이페닐) 또는 카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따른 인돌로카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 2010/136109 및 WO 2011/000455 에 따른 인테노카르바졸 유도체, 예를 들어 EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160 에 따른 아자카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 2007/137725 에 따른 양극성 매트릭스 재료, 예를 들어 WO 2005/111172 에 따른 실란, 예를 들어 WO 2006/117052 에 따른 아자보롤 또는 보론산 에스테르, 예를 들어 WO 2010/015306, WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따른 트리아진 유도체, 예를 들어 EP 652273 또는 WO 2009/062578 에 따른 아연 착물, 예를 들어 WO 2010/054729 에 따른 디아자실물 또는 테트라아자실물 유도체, 예를 들어 WO 2010/054730 에 따른 디아자포스폴 유도체, 예를 들어 US 2009/0136779, WO 2010/050778, WO 2011/042107, WO 2011/088877 에 따른 트리페닐렌 유도체이다. 실제 발광체보다 짧은 파

장에서 발광하는 추가의 인광 발광체는 마찬가지로 공동-호스트로서 혼합물에 존재할 수 있다.

- [0122] 적합한 인광 화합물 (= 삼중항 발광체)은 특히 적합한 여기상태에서 바람직하게는 가시 영역에서 발광하고, 추가로 20 초과, 바람직하게는 38 초과 84 미만, 특히 바람직하게는 56 초과 80 미만의 원자 번호를 갖는 하나 이상의 원자, 특히 상기 원자 번호를 갖는 금속을 포함하는 화합물이다. 사용되는 인광 발광체는 바람직하게는 구리, 몰리브덴, 텅스텐, 레늄, 루테튬, 오스뮴, 로듐, 이리듐, 팔라듐, 백금, 은, 금 또는 유로퓸을 포함하는 화합물, 특히 이리듐 또는 백금을 포함하는 화합물이다. 본 발명의 목적을 위해서, 상기 언급된 금속을 포함하는 모든 발광 화합물은 인광 화합물로서 간주된다.
- [0123] 상기 기재된 발광체의 예는 출원 WO 00/70655, WO 2001/41512, WO 2002/02714, WO 2002/15645, EP 1191613, EP 1191612, EP 1191614, WO 05/033244, WO 05/019373, US 2005/0258742, WO 2009/146770, WO 2010/015307, WO 2010/031485, WO 2010/054731, WO 2010/054728, WO 2010/086089, WO 2010/099852, WO 2010/102709, WO 2011/032626, WO 2011/066898, WO 2011/157339 및 WO 2012/007086 에 의해 공개되어 있다. 일반적으로, 모든 인광 착물은 인광 OLED 에 대한 선행 기술에 따라 사용되고, 유기 전계발광 분야의 당업자에 공지된 바와 같이 적합하고, 그 당업자는 진보적 단계 없이 추가의 인광 착물을 사용할 수 있을 것이다.
- [0124] 본 발명의 추가의 구현예에서, 예를 들어 WO 2005/053051 에 기재된 바와 같이, 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자는 별도의 정공-주입층 및/또는 정공-수송층 및/또는 정공-차단층 및/또는 전자-수송층을 포함하지 않으며, 즉 발광층은 정공-주입층 또는 애노드에 바로 인접해 있고/있거나, 발광층은 전자-수송층 또는 전자-주입층 또는 캐소드에 바로 인접해 있다. 나아가, 예를 들어 WO 2009/030981 에 기재된 바와 같이, 발광층에서 금속 착물과 동일 또는 유사한 금속 착물을 발광층에 바로 인접한 정공-수송 또는 정공-주입 재료로서 사용하는 것이 가능하다.
- [0125] 본 발명의 바람직한 추가 구현예에서, 본 발명에 따른 화합물은 정공-수송 층 또는 정공-주입 층에서 정공-수송 재료 또는 정공-주입 재료로서 사용된다. 방출 층은 형광 또는 인광일 수 있다. 본 발명의 의미 내에서 정공-주입 층은 애노드에 직접 인접한 층이다. 본 발명의 의미 내에서 정공-수송 층은 정공-주입 층과 방출 층 사이에 위치한 층이다.
- [0126] 본 발명의 추가 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 화합물은 여기-차단 층으로 사용된다. 여기-차단 층은 애노드 측면 상에 방출 층에 직접 인접한 층을 의미하는 것으로 한다.
- [0127] 본 발명에 따른 화합물이 정공 수송 재료 또는 정공 주입 재료로 사용되는 경우, 종래 기술에 적합한 것으로 통상 사용되는 모든 도판트로 도핑될 수 있다. 적합한 도판트는 전자 수용체 화합물, 예를 들어, F₄-TCNQ (테트라플루오로테트라시아노퀴노디메탄) 또는 EP 1476881 또는 EP 1596445 에 기재된 화합물이다.
- [0128] 본 발명의 실시형태에서, 본 발명에 따른 화합물은 헥사아자트리페닐렌 유도체, 특히, 헥사시아노헥사아자트리페닐렌 (예를 들어, EP 1175470 에 의함) 을 포함하는 층과 조합하여 정공 수송층 또는 정공 주입층에 사용된다. 즉, 예를 들어, 다음과 같은 조합이 바람직하다: 애노드 - 헥사아자트리페닐렌 유도체 - 정공 수송층, 여기서 정공 수송층은 본 발명에 따른 하나 이상의 화합물을 포함한다. 마찬가지로, 이 구조에서 복수의 연속되는 정공 수송층을 사용하는 것이 가능하며, 적어도 1층의 정공 수송층은 본 발명에 따른 적어도 1종의 화합물을 포함한다. 다른 바람직한 조합은 다음과 같다: 애노드 - 정공 수송층 - 헥사아자트리페닐렌 유도체 - 정공 수송층, 여기서 2층의 정공 수송층 중 적어도 1층은 본 발명에 따른 1종 이상의 화합물을 포함한다. 마찬가지로, 이 구조에서 1층의 정공 수송층 대신에 복수의 연속되는 정공 수송층을 사용하는 것이 가능하며, 적어도 1층의 정공 수송층은 본 발명에 따른 적어도 1종의 화합물을 포함한다.
- [0129] 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자의 추가 층에서, 종래 기술에 따라 통상 사용되는 바와 같은 모든 물질을 사용하는 것이 가능하다. 따라서, 당업자는 창의적 단계 없이 본 발명에 따른 화합물과 조합하여 유기 전계발광 소자에 공지되어 있는 모든 물질을 사용할 수 있다.
- [0130] 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자는 하나 이상의 층이 승화 공정에 의해 코팅되는 것을 특징으로 하는데, 여기서 물질은 10⁻⁵ mbar 미만, 바람직하게는 10⁻⁶ mbar 미만의 초기 압력에서 진공 승화 장치에서 증착에 의해 적용된다. 그러나, 여기서 또한 초기 압력이, 예를 들어 10⁻⁷ mbar 미만으로 훨씬 더 낮을 수 있다.
- [0131] 마찬가지로, 1층 이상의 층들이 OVPD (유기 기상 증착) 공정에 의해 또는 캐리어 가스 승화의 도움으로 도포되

는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 디바이스가 바람직하고, 여기서 재료들은 10^{-5} mbar ~ 1 bar 의 압력에서 도포된다. 이 공정의 특별한 케이스는 OVJP (Organic Vapour Jet Printing) 공정이며, 여기서 재료들은 노즐에 의해 직접 도포되고 이로써 구조화된다 (예를 들어, M. S. Arnold 등, *Appl. Phys. Lett.* **2008**, 92, 053301).

1층 이상의 층들이 용액으로부터, 예를 들어, 스핀 코팅에 의해, 또는 임의의 원하는 인쇄 공정, 예를 들어, 스크린 프린팅, 플렉소그래픽 프린팅, 오프셋 프린팅, LITI (Light Induced Thermal Imaging), 열 전사 프린팅), 잉크젯 프린팅 또는 노즐 프린팅에 의해 제조되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 디바이스가 더욱 바람직하다. 이를 위해 적합한 치환을 통해 수득되는 가용성 화합물이 요구된다. 이들 공정은 또한 올리고머, 덴드리머 및 중합체에 대해 특히 적합하다.

예를 들어, 하나 이상의 층이 용액으로부터 적용되고, 하나 이상의 추가의 층이 증착에 의해 적용되는, 혼성 공정이 또한 가능하다. 따라서, 예를 들어 용액으로부터 발광층을 적용하고 증착에 의해 전자-수송층을 적용하는 것이 가능하다.

이들 공정은 일반적으로 당업자에게 공지되어 있고, 당업자에 의해 창의적 단계 없이 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자에 적용될 수 있다.

본 발명에 따른 화합물 및 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자는 하나 이상의 하기 놀라운 이점들에 의해 선행 기술과 구별된다:

1. 형광 또는 인광 발광체용 매트릭스 재료로서 활용되는 본 발명에 따른 화합물은 매우 높은 효율 및/또는 긴 수명을 유도한다. 이는 특히 화합물이 인광 발광체용 매트릭스 재료로서 활용되는 경우에 적용된다.

2. 본 발명에 따른 화합물은 높은 열적 안정성을 갖는다.

3. 유기 전계발광 소자에 활용되는 본 발명에 따른 화합물은 고효율 및 낮은 사용 전압과 함께 급격한 전류/전압 곡선을 유도한다.

4. 정공-수송 재료로서 사용시, 본 발명에 따른 화합물은 유기 전계발광 소자의 효율, 수명 및 작동 전압에 대해 양호한 특성을 나타낸다.

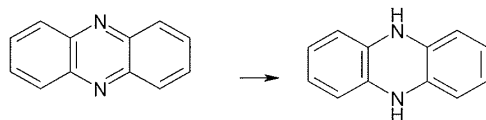
이들 상기 언급된 이점들은 다른 전자 특성의 장애와 동반되지 않는다.

본 발명은 이하의 실시예에 의해 더 상세히 설명되지만, 이에 의해 제한되는 것은 아니다. 당업자는 설명으로부터 개시된 범위를 통해 본 발명을 실시하고, 진보적 단계 없이 본 발명에 따른 추가의 착물을 제조하고, 이를 전자 소자에 사용하거나, 또는 본 발명에 따른 방법을 사용할 수 있을 것이다.

실시예:

하기 합성을, 달리 지시되지 않는 한, 보호-기체 분위기 하에 건조 용매 중에 수행한다. 용매 및 시약을 Sigma-ALDRICH 또는 ABCR로부터 구입할 수 있다. 사용되는 출발 물질은 예를 들어 페나진일 수 있다. 각 경우에 꺾쇠괄호 내 수치는 문헌으로부터 공지된 출발 재료의 CAS 수를 나타낸다.

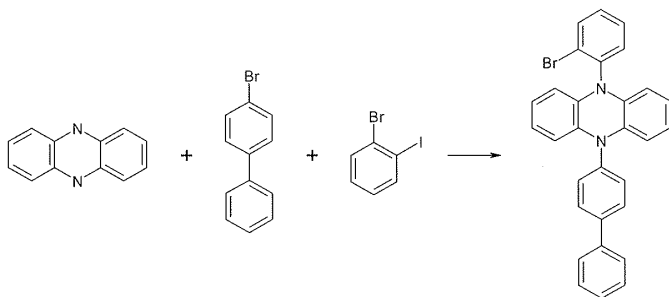
실시예 1: 5,10-디히드로페나진



20 g (110 mmol)의 페나진을 600 ml의 에탄올 중에서 보호성 기체 하에서 현탁하였다. 반응 혼합물을 환류 하에 가열하였다. 600 ml의 탈기된 물에 용해된 38.3 g (220 mmol)의 나트륨디티오나이트를 이어서 적가하고, 혼합물을 환류 하에 추가 4 시간 동안 가열시켰다. 냉각 후, 침전된 황색 고체를 보호성 기체 하에서 여과시키고 진공 하 건조시켰다. 순도: 92.0%. 수율: 19 g (107 mmol) 이론치의 96%.

[0147]

실시예 2: 5-바이페닐-4-일-10-(2-브로모페닐)-5,10-디히드로-페나진



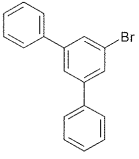
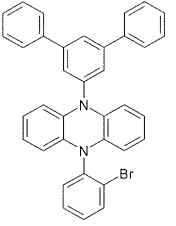
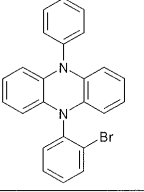
[0148]

[0149]

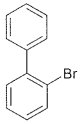
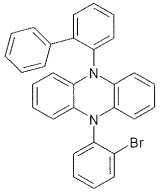
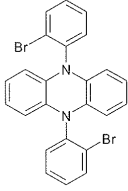
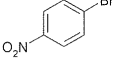
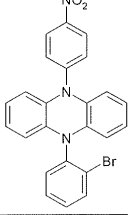
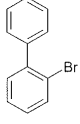
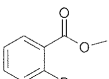
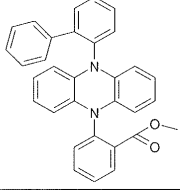
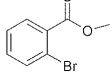
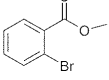
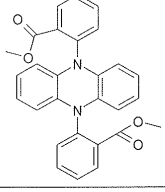
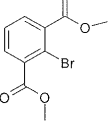
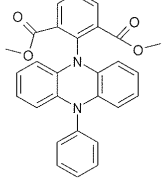
15.8 g (87.8 mmol) 의 9,10-디히드로페나진, 20 g (87 mmol) 의 4-브로모-바이페닐 및 0.8 g (0.88 mmol) 의 트리스(디벤질리텐-아세톤)-디팔라듐, 1.79 g (7.9 mmol) 의 팔라듐-아세테이트를 보호성 기체 하에서 500 ml 의 톨루엔 중에 현탁시켰다. 반응 혼합물을 환류 하에 8 시간 동안 가열시켰다. 24.8 g (87 mmol) 의 1-브로모-2-요오도벤젠을 이어서 첨가하고, 혼합물을 추가 8 시간 동안 환류 하에 가열시켰다. 냉각 후, 유기 상을 분리시키고, 각각 200 ml 의 물로 3회 세척하고 이어서 건조 증발시켰다. 톨루엔/헵탄 (1:2) 을 이용하여 실리카 겔 상에서 컬럼 크로마토그래피로 생성물을 정제하였다. 순도: 97.0%. 수율: 29 g (37 mmol) 이론치의 70%.

[0150]

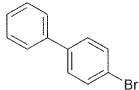
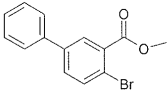
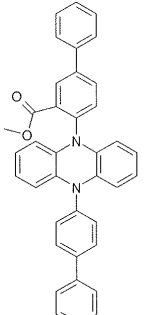
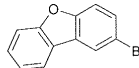
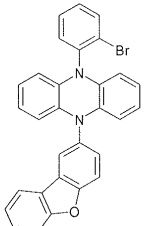
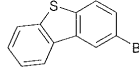
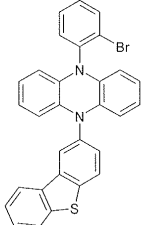
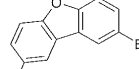
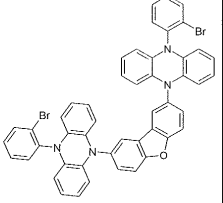
화합물 2a -2m 를 유사하게 수득하였다:

실시예	출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
2a	 [103068-20-8]			65%
2b				66%

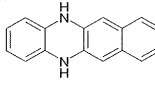
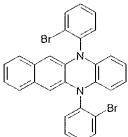
[0151]

2c	 [2052-07-5]			73%
2d				
2f	 [586-78-7]			75%
2g		 [610-94-6]		65%
2h				87%
2i				63%

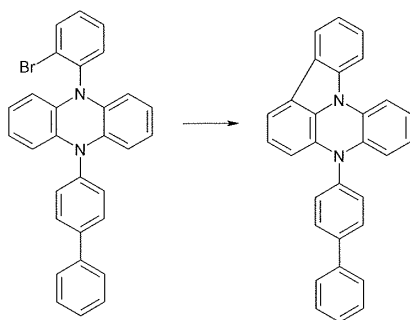
[0152]

2j		 [727408-92-6]		72%
2k	 [86-76-0]			67%
2l	 [22439-61-8]			69%
2m	 [10016-52-1]			63%

화합물 2n 를 유사하게 수득하였다:

실시예	출발 물질 1	출발 물질 2	출발 물질 3	생성물	수율
2n	 [19029-32-4]				69%

실시예 3: 8-바이페닐-4-일-8H-8,12b-디아자벤조[a]아세안트릴렌

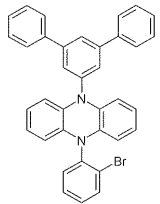
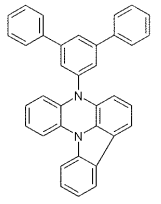
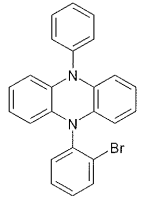
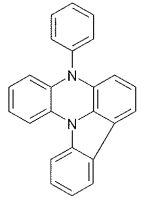


[0158]

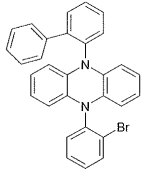
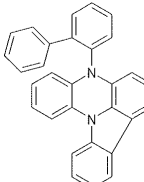
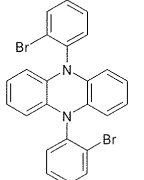
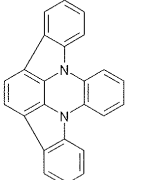
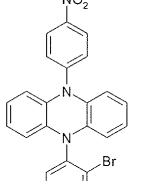
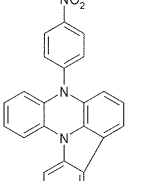
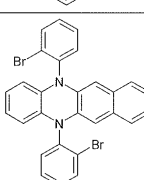
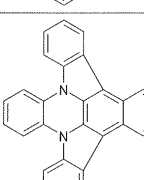
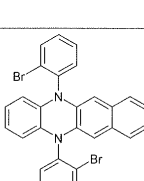
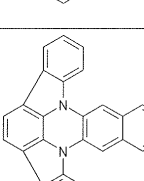
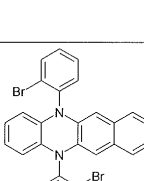
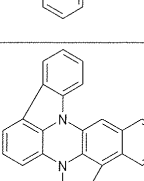
73 g (0.175 mmol) 의 5-바이페닐-4-일-10-(2-브로모페닐)-5,10-디히드로-페나진을 보호성 기체 하에서 500 ml 의 디메틸아세트아미드에 용해시켰다. 2.4 g (6.5 mmol) 의 트리시클로헥실포스핀-테트라-플루오로-보레이트 및 701 mg (3.1 mmol) 의 $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ 를 이러한 용액에 첨가하였다. 이어서, 혼합물을 120℃ 에서 9 시간 동안 교반하였다. 이후, 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고 디클로로메탄으로 추출하였다. 결합된 유기 상을 Na_2SO_4 상에서 건조시키고 증발시켰다. 잔사를 고온 톨루엔으로 추출하고, 톨루엔으로부터 재결정화 하고 최종적으로 고진공 하에서 승화시켰다. 수율: 49 g (121 mmol), 이론치의 81%.

[0159]

화합물 3a -3m 를 유사하게 수득하였다:

실시예	출발 물질 1	생성물	수율
3a			75%
3b			76%

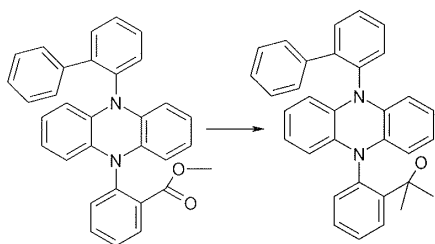
[0160]

3c			73%
3e			40%
3g			76%
3h			31%
3i			29%
3j			20%

[0161]

3k			71%
3l			69%
3m			72%

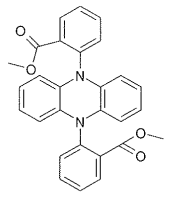
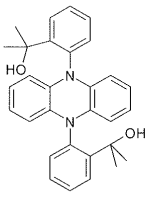
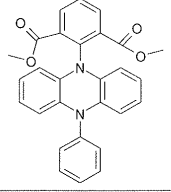
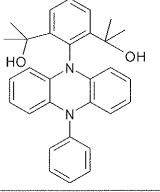
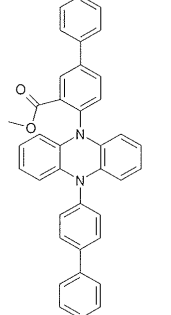
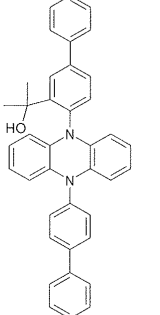
실시예 4: 2-[2-(10-바이페닐-2-일-10H-페나진-5-일)-페닐]-프로판-2-올



99 g (213 mmol)의 메틸 2-(10-바이페닐-2-일-10H-페나진-5-일)-벤조에이트를 1500 ml의 건조된 THF에 용해시키고 탈기시켰다. 혼합물을 -78°C 로 냉각시키고, 569 ml (854 mmol)의 메틸리튬을 40분에 걸쳐 첨가하였다. 혼합물을 1시간에 걸쳐 -40°C 로 가온시키고, 반응을 TLC로 모니터링하였다. 반응이 완료되었을 때, 혼합물을 -30°C 에서 MeOH를 이용하여 조심스럽게 킨칭하였다. 반응 용액을 증발시켜 이를 1/3로 만들고, 1 l의 CH_2Cl_2 를 첨가하고, 혼합물을 세척하고, 유기 상을 MgSO_4 상에서 건조시키고 증발시켰다. 수율: 90 g (194 mmol), 이론치의 90%.

[0166]

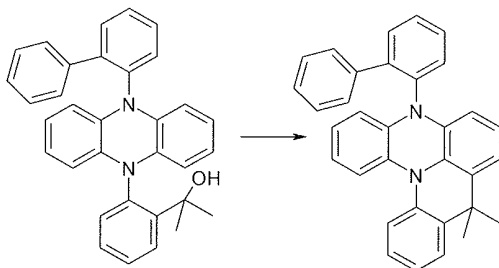
화합물 4a -4c 을 유사하게 수득하였다:

실시예	출발 물질 1	생성물	수율
4a			87%
4b			67%
4c			74%

[0167]

[0168]

실시예 5: 5-바이페닐-2-일-9,9-디메틸-5H,9H-5,13b-디아자-나프토-[3,2,1-de]안트라센



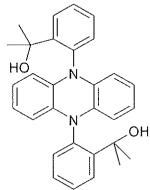
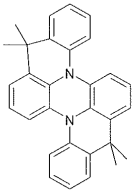
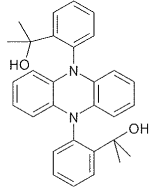
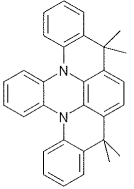
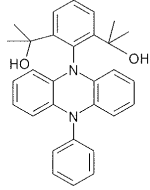
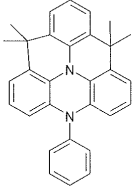
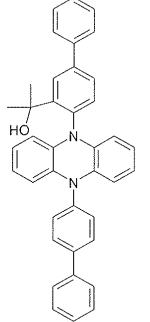
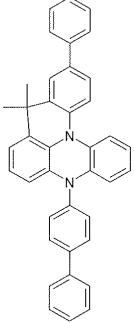
[0169]

[0170]

20 g (43.6 mmol) 의 2-[2-(10-바이페닐-2-일-10H-페나진-5-일)-페닐]-프로판-2-올을 1200 ml 의 탈기된 톨루엔에 용해시키고, 40 g 의 폴리인산 및 28 ml 의 메탄술폰산의 현탁액을 첨가하고, 혼합물을 60℃ 에서 1 시간 동안 가열시켰다. 배치를 냉각시키고, 물을 첨가하였다. 고체를 침전시키고, 이를 CH₂Cl₂/THF (1:1) 에 용해시켰다. 용액을 20% NaOH 를 이용하여 알칼리성으로 조심스럽게 만들고, 상은 분리시키고 MgSO₄ 상에서 건조시켰다. 잔사를 고온 톨루엔으로 추출하고, 톨루엔/헵탄 (1:2) 으로부터 재결정화하고 최종적으로 고진공 하에서 승화시켰다. 수율: 15.6 g (34 mmol), 이론치의 80%.

[0171]

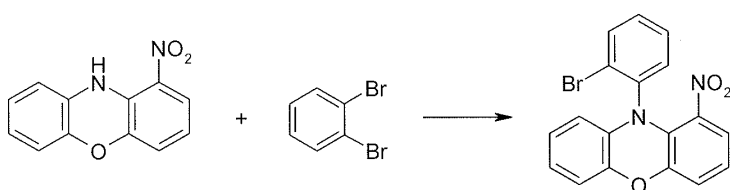
화합물 5a -5d 를 유사하게 수득하였다:

실시예	출발 물질 1	생성물	수율
5a			43%
5b			33%
5c			68%
5d			69%

[0172]

[0173]

실시예 6: 1-니트로-10-(2-브로모페닐)-10H-페녹사진

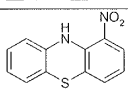
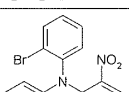
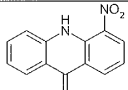
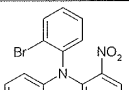


[0174]

[0175]

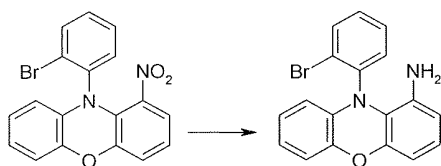
20 g (88 mmol) 의 1-니트로-10H-페녹사진 (CAS: 26103-27-5), 20 g (88 mmol) 의 1,2-디브로모벤젠, 0.8 g (0.88 mmol) 의 트리스(디벤질리덴-아세톤)디팔라듐 및 1.79 g (7.9 mmol) 의 팔라듐 아세테이트를 500 ml 의 톨루엔 중에서 보호성 기체 하에서 현탁하였다. 반응 혼합물을 환류 하에 8 시간 동안 가열시켰다. 냉각 후, 유기 상을 분리시키고, 200 ml 의 물로 3회 세척하고 이어서 건조 증발시켰다. 생성물을 톨루엔/헵탄 (1:2) 을 이용하여 실리카 겔 상에서 컬럼 크로마토그래피로 정제하였다. 순도: 97.0%. 수율: 19 g (49 mmol), 이론치의 78%.

[0176] 화합물 6a-6b 를 유사하게 수득하였다:

실시예	출발 물질 1	생성물	수율
6a	 [1747-87-1]		65%
6b	 [61-62-5]		68%

[0177]

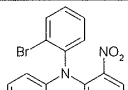
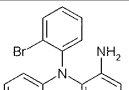
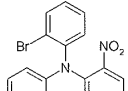
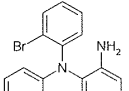
[0178] 실시예 7: 10-(2-브로모페닐)-10H-페녹사진-1-일아민



[0179]

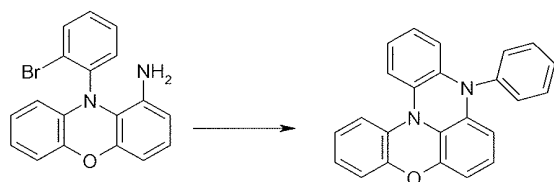
[0180] 14.5 g (42 mmol) 의 1-니트로-10-(2-브로모페닐)-10H-페녹사진을 200 ml 의 에탄올 중에서 현탁하였다. 25 ml 의 농축된 HCl 에 용해된 26 g (140 mmol) 의 SnCl₂ 를 교반하면서 60℃ 에서 일부씩 첨가하고, 혼합물을 환류 하에 8 시간 동안 가열시켰다. 이어서 침전물을 여과시키고 진공 하에 건조시켰다. 순도: 94%. 수율: 12 g (35 mmol), 이론치의 92%.

[0181] 화합물 7a-7b 를 유사하게 수득하였다:

실시예	출발 물질 1	생성물	수율
7a			89%
7b			81%

[0182]

[0183] 실시예 8: 9-페닐-9H-5-옥사-9,13b-디아자나프토[3,2,1-de]-안트라센

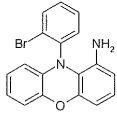
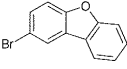
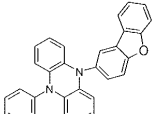
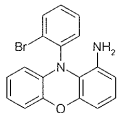
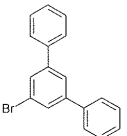
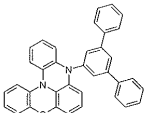
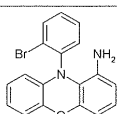
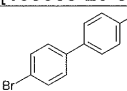
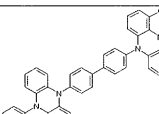
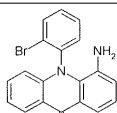
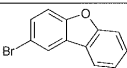
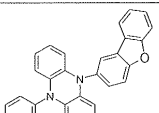
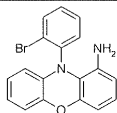
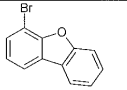
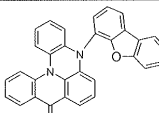


[0184]

[0185] 9.2 g (26.3 mmol) 의 9,10-디히드로페나진, 0.24 g (0.26 mmol) 의 트리스-(디벤질리덴아세톤)디팔라듐 및 0.53 g (2.37 mmol) 의 팔라듐-아세테이트 150 ml 의 톨루엔 중에서 보호성 기체 하에서 현탁하였다. 반응 혼합물을 환류 하에 8 시간 동안 가열시켰다. 4 g (26 mmol) 의 4-브로모-벤젠을 이어서 첨가하고, 혼합물을 추가 8 시간 동안 환류 하에 가열시켰다. 냉각 후, 유기 상을 분리시키고, 80 ml 의 물을 이용하여 3회 세척하고 이어서 건조 증발시켰다. 잔사를 고온 톨루엔으로 추출하고, 톨루엔/헵탄 (1:2) 으로부터 재결정화하고 최종적으로 고 진공 하에 승화시켰다. 순도: 97.0%. 수율: 5.6 g (16.3 mmol) 이론치의 63%.

[0186]

화합물 8a-8f 를 유사하게 수득하였다:

실시예	출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
8a				64%
8b		 [103068-20-8]		59%
8c				53%
8e				58%
8f		 [89827-45-2]		55%

[0187]

[0188]

실시예 9: OLED 의 제조

[0189]

WO 2004/058911 에 따른 일반적 방법을 본원에 기재된 상황 (층 두께 변화, 재료) 에 맞게 조정함으로써 본 발명에 따른 OLED 및 선행기술에 따른 OLED 를 제조한다.

[0190]

다양한 OLED 의 데이터가 하기 실시예 V1 내지 E17 에 제시되어 있다 (표 1 및 2 참조). 구조화된 ITO (인듐 주석 산화물) 로 50 nm 두께로 코팅된 유리판을 가공 개선을 위해 PEDOT:PSS (폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)폴리(스티렌술포네이트), Heraeus Precious Metals GmbH, Germany 로부터 CLEVIOS™ P VP AI 4083 로서 구입, 수용액으로부터 스핀 코팅에 의해 적용됨) 로 20 nm 로 코팅한다. 이들 코팅된 유리판은 OLED 가 적용되는 기판을 형성한다. OLED 는 이론상 하기 층 구조를 갖는다: 기판 / 임의적인 정공-주입 층 (HIL) / 정공-수송층 (HTL) / 임의적 중간층 (IL) / 전자-차단층 (EBL) / 발광층 (EML) / 임의의 정공-차단층 (HBL) / 전자-수송층 (ETL) / 임의의 전자-주입층 (EIL) 및 마지막으로 캐소드. 캐소드는 100 nm 두께의 알루미늄 층으로 형성된다. OLED 의 정밀 구조가 표 1 에 제시되어 있다. OLED 의 제조에 요구되는 재료가 표 3 에 제시되어 있다. 게다가, "3f" 와 같은 물질 참조사항은 이의 합성이 상기 나타낸 실시예 3f 에 기술되어 있음을 나타낸다. 이는 본 발명에 따른 다른 화합물에도 유사하게 적용된다.

[0191]

모든 재료를 진공 챔버 내에서 열 증착에 의해 적용한다. 여기서, 발광층은 항상 하나 이상의 매트릭스 재료 (호스트 재료), 및 동시-증발에 의해 매트릭스 재료 또는 재료들과 특정 부피비로 부가혼합되는 발광 도펀트 (발광체) 로 이루어진다. 여기서, IC1:3k:TEG1 (70%:25%:5%) 와 같은 표현은, 재료 IC1 이 부피비 70% 로 층에 존재하고, 실시예 3k 의 물질이 25% 의 비로 층에 존재하고, TEG1 이 15% 의 비로 층에 존재함을 의미한다. 유사하게, 전자-수송층도 2 개의 재료의 혼합물로 이루어질 수 있다.

[0192]

OLED 는 표준 방법에 의해 특징지어진다. 이 목적을 위해, 람베르트 (Lambert) 발광 특성을 추정하는, 전류/전압/발광 밀도 특성 선 (IUL 특성 선) 으로부터 산출되는, 발광 밀도의 함수로서 전계발광 스펙트럼, 전류 효율 (cd/A 로 측정됨), 전력 효율 (lm/W 로 측정됨) 및 외부 양자 효율 (EQE, % 로 측정됨) 을 측정한다. 전계발광 스펙트럼은 발광 밀도 1000 cd/m² 에서 측정되고, 이로부터 CIE 1931 x 및 y 색 좌표가 산출된다. 표 2 에서 표현 U1000 은 1000 cd/m² 의 발광 밀도에 필요한 전압을 나타낸다. CE1000 및 PE1000 은 1000

cd/m^2 에서 달성되는 전류 및 전력 효율을 나타낸다. 마지막으로, EQE1000 은 1000 cd/m^2 의 작동 발광 밀도에서의 외부 양자 효율을 나타낸다.

[0193] 다양한 OLED 의 데이터가 표 2 에 요약되어 있다. 실시예 V1-V3 은 종래 기술에 따른 비교예이며, 실시예 E1-E17 는 본 발명에 따른 물질층을 포함하는 OLED 의 데이터를 나타낸다.

[0194] 일부 예가 본 발명에 따른 화합물의 이점을 예시하는데 있어서 하기에 더 상세히 설명되어 있다. 그러나, 이는 표 2 에 나타난 데이터의 선택만을 나타낸다는 점에서 주목해야 한다.

[0195] **정공-수송 재료로서 본 발명에 따른 화합물의 용도**

[0196] 녹색 도판트 TEG1 를 포함하는 OLED 에서 정공-수송 물질로서, 본 발명에 따른 화합물 3f 가 종래 기술에 따른 유사한 화합물 H3 대신 사용되는 경우, 실제로 20% 더욱 양호한 전력 효율이 달성된다 (실시예 V1 및 E5).

[0197] **인광 OLED 에서의, 매트릭스 재료로서의 본 발명에 따른 화합물의 용도**

[0198] 인광 녹색 도판트를 포함하는 OLED 에서 매트릭스 (호스트) 로서 2개의 재료가 사용되는 경우, 단일 재료의 사용시보다 더욱 양호한 성능의 데이터가 빈번히 수득되며, 이것이 본원의 관심 재료가 주목받는 이유이다. 특히, 치환기로서 황- 또는 산소-함유 헤테로방향족 고리계를 함유하는 본 발명에 따른 재료는 종래 기술에 따른 트리아진-함유 재료에 비해 더욱 양호한 양자 및 전력 효율이 수득된다는 점에서 구분된다 (실시예 V2, V3, E6, E7 및 E8). 게다가, 수명이 현저히 개선된다. 일정한 전류 밀도에서 작업시 실시예 V2 및 V3 에 대해 각각 160 h 및 180 h 내에서 10000 cd/m^2 의 이의 초기 값으로부터 70% 로 광 밀도가 떨어지는 반면, 실시예 E6, E7 및 E8 에서는 각각 300 h, 245 h 및 230 h 이 걸린다.

[0199] 표 1: OLED 의 구조

실시예	HIL 두께	HTL 두께	IL 두께	EBL 두께	EML 두께	HBL 두께	ETL 두께	EIL 두께
V1	---	SpA1 70nm	HATCN 5nm	H3 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
V2	---	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:H1:TEG1 (70%:25%:5%) 30nm	IC1 10nm	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	---
V3	---	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:H2:TEG1 (70%:25%:5%) 30nm	IC1 10nm	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E1	---	SpA1 90nm	HATCN 5nm	SpMA1 130nm	IC5:3c:TER1 (43%:50%:7%) 40nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---

[0200]

E2	---	SpA1 90nm	HATCN 5nm	SpMA1 130nm	IC5:3i:TER1 (33%:60%:7%) 40nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E3	---	SpA1 90nm	HATCN 5nm	SpMA1 130nm	IC5:5:TER1 (43%:50%:7%) 40nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E4	---	SpA1 90nm	HATCN 5nm	SpMA1 130nm	IC5:5d:TER1 (53%:40%:7%) 40nm	IC1 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E5	---	SpA1 70nm	HATCN 5nm	3m 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E6	---	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:3k:TEG1 (70%:25%:5%) 30nm	IC1 10nm	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E7	---	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:3i:TEG1 (70%:25%:5%) 30nm	IC1 10nm	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E8	---	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:3m:TEG1 (70%:25%:5%) 30nm	IC1 10nm	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E9	HATCN 5nm	3a 140nm	HATCN 5nm	SpMA1 20nm	M2:D1 (95%:5%) 20nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E10	HATCN 5nm	5a 140nm	HATCN 5nm	SpMA1 20nm	M2:D1 (95%:5%) 20nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E11	---	5c 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E12	HATCN 5nm	8a 140nm	HATCN 5nm	SpMA1 20nm	M2:D1 (95%:5%) 20nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E13	HATCN 5nm	8b 140nm	HATCN 5nm	SpMA1 20nm	M2:D1 (95%:5%) 20nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E14	HATCN 5nm	8c 140nm	HATCN 5nm	SpMA1 20nm	M2:D1 (95%:5%) 20nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E15	HATCN 5nm	8d 140nm	HATCN 5nm	SpMA1 20nm	M2:D1 (95%:5%) 20nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E16	---	8b 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---

[0201]

[0202]

표 2: OLED 의 데이터

실시예	U1000 (V)	CE1000 (cd/A)	PE1000 (lm/W)	EQE 1000	CIE x/y (1000 cd/m ² 에서)
V1	3.7	55	47	15.3%	0.33/0.62
V2	3.7	53	45	14.8%	0.33/0.62
V3	3.8	45	37	12.7%	0.32/0.61
E1	4.7	10.8	7.2	11.7%	0.67/0.33
E2	5.1	11.7	7.2	12.6%	0.67/0.33
E3	4.9	10.4	6.7	11.3%	0.67/0.33
E4	4.7	10.0	6.7	10.8%	0.67/0.33
E5	3.4	59	55	16.5%	0.33/0.62
E6	3.9	57	46	15.8%	0.33/0.62

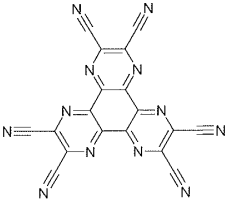
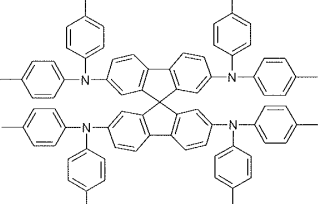
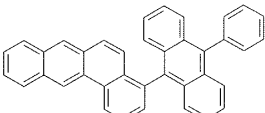
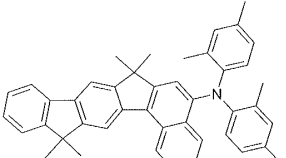
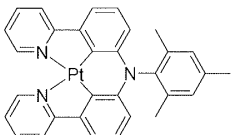
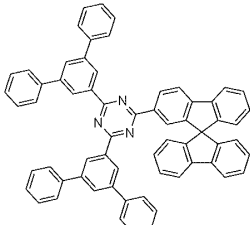
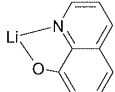
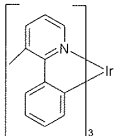
[0203]

E7	3.5	60	53	16.7%	0.33/0.62
E8	3.6	56	49	16.0%	0.31/0.61
E9	4.3	9.5	6.9	7.4%	0.14/0.15
E10	4.4	10.2	7.2	7.8%	0.14/0.16
E11	3.6	57	51	16.1%	0.32/0.62
E12	4.5	10.1	7.1	7.8%	0.14/0.16
E13	4.1	9.1	6.9	7.0%	0.14/0.16
E14	4.2	10.5	7.8	8.1%	0.14/0.16
E15	4.3	9.5	7.0	7.3%	0.14/0.16
E16	3.5	58	52	15.8%	0.33/0.62

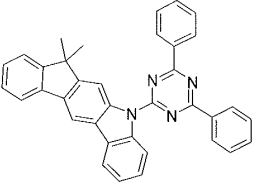
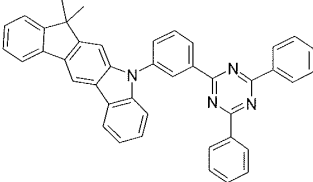
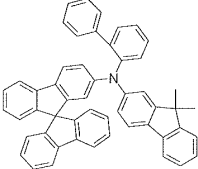
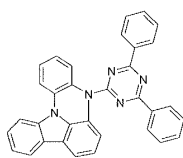
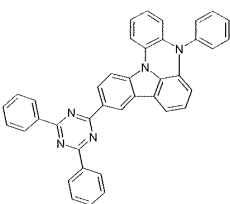
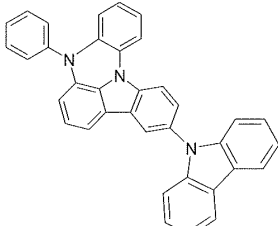
[0204]

[0205]

표 3: OLED 용 재료의 화학 구조

	
HATCN	SpA1
	
M2	D1
	
TER1	ST1
	
LiQ	TEG1

[0206]

	
IC1	IC5
	
SpMA1	H1 (prior art)
	
H2 (prior art)	H3 (prior art)

[0207]

专利名称(译)	用于有机电致发光器件的材料		
公开(公告)号	KR1020150036529A	公开(公告)日	2015-04-07
申请号	KR1020157003585	申请日	2013-06-12
申请(专利权)人(译)	默克比肩10吨geem BEHA		
当前申请(专利权)人(译)	默克比肩10吨geem BEHA		
[标]发明人	PARHAM AMIR HOSSAIN 파르함아미르호싸인 PFLUMM CHRISTOF 플룸크리슈토프 JATSCH ANJA 야치안야 EBERLE THOMAS 에베를레토마스 KROEBER JONAS VALENTIN 크뢰버요나스팔렌틴		
发明人	파르함아미르호싸인 플룸크리슈토프 야치안야 에베를레토마스 크뢰버요나스팔렌틴		
IPC分类号	C09K11/06 C07D519/00		
CPC分类号	C09K2211/1011 C07D513/16 C07D487/16 C09K2211/1092 C07D498/06 C09K2211/1037 C09K2211/1048 C09K2211/1051 C09K11/06 C09K2211/1033 C07D519/00 C07D487/06 C07D498/16 C07D513/06 C09K2211/1088 H05B33/20 C07D471/06 C09K2211/1044 C07D471/16 C09K2211/1074 H01L51/0071 H01L51/0072 H01L51/0074 H01L51/5012 H01L51/5016 H01L51/5056 H01L51/5088 H01L51/5096 H01L51/0073		
代理人(译)	韩国专利公司		
优先权	2012005099 2012-07-10 EP		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及根据式 (1) 和式 (2) 的化合物，所述化合物适用于电子器件，特别是有机电致发光器件。