



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2017년12월11일
(11) 등록번호 10-1807925
(24) 등록일자 2017년12월05일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) C07C 13/567 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
C07C 13/567 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2015-7004363
(22) 출원일자(국제) 2013년06월27일
심사청구일자 2016년06월17일
(85) 번역문제출일자 2015년02월17일
(65) 공개번호 10-2015-0036721
(43) 공개일자 2015년04월07일
(86) 국제출원번호 PCT/EP2013/001891
(87) 국제공개번호 WO 2014/015937
국제공개일자 2014년01월30일
(30) 우선권주장
12005369.9 2012년07월23일
유럽특허청(EPO)(EP)
(56) 선행기술조사문헌
JP05303221 A*
KR1020080077288 A*
KR1020120066076 A*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
메르크 파텐트 게엠베하
독일 64293 다름스타트 프랑크푸르터 스트라세 250
(72) 발명자
뮈히카-페르나우드 테레사
독일 64289 다름슈타트 구텐베르크슈트라세 41
몬테네그로 엘비라
독일 69469 바인하임 호라츠백 5
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인코리아나

전체 청구항 수 : 총 10 항

심사관 : 송이화

(54) 발명의 명칭 화합물 및 유기 전계 발광 디바이스

(57) 요약

본 발명은 소정 플루오렌, 전자 디바이스에서의 그 화합물의 사용, 및 이들 화합물들의 적어도 하나를 포함하는 전자 디바이스에 관한 것이다. 본 발명은 또한 그 화합물의 제조 방법 및 화합물들의 하나 이상을 포함하는 제제 및 조성물에 관한 것이다.

(52) CPC특허분류

H01L 51/50 (2013.01)

C09K 2211/1011 (2013.01)

(72) 발명자

파르함 아미르 호샤인

독일 65929 프랑크푸르트 암 마인 프란츠-헨레-슈
트라쎼 4

뷔징 아르네

독일 65929 프랑크푸르트 암 마인 그라스뮈켄백 26

포게스 프랑크

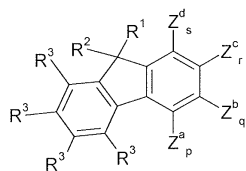
독일 67098 바트 뒤르크하임 바이트플라츠 2

명세서

청구범위

청구항 1

하기 일반식 (1) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스.



식 (1)

식중, 사용된 기호 및 지수에 하기가 적용된다:

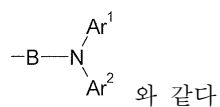
p, q, r, s 는

0 또는 1이고, 이 때 $p + q + r + s = 1$;

Z^a , Z^b , Z^c , Z^d 는

각 발생시에 동일하게 또는 상이하게 R^4 와 같다

Z^a , Z^b , Z^c , Z^d 는

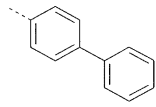


B 는

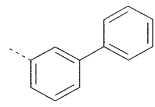
단일 결합, 6 내지 30 개의 고리 원자수를 갖는 2가 아릴 기 또는 5 내지 30 개의 고리 원자수를 갖는 2가 헤테로아릴기이며, 이들의 각각은 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고, 여기서, B 가 단일 결합이면, 질소 원자는 플루오렌에 직접 결합된다;

Ar¹, Ar² 는

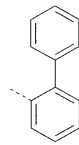
각 발생시에, 동일하게 또는 상이하게, 하기 식 (42) 내지 (107), (119) 내지 (121) 및 (123) 내지 (142) 의 기들로부터 선택되고,



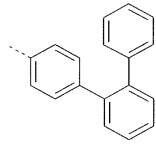
식 (42)



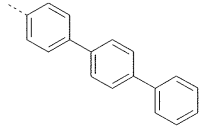
식 (43)



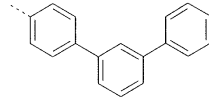
식 (44)



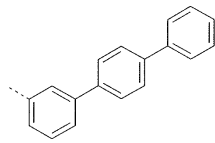
식 (45)



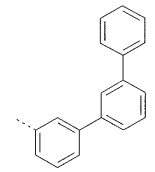
식 (46)



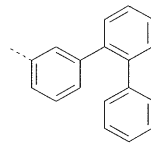
식 (47)



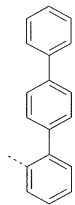
식 (48)



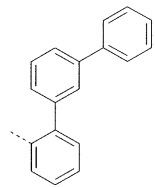
식 (49)



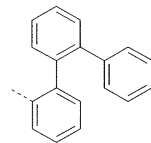
식 (50)



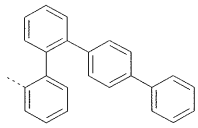
식 (51)



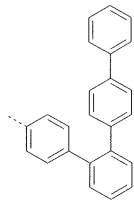
식 (52)



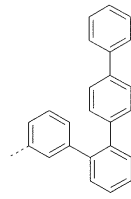
식 (53)



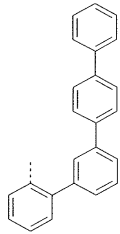
식 (54)



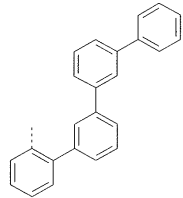
식 (55)



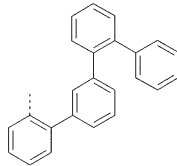
식 (56)



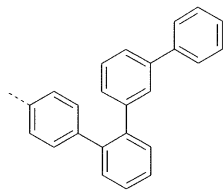
식 (57)



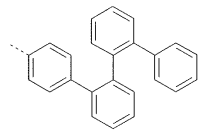
식 (58)



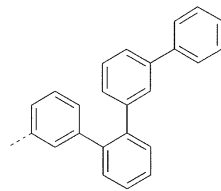
식 (59)



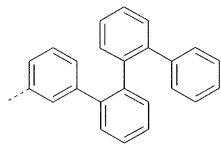
식 (60)



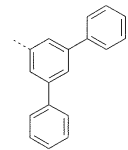
식 (61)



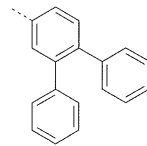
식 (62)



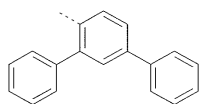
식 (63)



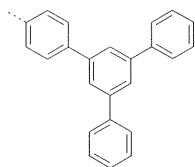
식 (64)



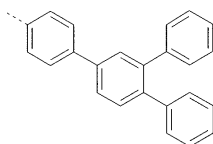
식 (65)



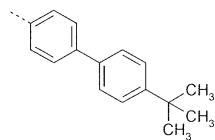
식 (66)



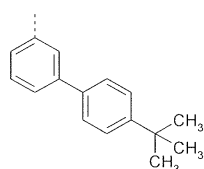
식 (67)



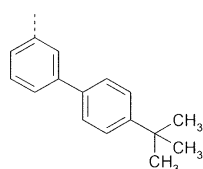
식 (68)



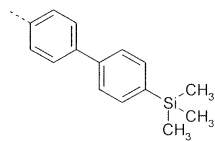
식 (69)



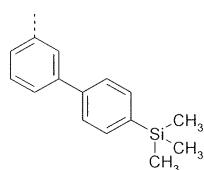
식 (70)



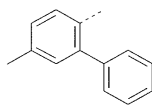
식 (71)



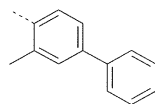
식 (72)



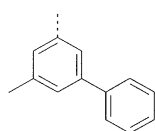
식 (73)



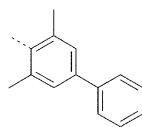
식 (74)



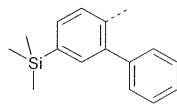
식 (75)



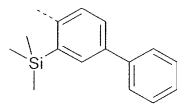
식 (76)



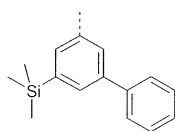
식 (77)



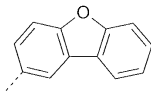
식 (78)



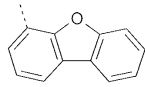
식 (79)



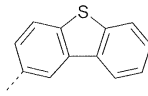
식 (80)



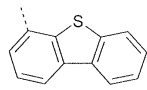
식 (81)



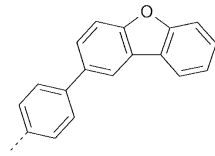
식 (82)



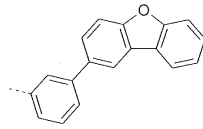
식 (83)



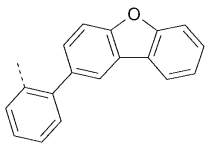
식 (84)



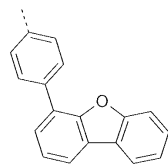
식 (85)



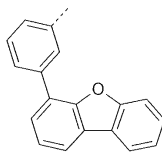
식 (86)



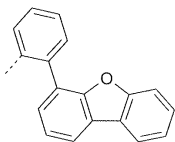
식 (87)



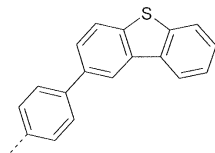
식 (88)



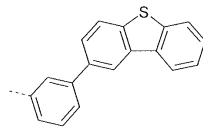
식 (89)



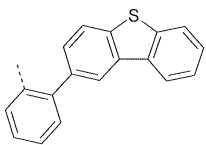
식 (90)



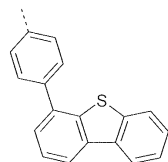
식 (91)



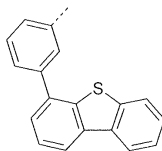
식 (92)



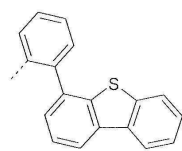
식 (93)



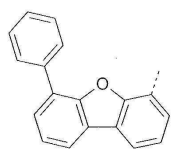
식 (94)



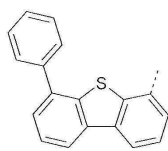
식 (95)



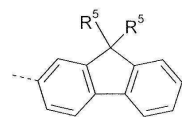
식 (96)



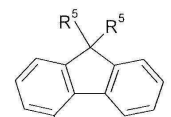
식 (97)



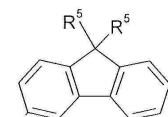
식 (98)



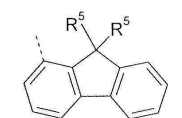
식 (99)



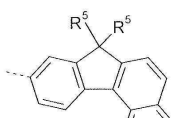
식 (100)



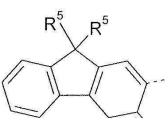
식 (101)



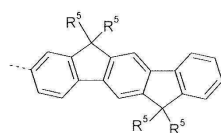
식 (102)



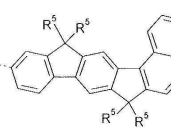
식 (103)



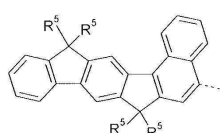
식 (104)



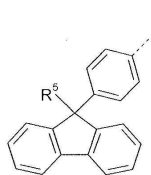
식 (105)



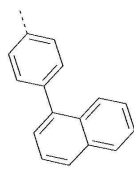
식 (106)



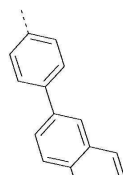
식 (107)



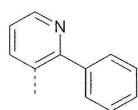
식 (119)



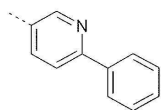
식 (120)



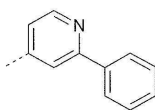
식 (121)



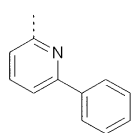
식 (123)



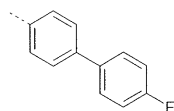
식 (124)



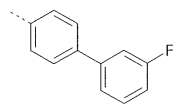
식 (125)



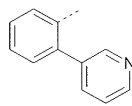
식 (126)



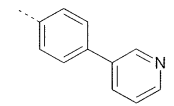
식 (127)



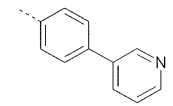
식 (128)



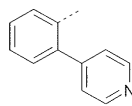
식 (129)



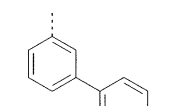
식 (130)



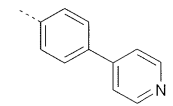
식 (131)



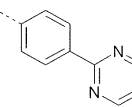
식 (132)



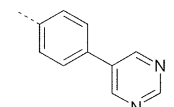
식 (133)



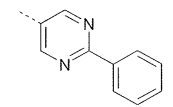
식 (134)



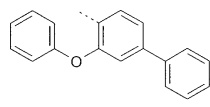
식 (135)



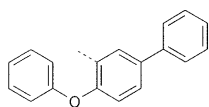
식 (136)



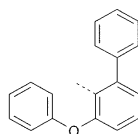
식 (137)



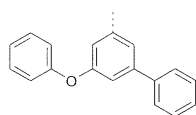
식 (138)



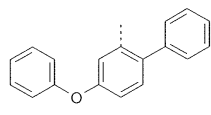
식 (139)



식 (140)



식 (141)



식 (142)

식중, 파선은 질소 원자에 대한 링크 위치를 나타낸다;

R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , 및 R^5 는

H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^6$, CN, $Si(R^6)_3$, NO_2 , $N(R^6)_2$, $P(=O)(R^6)_2$, $S(=O)R^6$, $S(=O)_2R^6$, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 2 내지 20 C 원자들을 갖는 알케닐 또는 알키닐 기로서, 이때 상기 기들은 각각 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고 상기 기들에서 하나 이상의 CH_2 기들은 $-R^6C=CR^6-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=NR^6$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^6-$, $P(=O)(R^6)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있고 상기 기들에서의 하나 이상의 H 원자들은 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수도 있는 것, 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자수를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로서, 각 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자수를 갖는 아릴록시 기로서, 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자수를 갖는 아릴 킬 기로서, 각 경우에, 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것이고, 여기서 상기 라디칼들 R^1 및 R^2 는 동일할 수 없고 상기 라디칼들 R^3 내지 R^5 는 각 발생시에 동일하거나 또는 상이할 수도 있지만, R^1 또는

R^2 중 하나에 동일할 수도 있다;

R^6 는

각 발생시에, 동일하게 또는 상이하게, H, D, F, Br, I, $C(=O)R^7$, CN, $Si(R^7)_3$, NO_2 , $P(=O)(R^7)_2$, $S(=O)R^7$, $S(=O)_2R^7$, $N(R^7)_2$, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 2 내지 20 C 원자들을 갖는 알케닐 또는 알키닐 기로서, 이때 상기 기들은 각각 하나 이상의 라디칼들 R^7 에 의해 치환될 수도 있고 상기 기들에서의 하나 이상의 CH_2 기들은 $-R^7C=CR^7-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^7)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=NR^7$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^7-$, $P(=O)(R^7)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있고 상기 기들에서의 하나 이상의 H 원자들은 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수도 있는 것, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자수를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로서, 각 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^7 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자수를 갖는 아릴록시 또는 헤테로아릴록시 기로서, 하나 이상의 라디칼들 R^7 에 의해 치환될 수도 있는 것이고, 여기서 2개 이상의 인접 치환기들 R^6 는 모노- 또는 폴리시클릭 고리 시스템을 서로 형성할 수도 있다;

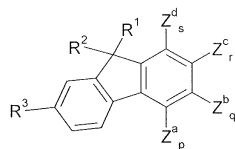
R^7 는

H, D, F, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 지방족 하이드로카본 라디칼 또는 5 내지 30 C 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어지는 군으로부터 선택되고, 여기서 하나 이상의 H 원자들이 D 또는 F 에 의해 대체될 수도 있고, 여기서 2개 이상의 인접 치환기들 R^7 은 모노- 또는 폴리시클릭 고리 시스템을 서로 형성할 수도 있다.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기 화합물은 하기 일반식 (2) 를 갖는 것을 특징으로 하는 전계 발광 디바이스.



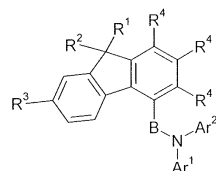
식 (2)

식중 표시된 기호 및 지수는 제 1 항에 표시된 대로 정의된다.

청구항 3

제 1 항에 있어서,

상기 화합물은 하기 일반식 (3) 을 갖는 것을 특징으로 하는 전계 발광 디바이스.



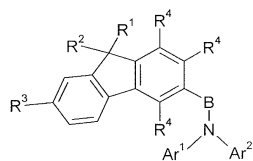
식 (3)

식중 표시된 기호 및 지수는 제 1 항에 표시된 대로 정의된다.

청구항 4

제 1 항에 있어서,

상기 화합물은 하기 일반식 (4) 를 갖는 것을 특징으로 하는 전계 발광 디바이스.



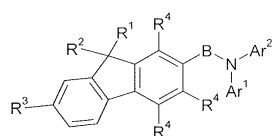
식 (4)

식중 표시된 기호 및 지수는 제 1 항에 표시된 대로 정의된다.

청구항 5

제 1 항에 있어서,

상기 화합물은 하기 일반식 (5) 를 갖는 것을 특징으로 하는 전계 발광 디바이스.



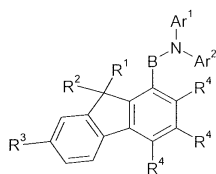
식 (5)

식중 표시된 기호 및 지수는 제 1 항에 표시된 대로 정의된다.

청구항 6

제 1 항에 있어서,

상기 화합물은 하기 일반식 (6) 를 갖는 것을 특징으로 하는 전계 발광 디바이스.



식 (6)

식중 표시된 기호 및 지수는 제 1 항에 표시된 대로 정의된다.

청구항 7

제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 있어서,

B 는 단일 결합 또는 페닐렌, 비페닐렌, 테르페닐렌, 나프틸렌, 피리디닐렌, 피리미디닐렌, 피라지닐렌, 피리다지닐렌, 트리아지닐렌, 디벤조푸라닐렌, 디벤조티오펜일렌, 플루오레닐렌, 또는 카르바조일렌 기이며, 이는 하나 이상의 라디칼들 R⁶ 에 의해 치환될 수도 있는 것을 특징으로 하는 전계 발광 디바이스.

청구항 8

삭제

청구항 9

제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 (1) 내지 (6) 의 화합물은 모노아민 화합물인 것을 특징으로 하는 전계 발광 디바이스.

청구항 10

제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 디바이스는 유기 발광 트랜지스터 (OLET), 유기 전계 켄치 디바이스 (OFQD), 유기 발광 전기화학 셀 (OLEC, LEC 또는 LEEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 유기 발광 다이오드 (OLED) 인 것을 특징으로 하는 전계 발광 디바이스.

청구항 11

제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 (1) 내지 (6) 의 적어도 하나의 화합물은 상기 디바이스에서 하기 층들에 그리고 하기 기능들로:

- 정공 수송 또는 정공 주입 층에서의 정공 수송 재료로서
- 여기자 차단 재료로서,
- 전자 차단 재료로서,
- 방출 층에서 매트릭스 재료로서,
- 방출 층에서 방출체로서

채용되는 것을 특징으로 하는 전계 발광 디바이스.

청구항 12

삭제

청구항 13

삭제

청구항 14

삭제

청구항 15

삭제

청구항 16

삭제

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 신규한 유기 화합물, 전계 발광 디바이스에서의 화합물의 사용, 및 이들 화합물들의 적어도 하나를 포함하는 전계 발광 디바이스에 관한 것이다. 본 발명은 또한 그 화합물들의 제조 방법 및 그 화합물들의 적어도 하나를 포함하는 조성물 및 제제들에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 전계 발광 디바이스들에서의 사용을 위한 기능성 화합물들의 개발은 현재 집중적인 연구의 대상이다. 여기서 목적은, 특히, 예를 들어, 전력 효율, 수명 또는 방출된 광의 색 좌표 (colour coordinate) 와 같은 하나 이상의 관련 포인트들에서의 전계 발광 디바이스들의 향상된 특성들이 달성될 수 있는 화합물들의 개발이다.

[0003] 용어 전계 발광 디바이스는 본 발명에 따르면, 특히, 유기 발광 트랜지스터 (OLET), 유기 전계 켄치 디바이스 (organic field-quench device; OFQD), 유기 발광 전기화학 셀 (OLEC, LEC 또는 LEEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 유기 전계 발광 디바이스 (OLED) 를 의미하는 것으로 받아들여진다.

[0004] OLED (유기 발광 다이오드) 로 칭해지는 마지막 언급된 전자 디바이스들에서의 사용을 위한 화합물들의 제공이

특히 흥미롭다. OLED 의 일반 구조 및 기능 원리는 당업자에게 알려져 있고 특히, US 4539507, US 5151629, EP 0676461 및 WO 1998/27136 에 설명되어 있다.

[0005] OLED 의 성능 데이터에 관하여, 특히, 예를 들어 디스플레이 디바이스들 또는 광원으로서의 폭넓은 상업적 이용의 견지에서, 여전히 추가적인 향상들이 필요하다. 이와 관련하여 달성되는 OLED 의 수명, 효율 및 동작 전압 및 색 값들이 특히 중요하다. 또한, 전자 디바이스들에서의 기능성 재료로서의 사용을 위해 화합물들은 높은 열 안정성 및 높은 유리 전이 온도를 갖고 분해 없이 승화가능한 (sublimable) 것이 바람직하다.

[0006] 이와 관련하여, 특히, 대안의 정공 수송 재료들이 필요하다. 종래 기술에 따른 정공 수송 재료들의 경우에, 정공 수송 층의 층 두께가 증가함에 따라 전압이 일반적으로 증가한다. 실제로, 정공 수송 층의 더 큰 층 두께가 자주 바람직하지만, 이는 종종 더 높은 동작 전압 및 더 나쁜 성능 데이터의 결과를 갖는다. 이와 관련하여, 높은 전하 캐리어 이동도를 갖고, 더 두꺼운 정공 수송 층들이 동작 전압에 있어서 약간의 증가만으로 달성되는 것을 가능하게 하는 신규한 정공 수송 재료들이 필요하다.

[0007] 종래 기술은, 전자 및 전계 발광 디바이스들에서 전하 수송 재료로서 다양한 플루오렌들의 사용을 설명한다.

[0008] 종래 기술에 설명된 화합물들은 일반적으로, 플루오렌의 위치 9 에서 비대칭적 치환을 갖는 화합물들이다.

[0009] JP 05303221 는, 위치 2 또는 4 에서 아민 기에 의해 치환될 수도 있는 플루오렌들을 개시한다. 플루오렌의 위치 4 에서 아민 기를 함유하는 화합물들은 페닐 라디칼들을 함유한다. 이들 화합물들 중 몇 개는 플루오렌의 위치 9 에서 비대칭적 치환을 나타낸다. 화합물들은 광수용체 (photoreceptor) 로서 채용된다.

[0010] 이미 알려져 있는 화합물들에도 불구하고, OLED 에서의 사용을 위한 신규한 정공 수송 및 정공 주입 재료들이 계속 필요하다. 특히, OLED 의 성능 데이터 및 특성들에 있어서 위에 언급된, 매우, 바라던 향상들이 달성될 수 있는 재료들이 필요하다.

[0011] 마찬가지로, OLED 및 다른 전자 디바이스들에서 사용을 위한 신규한 매트릭스 재료 (matrix material) 들이 필요하다. 특히, 바람직하게는 전자 디바이스들의 양호한 효율, 장수명 및 저동작 전압을 가져오는 혼합 매트릭스 시스템들을 위한 매트릭스 재료들 그리고 인광 도펀트들을 위한 매트릭스 재료들이 필요하다.

발명의 내용

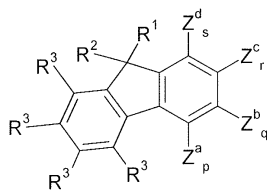
해결하려는 과제

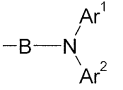
[0012] 따라서, 본 발명은 예를 들어, 형광 또는 인광 OLED 에서와 같이 전계 발광 디바이스들에서 사용에 적합하고, 특히, 방출 층에서 매트릭스 재료로서 또는 정공 수송 또는 여기자 차단 층에서 정공 주입 재료 및/또는 정공 수송 재료로서 채용될 수 있는, 전계 발광 디바이스들 및 화합물들을 제공하는 목적에 기초한다.

과제의 해결 수단

[0013] 본 발명의 과정에서, 놀랍게도 아래에 나타낸 식 (1) 의 화합물들이 전계 발광 디바이스들에서의 위에 언급된 사용에 극히 적합하다는 것을 알아냈다.

[0014] 따라서, 본 발명은, 식 (1) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스에 관한 것이다



- [0019] $Z_0^a, Z_0^b, Z_0^c, Z_0^d$ 는
- [0020] 각 발생시에 (on each occurrence) 동일하게 또는 상이하게 R^4 와 같다
- [0021] $Z_1^a, Z_1^b, Z_1^c, Z_1^d$ 는
- [0022]  와 같다
- [0023] B 는 단일 결합, 6 내지 30 고리 원자들을 갖는 2가 아릴 기 또는 5 내지 30 고리 원자들을 갖는 2가 헤테로아릴기이며, 이들의 각각은 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고,
- [0024] 바람직하게는 단일 결합 또는 페닐렌, 비페닐렌, 테르페닐렌, 나프틸렌, 피리디닐렌, 피리미디닐렌, 피라지닐렌, 피리다지닐렌, 트리아지닐렌, 디벤조푸라닐렌, 디벤조티오펜일렌 플루오레닐렌, 또는 카르바조일렌 기이며, 이는 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고,
- [0025] 매우 바람직하게는 단일 결합 또는 페닐렌, 비페닐렌, 테르페닐렌, 나프틸렌, 디벤조푸라닐렌 또는 디벤조티오펜일렌 플루오레닐렌, 또는 카르바조일렌 기이며, 이는 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고,
- [0026] B 는 아주 특히 바람직하게는 단일 결합 또는 페닐렌 기이며, 이는 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고,
- [0027] B 는 특히 바람직하게는 단일 결합이고,
- [0028] 이 때, B 가 단일 결합이면, 질소 원자가 플루오렌에 직접 결합된다;
- [0029] Ar^1, Ar^2 는
- [0030] 각 발생시에, 동일하게 또는 상이하게, 10 내지 60 고리 원자들을 갖는 아릴 기 또는 10 내지 60 고리 원자들을 갖는 헤테로아릴기이고, 이들은 하나 이상의 라디칼들 R^5 에 의해 치환될 수도 있고, 이들은 서로 동일하거나 또는 상이하고, 이 때 양쪽 모두의 기 Ar^1 또는 Ar^2 는 각각 적어도 2개 이상의 방향족 또는 헤테로방향족 고리들을 함유하고,
- [0031] Ar^1 에서의 방향족 또는 헤테로방향족 고리들 중 2개 및/또는 Ar^2 에서의 방향족 또는 헤테로방향족 고리들 중 2개가 축합될 수도 있는데, 그들은 바람직하게는 비축합 형태이고,
- [0032] Ar^1 에서의 방향족 또는 헤테로방향족 고리들 중 2개는 2가 기 $-O-$, $-S-$, $-Si(R^5)_2-$, $-C(R^5)_2-$ 또는 $-NR^5-$ 에 의해 브릿지 (bridge) 될 수도 있거나 또는 Ar^2 에서의 방향족 또는 헤테로방향족 고리들 중 2개는 2가 기 $-O-$, $-S-$, $-Si(R^5)_2-$, $-C(R^5)_2-$ 또는 $-NR^5-$ 에 의해 브릿지될 수도 있고, 여기서 브릿지되지 않은 고리들이 바람직하고,
- [0033] Ar^1 로부터의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 2가 기 $-O-$, $-S-$, $-Si(R^5)_2-$, $-NR^5-$ 또는 $-C(R^5)_2-$ 에 의해 Ar^2 로부터 방향족 또는 헤테로방향족 고리에 브릿지될 수도 있고, 여기서 브릿지되지 않은 기들 Ar^1 및 Ar^2 이 바람직하다;
- [0034] R^1, R^2, R^3, R^4 , 및 R^5 는
- [0035] H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^6$, CN, $Si(R^6)_3$, NO_2 , $N(R^6)_2$, $P(=O)-(R^6)_2$, $S(=O)R^6$, $S(=O)_2R^6$, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 2 내지 20 C 원자들을 갖는 알케닐 또는 알키닐 기, 여기서 전술된 기들은 각각

하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고 전술된 기들에서 하나 이상의 CH_2 기들은 $-R^6C=CR^6-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=NR^6$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^6-$, $P(=O)(R^6)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있고 전술된 기들에서의 하나 이상의 H 원자들은 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수도 있는 것, 또는 6 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 이들은 각 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 60 방향족 고리 원자들을 갖는 아릴록시 기, 이들은 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 60 방향족 고리 원자들을 갖는 아릴킬 기, 이들은 각 경우에, 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것이고, 이 때 라디칼들 R^1 및 R^2 는 동일할 수 없고 라디칼들 R^3 내지 R^5 는 각 발생시에 동일하거나 또는 상이할 수도 있지만, R^1 또는 R^2 중 하나와 동일할 수도 있다;

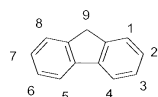
[0036] R^6 는 각 발생시에, 동일하게 또는 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^7$, CN, $Si(R^7)_3$, NO_2 , $P(=O)(R^7)_2$, $S(=O)R^7$, $S(=O)_2R^7$, $N(R^7)_2$, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 2 내지 20 C 원자들을 갖는 알케닐 또는 알킬닐 기이고, 여기서 전술된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼들 R^7 에 의해 치환될 수도 있고 전술된 기들에서의 하나 이상의 CH_2 기들은 $-R^7C=CR^7-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^7)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=NR^7$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^7-$, $P(=O)(R^7)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있고 전술된 기들에서의 하나 이상의 H 원자들은 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수도 있는 것, 또는 5 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 이들은 각 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^7 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 아릴록시 또는 헤테로아릴록시 기, 이들은 하나 이상의 라디칼들 R^7 에 의해 치환될 수도 있는 것이고, 이 때 2개 이상의 인접 치환기들 R^6 는 모노- 또는 폴리시클릭 고리 시스템을 서로 형성할 수도 있다;

[0037] R^7 는 H, D, F, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 지방족 하이드로카본 라디칼 또는 5 내지 30 C 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어지는 군으로부터 선택되고, 여기서 하나 이상의 H 원자들이 D 또는 F 에 의해 대체될 수도 있고, 이 때 2개 이상의 인접 치환기들 R^7 은 모노- 또는 폴리시클릭 고리 시스템을 서로 형성할 수도 있다.

[0038] 바람직한 실시형태에서, 식 (1) 의 화합물은 10 보다 많은 고리 원자들을 갖는 축합 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템들을 함유하지 않는다.

[0039] 플루오렌의 위치 9 에서의 비대칭적 치환은, 다른 위치들에서의 플루오렌의 알맞은 치환의 경우에, 카이랄(chiral) 분자를 생성한다. 본 발명에서, 거울상이성질체적으로 순수한 R 및 S 형태들 외에도 라세메이트(racemate) 가 또한 커버(cover) 된다. 그러므로, 본 발명에 따른 전계 발광 디바이스들은, R 또는 S 형태 또는 라세메이트로서, 바람직하게는 라세메이트로서 식 (1) 의 화합물 중 적어도 하나를 포함한다.

[0040] 플루오렌 상의 넘버링은 다음과 같이 정의된다.



[0041]

[0042] 본 발명의 의미에서 아릴 기는 6 내지 60 방향족 고리 시스템들을 함유하고; 본 발명의 의미에서 헤테로아릴 기는 5 내지 60 방향족 고리 시스템들을 함유하고, 이 중 적어도 하나는 헤테로 원자이다. 헤테로원자들은 바람직하게는 N, O 및 S 로부터 선택된다. 이것은 기본 정의를 나타낸다. 다른 선호들이 본 발명의 설명에서, 예를 들어 방향족 고리 원자들 또는 존재하는 헤테로원자들의 수에 관해 나타나 있으면, 이들이 적용된다.

- [0043] 여기에서 아릴 기 또는 헤테로아릴 기는, 단순 방향족 고리, 즉, 벤젠, 또는 단순 헤테로방향족 고리, 예를 들면 피리딘, 피리미딘, 또는 티오펜, 또는 축합 (아닐화 (annellated)) 방향족 또는 헤테로방향족 폴리시클, 예를 들면 나프탈렌, 페난트렌, 퀴놀린, 또는 카르바졸을 의미하는 것으로 받아들여진다. 축합 (아닐화) 방향족 또는 헤테로방향족 폴리시클은 본 발명의 의미에서, 서로 축합되는 2 개 이상의 단순 방향족 또는 헤테로 방향족 고리들로 이루어진다.
- [0044] 각 경우에 전술된 라디칼들에 의해 치환될 수도 있고 임의의 원하는 위치들을 통해 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템에 링크될 수도 있는 아릴 또는 헤테로아릴 기는 특히, 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 피렌, 디하이드로피렌, 크리센, 페틸렌, 플루오란텐, 벤즈안트라센, 벤조페난트렌, 테트라센, 펜타센, 벤조피렌, 푸란, 벤조푸란, 이소벤조푸란, 디벤조푸란, 티오펜, 벤조티오펜, 이소벤조티오펜, 디벤조티오펜, 피롤, 인돌, 이소인돌, 카르바졸, 피리딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 아크리딘, 페난트리딘, 벤조-5,6-퀴놀린, 벤조-6,7-퀴놀린, 벤조-7,8-퀴놀린, 페노티아진, 페녹사진, 피라졸, 인다졸, 이미다졸, 벤지미다졸, 나프티미다졸, 페난-트림이다졸, 피리디미다졸, 피라진이미다졸, 퀴녹살린이미다졸, 옥사졸, 벤즈옥사졸, 나프트옥사졸, 안트록사졸, 페난트록사졸, 이소옥사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴녹살린, 피라진, 페나진, 나프티리딘, 아자카르바졸, 벤조카르볼린, 페난트볼린, 1,2,3-트리아졸, 1,2,4-트리아졸, 벤조트리아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아졸, 1,2,5-옥사디아졸, 1,3,4-옥사디아졸, 1,2,3-티아디아졸, 1,2,4-티아디아졸, 1,2,5-티아디아졸, 1,3,4-티아디아졸, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 1,2,3-트리아진, 테트라졸, 1,2,4,5-테트라진, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,3,5-테트라진, 퓨린, 프테리딘, 인돌리진 및 벤조티아디아졸로부터 도출되는 기들을 의미하는 것으로 받아들여진다.
- [0045] 본 발명의 정의에 따른 아릴록시 기는, 산소 원자를 통해 결합되는, 위에서 정의되는 바처럼, 아릴 기를 의미하는 것으로 받아들여진다. 유사한 정의가 헤테로아릴록시 기들에 적용된다.
- [0046] 본 발명의 의미에서 방향족 고리 시스템은 고리 시스템에서 6 내지 60 C 원자들을 함유한다. 본 발명의 의미에서 헤테로방향족 고리 시스템은 5 내지 60 방향족 고리 시스템들을 함유하고, 이 중 적어도 하나는 헤테로 원자이다. 헤테로원자들은 바람직하게는 N, O 및/또는 S로부터 선택된다. 본 발명의 의미에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 아릴 또는 헤테로아릴 기들만을 반드시 포함할 필요는 없고, 대신에 또한, 복수의 아릴 또는 헤테로아릴 기들이 원자들비방향족 단위 (바람직하게는 H 외에 10% 미만의 원자들), 이를테면, 예를 들어, sp^3 -혼성 C, Si, N 또는 O 원자, sp^2 -혼성 C 또는 N 원자 또는 sp -혼성 C 원자에 의해 연결될 수도 있는, 시스템을 의미하는 것으로 받아들여진다. 따라서, 예를 들면, 9,9'-스피로비플루오렌, 9,9'-디아릴 플루오렌, 트리아릴아민, 디아릴 에테르, 스틸벤 등과 같은 시스템들은 또한 본 발명의 의미에서 방향족 고리 시스템으로 받아들여지도록 의도되며, 이는 2개 이상의 아릴 기들이 예를 들면 선형 또는 시클릭 알킬, 알케닐 또는 알킬닐 기 또는 실릴 기에 의해 연결되는 시스템들이다. 또한, 2개 이상의 아릴 또는 헤테로아릴 기들이 서로, 단일 결합들을 통해 링크되는 시스템들은 또한, 본 발명의 의미에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템들, 이를테면 예를 들어 비페닐, 테르페닐 또는 디페닐 트리아진과 같은 시스템들인 것으로 받아들여진다.
- [0047] 각 경우에 또한 위에서 정의된 라디칼들에 의해 치환될 수도 있고 임의의 원하는 위치들을 통해 방향족 또는 헤테로방향족 기에 링크될 수도 있는 5 - 60 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은, 특히 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센, 페난트라센, 벤조페난트렌, 피렌, 크리센, 페틸렌, 플루오르안텐, 나프타센, 펜타센, 벤조피렌, 비페닐, 비페닐렌, 테르페닐, 테르페닐렌, 쿼터페닐, 플루오렌, 스피로비플루오렌, 디하이드로페난트렌, 디하이드로피렌, 테트라하이드로피렌, 시스- 또는 트랜스-인덴노플루오렌, 트록센, 이소트록센, 스피로트록센, 스피로이소트록센, 푸란, 벤조푸란, 이소벤조푸란, 디벤조푸란, 티오펜, 벤조티오펜, 이소벤조티오펜, 디벤조티오펜, 피롤, 인돌, 이소인돌, 카르바졸, 인돌로카르바졸, 인데노카르바졸, 피리딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 아크리딘, 페난트리딘, 벤조-5,6-퀴놀린, 벤조-6,7-퀴놀린, 벤조-7,8-퀴놀린, 페노티아진, 페녹사진, 피라졸, 인다졸, 이미다졸, 벤지미다졸, 나프티미다졸, 페난트림이다졸, 피리디미다졸, 피라진이미다졸, 퀴녹살린이미다졸, 옥사졸, 벤즈옥사졸, 나프트옥사졸, 안트록사졸, 페난트록사졸, 이소옥사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴녹살린, 1,5-디아자안트라센, 2,7-디아자피렌, 2,3-디아자피렌, 1,6-디아자피렌, 1,8-디아자피렌, 4,5-디아자피렌, 4,5,9,10-테트라아자페틸렌, 피라진, 페나진, 페녹사진, 페노티아진, 플루오루빈, 타프티리딘, 아자카르바졸, 벤조카르볼린, 페난트볼린, 1,2,3-트리아졸, 1,2,4-트리아졸, 벤조트리아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아졸, 1,2,5 옥사디아졸, 1,3,4-옥사디아졸, 1,2,3-티아디아졸, 1,2,4-티아디아졸, 1,2,5-티아디아졸, 1,3,4-티아디아졸, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 1,2,3-트리아진, 테트라졸, 1,2,4,5-테트라진, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,3,5-테트라진, 퓨린, 프테리딘, 인돌리진 및 벤조티아디아졸로부터 도출되는

기들, 또는 이들 기들의 조합을 의미하는 것으로 받아들여진다.

[0048]

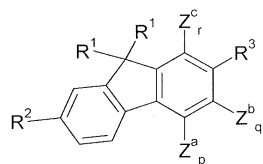
본 발명의 목적을 위해, 1 내지 40 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬 기 또는 3 내지 40 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 또는 2 내지 40 C 원자들을 갖는 알케닐 또는 알키닐 기는, 여기에서 또한 개개의 H 원자들 또는 CH₂ 기들이 라디칼들의 정의하에서 위에 언급된 기들에 의해 치환될 수도 있으며, 바람직하게는 라디칼들 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, s-부틸, t-부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, s-펜틸, 시클로펜틸, 네오펜틸, n-헥실, 시클로헥실, 네오헥실, n-헵틸, 시클로헵틸, 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 또는 옥티닐을 의미하는 것으로 받아들여진다. 1 내지 40 C 원자들을 갖는 알콕시 또는 티오알킬 기는 바람직하게는 메톡시, 트리플루오로메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, s-부톡시, t-부톡시, n-펜톡시, s-펜톡시, 2-메틸부톡시, n-헥스옥시, 시클로헥실톡시, n-헵톡시, 시클로헵틸톡시, n-옥틸톡시, 시클로옥틸톡시, 2-에틸헥실톡시, 펜타플루오로에톡시, 2,2,2-트리플루오로에톡시, 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 의미하는 것으로 받아들여진다.

[0049]

또한 바람직하게는, 식 (1)의 화합물에서 B는 o-페닐렌, m-페닐렌 또는 p-페닐렌 기, 1,4-나프틸렌, 2,4-나프틸렌, 1,5-나프틸렌 또는 2,5-나프틸렌 기, 3,7-디벤조푸라닐렌 기 또는 3,7-디벤조티오펜렌 기이고, 아주 바람직하게는 B는 o-페닐렌, m-페닐렌 또는 p-페닐렌 기이고 아주 특히 바람직하게는 B는 p-페닐렌 기이고, 여기서 그 기들은 하나 이상의 라디칼들 R⁴에 의해 치환될 수도 있고, 이는 각 발생시에 동일하거나 또는 상이할 수도 있고, 여기서 그 기들은 바람직하게는 비치환된다.

[0050]

본 발명의 목적을 위해, 하기 일반 식 (2)의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스가 바람직하다



식 (2)

[0051]

식중, 위의 정의들이 지수들 및 기호들에 적용된다.

[0052]

[0053]

또한, 일반 식 (1) 또는 (2)의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스로서, 서로 상이한 라디칼들 R¹ 및 R²는, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시 기, 여기서 위에 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼들 R⁶에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 이들은 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼들 R⁶에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 6 내지 60 방향족 고리 원자들을 갖는 아릴톡시 기, 이들은 하나 이상의 라디칼들 R⁶에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 60 방향족 고리 원자들을 갖는 아릴알킬 기, 이들은 각 경우에 하나 이상의 라디칼들 R⁶에 의해 치환되는 것인 것을 특징으로 하는 전계 발광 디바이스가 바람직하다.

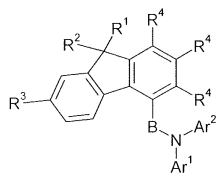
[0054]

또한 아주 바람직하게는, 서로 상이한 라디칼들 R¹ 및 R²는 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기, 여기서 위에 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼들 R⁶에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 6 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 이는 각 경우에 하나 이상의 라디칼들 R⁶에 의해 치환될 수도 있는 것이다.

- [0055] 또한 아주 특히 바람직하게는, 2개 라디칼들 R^1 및 R^2 중 하나는 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기이고, 여기서 전술된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고, 특히 바람직하게는, 2개 라디칼들 R^1 및 R^2 중 하나는 메틸, 에틸, n-/i-프로필 또는 n-/i-/t-부틸 기 이고 2개 라디칼들 R^1 및 R^2 중 다른 하나는 6 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 이들은 각 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고, 이 때 고리 시스템은 특히 바람직하게는 페닐, 비페닐, 테르페닐 또는 피리딜 기로 이루어지는 군으로부터 선택된다.
- [0056] 더욱이 일반식 (1) 또는 (2) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스로서, R^3 이 각 발생시에 동일하게 또는 상이하게, 바람직하게는 동일하게, H, D, F, Cl, Br, I, $N(R^6)_2$, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시 기, 또는 2 내지 20 C 원자들을 갖는 알케닐 또는 알키닐 기, 여기서 위에서 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고 위에서 언급된 기들에서 하나 이상의 H 원자들은 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수도 있는 것, 또는 6 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 이는 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 60 방향족 고리 원자들을 갖는 아릴록시 기, 이는 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 60 방향족 고리 원자들을 갖는 아랄킬 기, 이는 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것으로부터 선택되고, 이 때 2개 이상의 라디칼들 R^3 은 서로 링크되고 고리를 형성할 수도 있는 것을 특징으로 하는 전계 발광 디바이스가 바람직하다.
- [0057] 더욱이 아주 바람직하게는, 라디칼 R^3 는 각 발생시에, 동일하게 또는 상이하게, 바람직하게는 동일하게, H, D, F, Cl, Br, I, $N(R^6)_2$, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기, 여기서 위에 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고 위에 언급된 기들에서 하나 이상의 H 원자들은 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수도 있는 것, 또는 6 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리, 이는 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것으로부터 선택된다. 라디칼들 R^3 을 위한 특히 바람직한 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템들의 일부는 페닐, 비페닐, 테르페닐, 쿼터페닐, 피리딜, 트리아지닐, 나프틸리, 플루오레닐, 디벤조티오펜, 디벤조푸라닐 기로부터 선택되고, 이 때 각각의 기들은 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있다.
- [0058] 아주 특히 바람직한 실시형태에서, 본 발명은, 일반식 (1) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하고, R^3 가 H 와 동일한 것을 특징으로 하는 전계 발광 디바이스에 관한 것이다.
- [0059] 또한, 아주 특히 바람직한 실시형태에서, 본 발명은 일반식 (1) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하고, R^3 가 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기인 것을 특징으로 하는 전계 발광 디바이스에 관한 것이다.
- [0060] 계속해서 또한 아주 특히 바람직한 실시형태에서, 본 발명은 일반식 (1) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하고 R^3 가 6 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내는 것을 특징으로 하는 전계 발광 디바이스에 관한 것이다.
- [0061] 더욱이 일반식 (1) 또는 (2) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스로서, R^4 는 각 발생시에 동일하게 또는 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, $N(R^6)_2$, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시 기, 여기서 위에서 언급된 기들은 각각

하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고 위에서 언급된 기들에서 하나 이상의 H 원자들은 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수도 있는 것, 또는 6 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 이는 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 60 방향족 고리 원자들을 갖는 아릴록시 기, 이는 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 60 방향족 고리 원자들을 갖는 아랄킬 기, 이는 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것으로부터 선택되고, 이 때 2개 이상의 라디칼들 R^4 은 서로 링크될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고, 바람직하게는 라디칼들 R^4 는 고리 닫힘 (ring closure)을 형성하지 않는 것을 특징으로 하는 전계 발광 디바이스가 바람직하다.

[0062] 바람직한 실시형태에서, 본 발명은 하기 일반식 (3)의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스에 관한 것이다

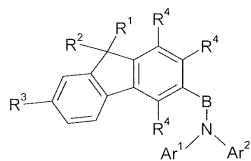


식 (3)

[0063] 식중, 위의 정의들이 사용된 기호들 및 지수들에 적용된다.

[0064]

[0065] 아주 바람직한 실시형태에서, 본 발명은 하기 일반식 (4)의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스에 관한 것이다

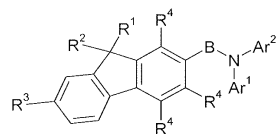


식 (4)

[0066] 식중, 위의 정의들이 사용된 기호들 및 지수들에 적용된다.

[0067]

[0068] 또한 바람직한 실시형태에서, 본 발명은 하기 일반식 (5)의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스에 관한 것이다

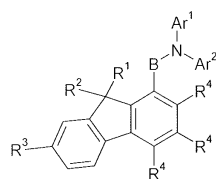


식 (5)

[0069] 식중, 위의 정의들이 사용된 기호들 및 지수들에 적용된다.

[0070]

[0071] 또한 바람직한 실시형태에서, 본 발명은 하기 일반식 (6)의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스에 관한 것이다

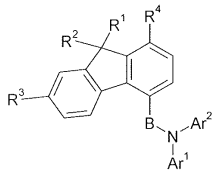


식 (6)

[0072] 식중, 위의 정의들이 사용된 기호들 및 지수들에 적용된다.

[0073]

[0074] 또한 바람직한 실시형태에서, 본 발명은 하기 일반식 (7) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스에 관한 것이다

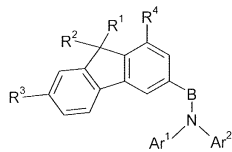


식 (7)

[0075]

[0076] 식중, 위의 정의들이 사용된 기호들 및 지수들에 적용된다.

[0077] 또한 아주 바람직한 실시형태에서, 본 발명은 하기 일반식 (8) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스에 관한 것이다

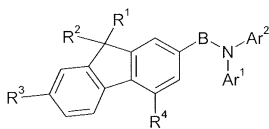


식 (8)

[0078]

[0079] 식중, 위의 정의들이 사용된 기호들 및 지수들에 적용된다.

[0080] 또한 아주 바람직한 실시형태에서, 본 발명은 하기 일반식 (9) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스에 관한 것이다

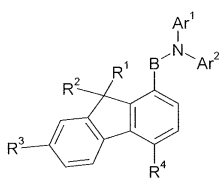


식 (9)

[0081]

[0082] 식중, 위의 정의들이 사용된 기호들 및 지수들에 적용된다.

[0083] 아주 특히 바람직한 실시형태에서, 본 발명은 하기 일반식 (10) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스에 관한 것이다

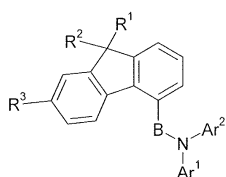


식 (10)

[0084]

[0085] 식중, 위의 정의들이 사용된 기호들 및 지수들에 적용된다.

[0086] 또한 아주 바람직한 실시형태에서, 본 발명은 하기 일반식 (11) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스에 관한 것이다

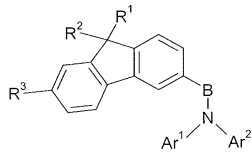


식 (11)

[0087]

[0088] 식중, 위의 정의들이 사용된 기호들 및 지수들에 적용된다.

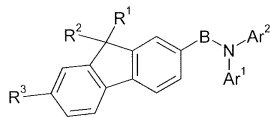
[0089] 또한 아주 바람직한 실시형태에서, 본 발명은 하기 일반식 (12) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스에 관한 것이다



식 (12)

[0090]
[0091] 식중, 위의 정의들이 사용된 기호들 및 지수들에 적용된다.

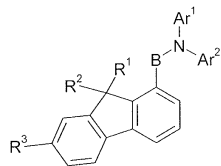
[0092] 또한 아주 바람직한 실시형태에서, 본 발명은 하기 일반식 (13) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스에 관한 것이다



식 (13)

[0093]
[0094] 식중, 위의 정의들이 사용된 기호들 및 지수들에 적용된다.

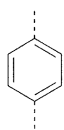
[0095] 아주 특히 바람직한 실시형태에서, 본 발명은 하기 일반식 (14) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스에 관한 것이다



식 (14)

[0096]
[0097] 식중, 위의 정의들이 사용된 기호들 및 지수들에 적용된다.

[0098] 또한, 위에 나타난 식 (1) 내지 (14) 의 화합물로서, B 가 하기 식 (15) 내지 (36) 식의 기들로부터 선택되고, 여기서 이들 기들은 또한 하나 이상의 라디칼들 R⁶ 에 의해 치환될 수도 있고, 이들은 서로 독립적이고, 이때 R⁶ 은 위에 나타난 바처럼 정의되는, 상기 화합물이 바람직하다:



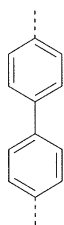
식 (15)



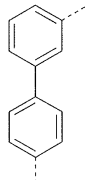
식 (16)



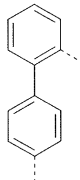
식 (17)



식 (18)



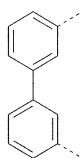
식 (19)



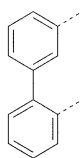
식 (20)

[0099]

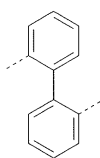
[0100]



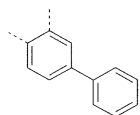
식 (21)



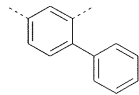
식 (22)



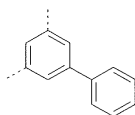
식 (23)



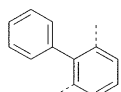
식 (24)



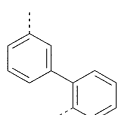
식 (25)



식 (26)



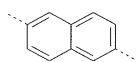
식 (27)



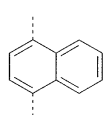
식 (28)



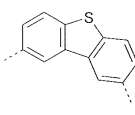
식 (29)



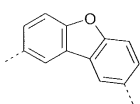
식 (30)



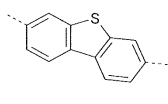
식 (31)



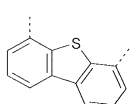
식 (32)



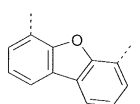
식 (33)



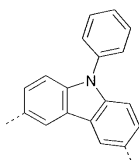
식 (34)



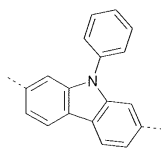
식 (35)



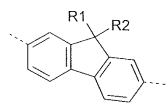
식 (36)



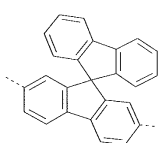
식 (37)



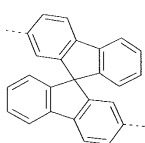
식 (38)



식 (39)



식 (40)



식 (41)

[0101]

[0102]

[0103]

[0104]

[0105]

[0106]

[0107]

식중 파선은 링크 위치를 나타낸다.

위에 나타난 식 (1) 내지 (14)의 화합물로서, B가 식 (15) 내지 (41)의 기들로부터 선택되고, 이들 기들은 치환되지 않는, 상기 화합물이 특히 바람직하다.

위에 나타난 식 (1) 내지 (14)의 화합물로서, B가 식 (15)를 따르고, 여기서 이 기는 치환되지 않는, 상기 화합물이 아주 특히 바람직하다.

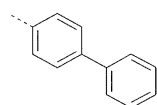
식 (1) 내지 (14)의 화합물로서, B가 단일 결합이고, 이 경우에 질소 원자가 단일 결합을 통하여 플루오렌에 직접 결합되는, 상기 화합물이 특히 바람직하다.

Ar^1 및 Ar^2 는 바람직하게는, 각 발생시에 동일하게 또는 상이하게, 페닐피리딜, 페닐나프틸, 비페닐, 테르페닐 또는 쿼터페닐 기, 이는 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고, 이는 서로 동일하거나 또는 상이할

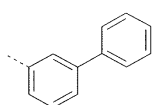
수도 있는 것으로부터 선택되고, 이때 Ar^1 에서의 방향족 또는 헤테로방향족 고리들 중 2개가 2가 기 $-O-$, $-S-$, $-C(R^5)_2-$ 또는 $-Si(R^5)_2-$ 에 의해 브릿지될 수도 있거나 또는 Ar^2 에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리들 중 2개가 2가 기 $-O-$, $-S-$, $-C(R^5)_2-$ 또는 $-Si(R^5)_2-$ 에 의해 브릿지될 수도 있는데, 브릿지되지 않은 고리들이 바람직하고, Ar^1 로부터의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 Ar^2 로부터의 방향족 또는 헤테로방향족 고리에, 2가 기 $-O-$, $-S-$, $-Si(R^5)_2-$, $-NR^5-$ 또는 $-C(R^5)_2-$ 에 의해 브릿지될 수도 있는데, 브릿지되지 않은 기들 Ar^1 및 Ar^2 이 바람직하다.

[0108]

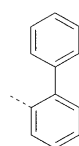
본 발명의 아주 바람직한 실시형태에서, Ar^1 및 Ar^2 는, 각 발생시에 동일하게 또는 상이하게, 하기 식 (42) 내지 (142) 의 기들로부터 선택되고, 이들은 하나 이상의 라디칼들 R^5 에 의해 치환될 수도 있다:



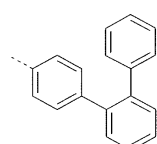
식 (42)



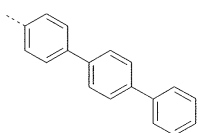
식 (43)



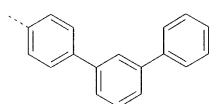
식 (44)



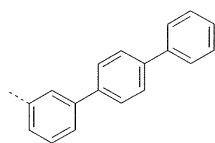
식 (45)



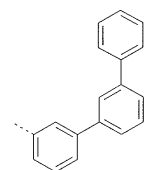
식 (46)



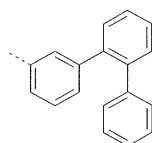
식 (47)



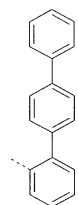
식 (48)



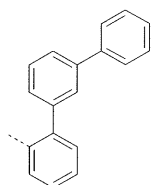
식 (49)



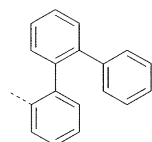
식 (50)



식 (51)

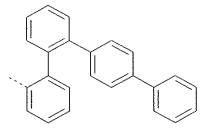


식 (52)

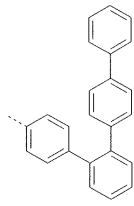


식 (53)

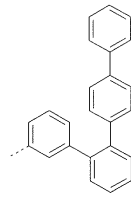
[0109]



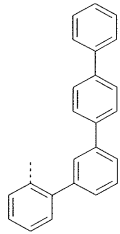
식 (54)



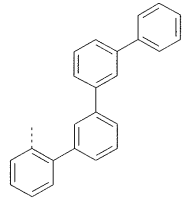
식 (55)



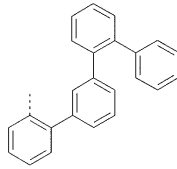
식 (56)



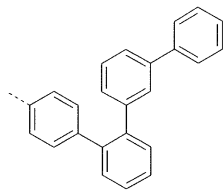
식 (57)



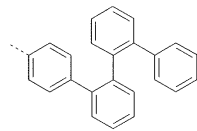
식 (58)



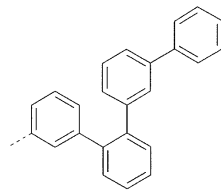
식 (59)



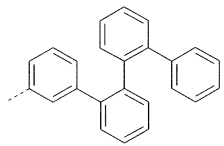
식 (60)



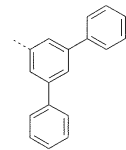
식 (61)



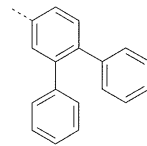
식 (62)



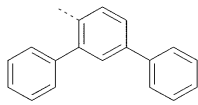
식 (63)



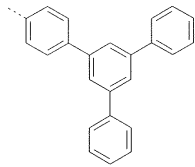
식 (64)



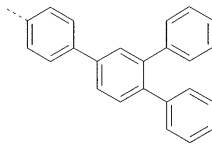
식 (65)



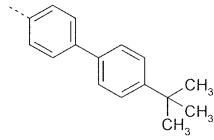
식 (66)



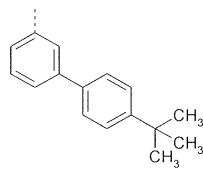
식 (67)



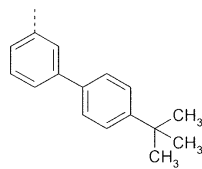
식 (68)



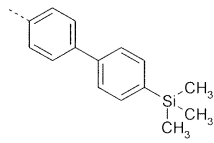
식 (69)



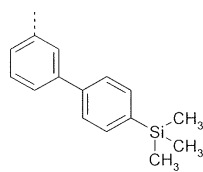
식 (70)



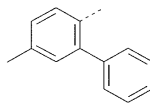
식 (71)



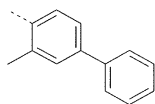
식 (72)



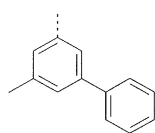
식 (73)



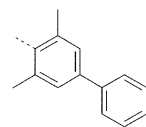
식 (74)



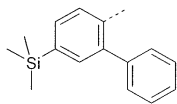
식 (75)



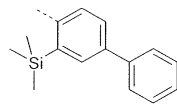
식 (76)



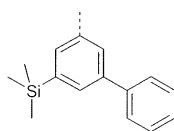
식 (77)



식 (78)

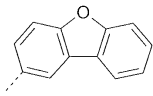


식 (79)

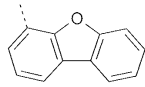


식 (80)

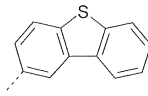
[0111]



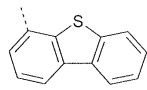
식 (81)



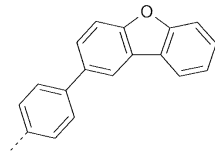
식 (82)



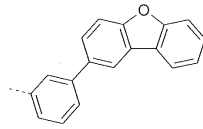
식 (83)



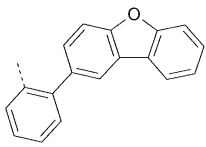
식 (84)



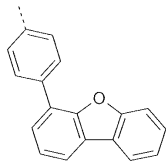
식 (85)



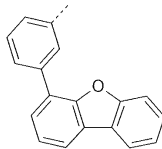
식 (86)



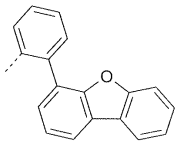
식 (87)



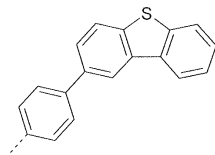
식 (88)



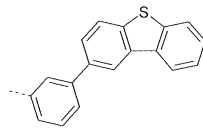
식 (89)



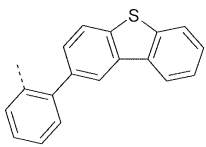
식 (90)



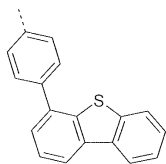
식 (91)



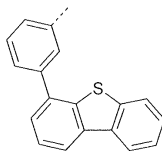
식 (92)



식 (93)

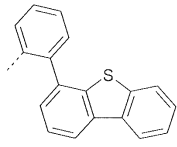


식 (94)

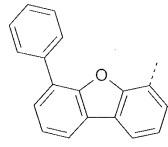


식 (95)

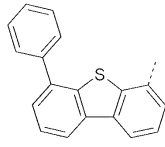
[0112]



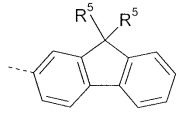
식 (96)



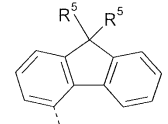
식 (97)



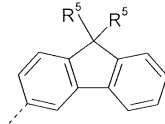
식 (98)



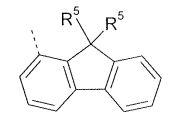
식 (99)



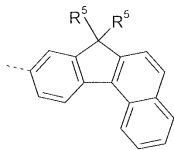
식 (100)



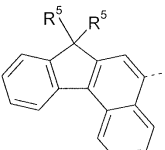
식 (101)



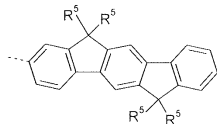
식 (102)



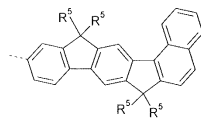
식 (103)



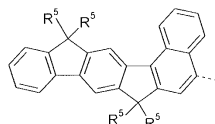
식 (104)



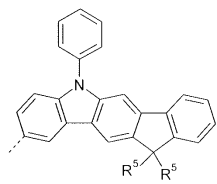
식 (105)



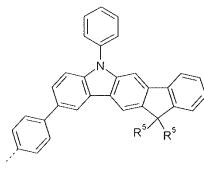
식 (106)



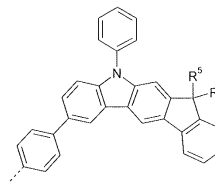
식 (107)



식 (108)

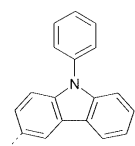


식 (109)

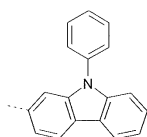


식 (110)

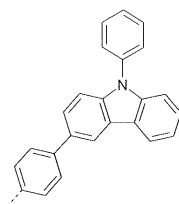
[0113]



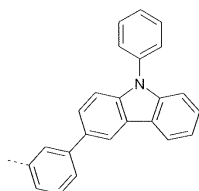
식 (111)



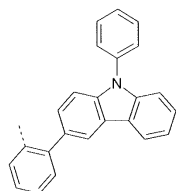
식 (112)



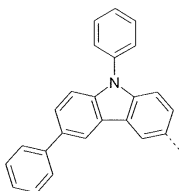
식 (113)



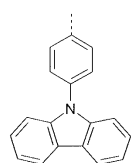
식 (114)



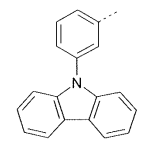
식 (115)



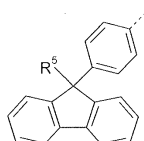
식 (116)



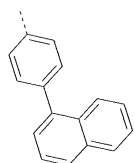
식 (117)



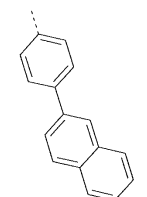
식 (118)



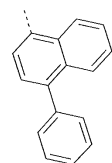
식 (119)



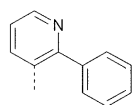
식 (120)



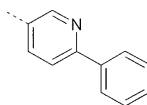
식 (121)



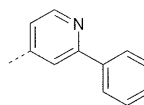
식 (122)



식 (123)

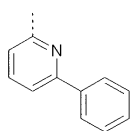


식 (124)

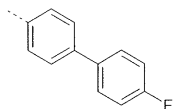


식 (125)

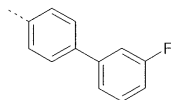
[0114]



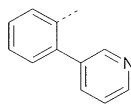
식 (126)



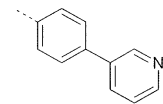
식 (127)



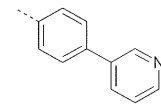
식 (128)



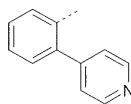
식 (129)



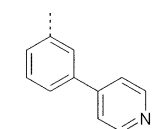
식 (130)



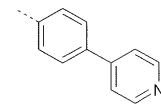
식 (131)



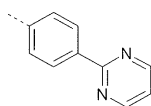
식 (132)



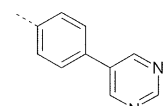
식 (133)



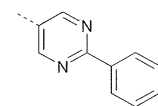
식 (134)



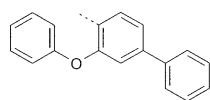
식 (135)



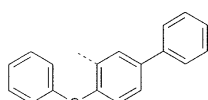
식 (136)



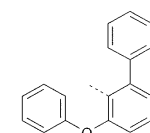
식 (137)



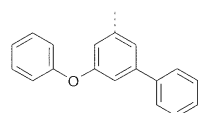
식 (138)



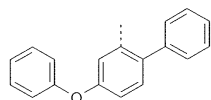
식 (139)



식 (140)



식 (141)



식 (142)

[0115]

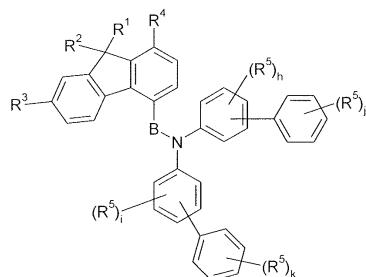
[0116]

[0117]

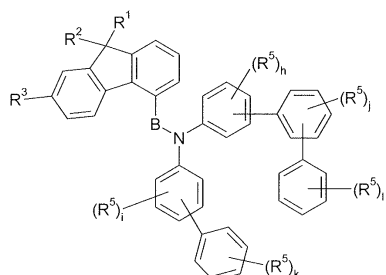
[0118]

식중, 파선은 질소 원자에 대한 링크 위치를 나타낸다.

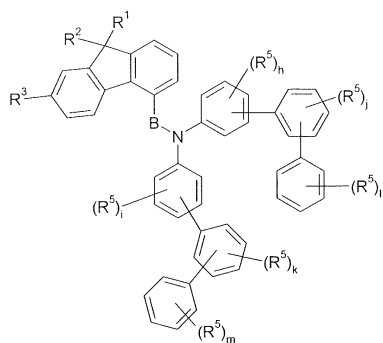
하기 식 (143) 내지 (145) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스가 특히 바람직하고, 여기서 위의 정의들이 사용된 기호들에 적용되고 여기서 h 및 i 는, 서로 독립적으로, 0, 1, 2, 3 및 4 일 수도 있고 j 및 k 는 서로 독립적으로, 0, 1, 2, 3, 4 및 5 일 수도 있다.



식 (143)



식 (144)



식 (145)

더욱 더 바람직하게는, 식 (143) 내지 (145) 의 화합물들에 사용된 기호들에 다음이 적용된다:

R^1 및 R^2 는

서로 상이하며, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기, 이 때 위에서 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 6 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 이는 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것이고, 특히 바람직하게는 2개 라디칼들 R^1 및 R^2 중 하나는 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기이고, 이 때 위에서 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고, 더 바람직하게는 2개 라디칼들 R^1 및 R^2 중 하나는 메틸, 에틸, n-/i-프로필 또는 n-/i-/t-부틸 기이고 2개 라디칼들 R^1 및 R^2 중 다른 하나는 6 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 이는 각 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 고리 시스템은 특히 바람직하게는 페닐, 비페닐, 테르페닐 또는 피리딜 기로 이루어지는 군으로부터 선택된다;

R^3 는

H, D, F, Cl, Br, I, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기, 이때 위에 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고 위에 언급된 기들에서 하나 이상의 H 원자들은 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수도 있는 것, 또는

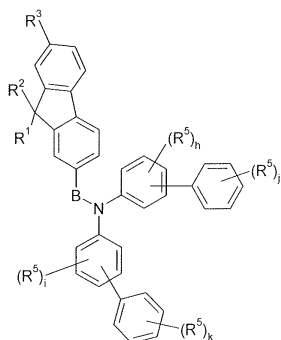
6 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리, 이는 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것이고, R^3 는 특히 바람직하게는 H 와 동일하다;

[0126] B 는

[0127] 단일 결합 또는 페닐렌, 비페닐렌, 테르페닐렌, 나프틸렌, 디벤조푸라닐렌 또는 디벤조티오펜일렌 플루오레닐렌, 또는 카르바조일렌 기이고, 이들은 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고, B 는 특히 바람직하게는 단일 결합이다;

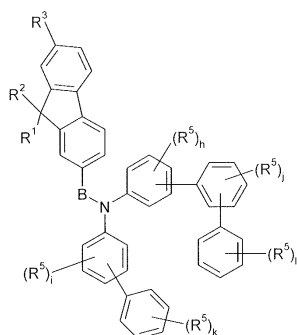
[0128] 그리고 여기서 R^5 는 위에 나타낸 바와 같이 정의되고, 특히 바람직하게는 R^5 는 H 와 동일하다.

[0129] 하기 식 (146) 내지 (148) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전계 발광 디바이스가 특히 바람직하고, 여기서 위의 정의들이 사용된 기호들에 적용되고 h 및 i 는, 서로 독립적으로, 0, 1, 2, 3 및 4 일 수도 있고 j 및 k 는 서로 독립적으로, 0, 1, 2, 3, 4 및 5 일 수도 있다.

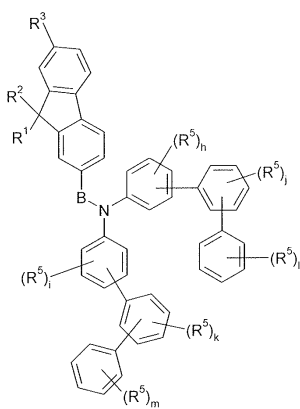


식 (146)

[0130]



식 (147)



식 (148)

[0131]

[0132] 더욱 더 바람직하게는, 식 (146) 내지 (148) 의 화합물들에 사용된 기호들에 다음이 적용된다:

[0133] R^1 및 R^2 는

[0134] 서로 상이하며, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기, 이 때 위에서 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 6 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 이는 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것이고, 특히 바람직하게는 2개 라디칼들 R^1 및 R^2 중 하나는 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기이고, 이때 위에 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고, 더 바람직하게는 2개 라디칼들 R^1 및 R^2 중 하나는 메틸, 에틸, n-/i-프로필 또는 n-/i-/t-부틸 기이고 2개 라디칼들 R^1 및 R^2 중 다른 하나는 6 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 이는 각 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 고리 시스템은 특히 바람직하게는 페닐, 비페닐, 테르페닐 또는 피리딜 기로 이루어지는 군으로부터 선택된다;

[0135] R^3 는

[0136] H, D, F, Cl, Br, I, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기, 이때 위에 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고 위에 언급된 기들에서 하나 이상의 H 원자들은 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수도 있는 것, 또는 6 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리, 이는 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것이고, R^3 는 특히 바람직하게는 H 와 동일하다;

[0137] B 는

[0138] 단일 결합 또는 페닐렌, 비페닐렌, 테르페닐렌, 나프틸렌, 디벤조푸라닐렌 또는 디벤조티오펜렌 플루오레닐렌, 또는 카르바조일렌 기이고, 이들은 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고, B 는 특히 바람직하게는 단일 결합이다;

[0139] 그리고 식중 R^5 는 위에 나타낸 바와 같이 정의되고, 특히 바람직하게는 R^5 는 H 와 동일하다.

[0140] 아주 특히 바람직한 실시형태에서, 본 발명은 일반식 (1) 의 화합물로서, 모노아민 또는 디아민 화합물, 특히 바람직하게는 모노아민 화합물인 것을 특징으로 하는 화합물에 관한 것이다.

[0141] 본 발명에 따른 디바이스는 임의의 전계 발광 디바이스일 수도 있다. 본 발명의 목적을 위해, 전계 발광 디바이스는 바람직하게는 유기 발광트랜지스터 (OLET), 유기 전계-켄치 디바이스 (OFQD), 유기 발광 전기화학 셀 (OLEC, LEC 또는 LEEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 유기 발광 다이오드 (OLED) 이다. 이는 아주 바람직하게는 유기 발광 전기화학 셀 (OLEC, LEC 또는 LEEC) 또는 유기 발광 다이오드 (OLED) 이다. 본 발명에 따른 전계 발광 디바이스는 아주 특히 바람직하게는 유기 발광 다이오드 (OLED) 이다.

[0142] 일반식 (1) 의 화합물들이 특히 전계 발광 디바이스들에서 하기 층들에서 그리고 하기 기능으로:

[0143] ● 정공 수송 또는 정공 주입 층에서의 정공 수송 재료로서

[0144] ● 여기자 차단 재료로서,

[0145] ● 전자 차단 재료로서,

[0146] ● 방출 층에서 매트릭스 재료로서,

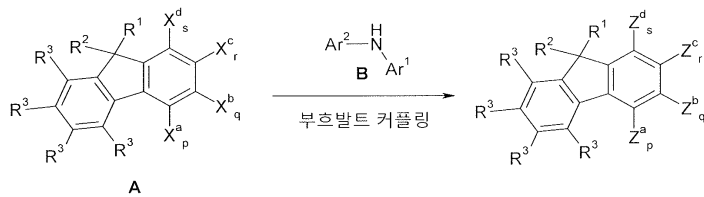
[0147] ● 방출 층에서 방출 재료로서

[0148] 채용된다.

[0149] 화합물들의 합성은, 종래 기술로부터 당업자에 알려진 프로세스들에 의해 제조될 수 있다. 그 제조는, 예를 들어, 할로젠화 (halogenation), 부흐발트 (Buchwald) 커플링 및 스즈키 (Suzuki) 커플링에 의해 수행될 수 있다.

[0150] 다음의 반응 스킴은 식 (1) 의 화합물의 제조를 위한 바람직한 합성 루트를 보여준다. 화합물의 합성을 위

해, 플루오렌 화합물 A 이 식 $Ar^1-NH-Ar^2$ 의 아민 B 에 부흐발트 커플링에서 반응된다.



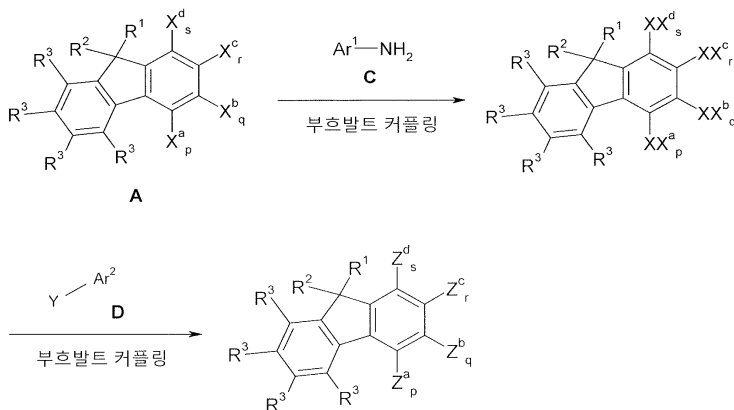
[0151]

[0152] 식중, 위의 정의들이 사용된 기호들 및 지수들에 적용되고, 식중

[0153] $X_0^a, X_0^b, X_0^c, X_0^d$ 는, 각 발생시에 동일하게 또는 상이하게, R^4 와 동일하다 그리고

[0154] $X_1^a, X_1^b, X_1^c, X_1^d$ 는 $-B-Y$ 와 동일하고, 이 때 Y 는 이탈기 (leaving group), 예를 들어 할로젠이다.

[0155] 화합물의 제조를 위한 또 다른 바람직한 합성 루트는 다음의 반응 스킴에 묘사되어 있다. 합성 루트는 2개의 커플링 반응들을 포함하다: 먼저, 플루오렌 화합물 A 가 제 1 부흐발트 커플링에서 식 Ar^1-NH_2 의 아민 B 와 반응된다. 최종적으로, 제 2 부흐발트 커플링이 예를 들어 브로모아릴 화합물에 의해 화합물 D 로 수행된다,



[0156]

[0157]

[0158] 식중 Y 는 다시 이탈기, 예를 들어 할로젠이다;

[0159] 그리고 식중

[0160] $XX_0^a, XX_0^b, XX_0^c, XX_0^d$ 는, 각 발생시에 동일하게 또는 상이하게, R^3 와 동일하고

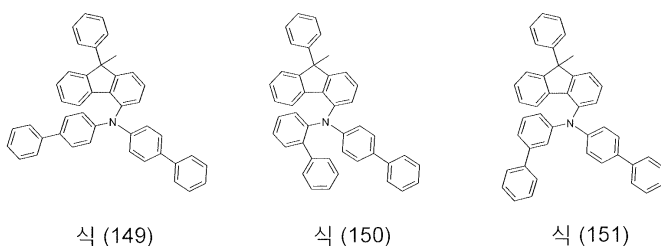
[0161] $XX_1^a, XX_1^b, XX_1^c, XX_1^d$ 는 $-B-NH-Ar^1$ 와 동일하다.

[0162] 화합물들의 합성에서 채용되는 출발 화합물들 A, B, C 및 D 를 위한 합성 루트들은 당업자에게 잘 알려져 있다.

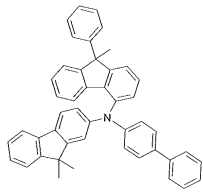
또한, 일부 분명한 합성 프로세스들이 작업 예들에서 상세하게 설명된다.

[0163] 일반식 (1) 의 화합물들의 제조를 위한 바람직한 커플링 반응들은 부흐발트 커플링이다.

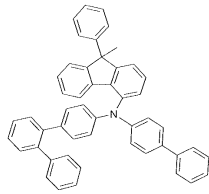
[0164] 전계 발광 디바이스들을 위한 바람직한 화합물들은 다음의 표에 예로써 보여져 있다:



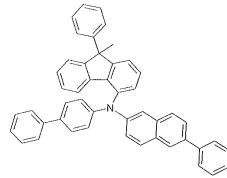
[0165]



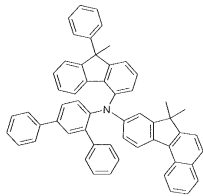
식 (152)



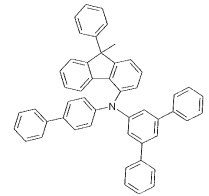
식 (153)



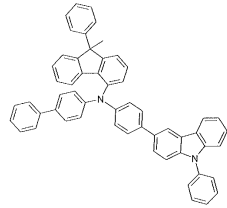
식 (154)



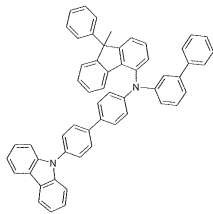
식 (155)



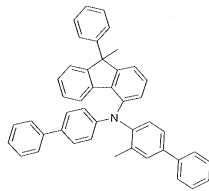
식 (156)



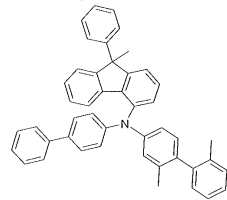
식 (157)



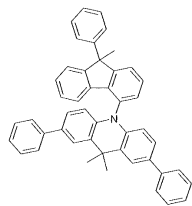
식 (158)



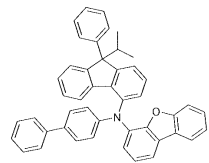
식 (159)



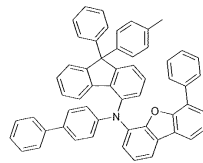
식 (160)



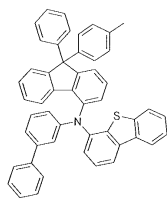
식 (161)



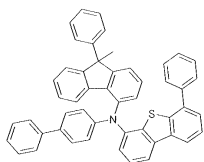
식 (162)



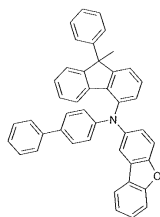
식 (163)



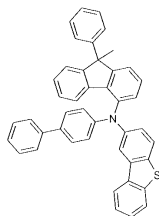
식 (164)



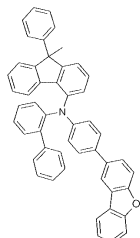
식 (165)



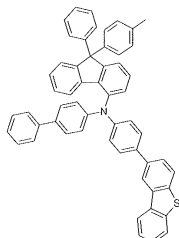
식 (166)



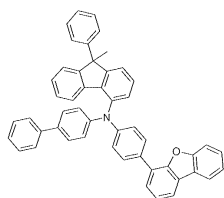
식 (167)



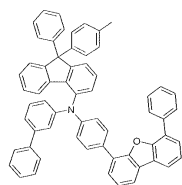
식 (168)



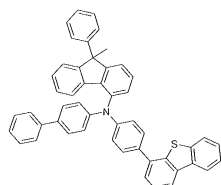
식 (169)



식 (170)

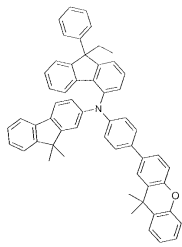


식 (171)

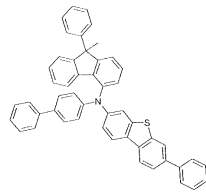


식 (172)

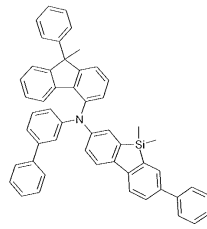
[0167]



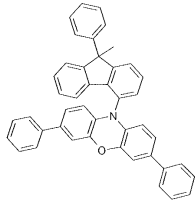
식 (173)



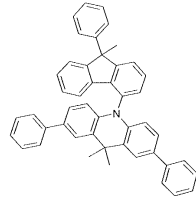
식 (174)



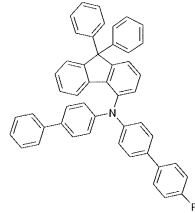
식 (175)



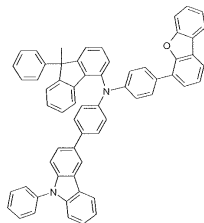
식 (176)



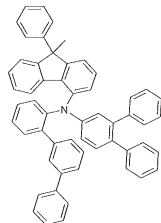
식 (177)



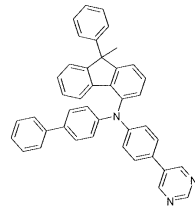
식 (178)



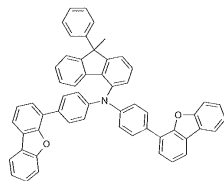
식 (179)



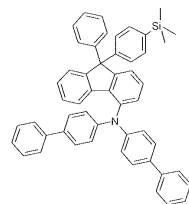
식 (180)



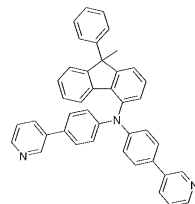
식 (181)



식 (182)

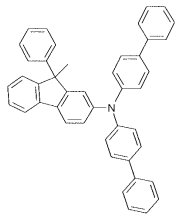


식 (183)

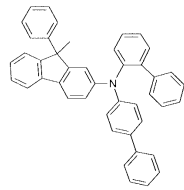


식 (184)

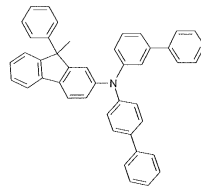
[0168]



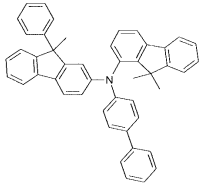
식 (185)



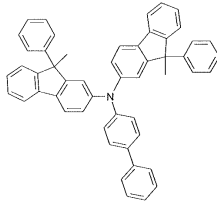
식 (186)



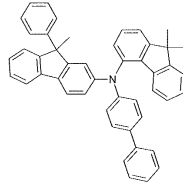
식 (187)



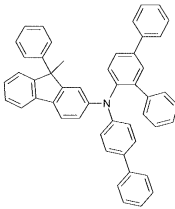
식 (188)



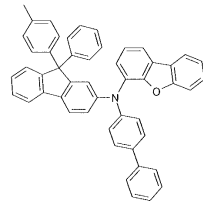
식 (189)



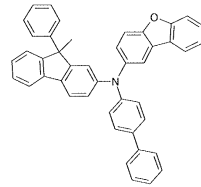
식 (190)



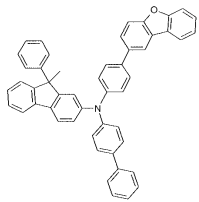
식 (191)



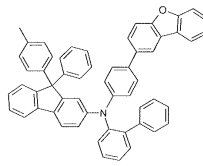
식 (192)



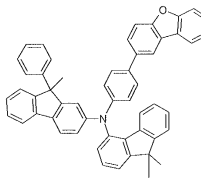
식 (193)



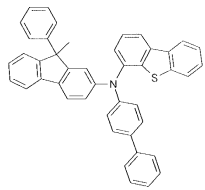
식 (194)



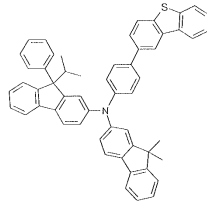
식 (195)



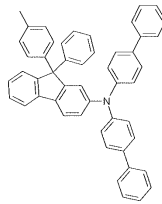
식 (196)



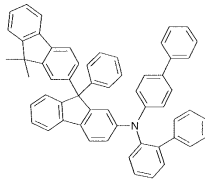
식 (197)



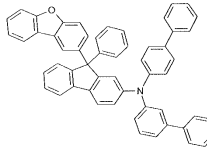
식 (198)



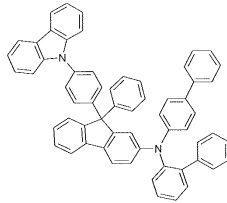
식 (199)



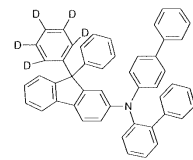
식 (200)



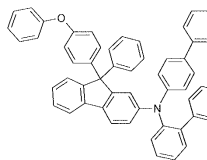
식 (201)



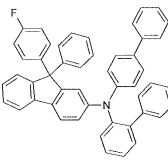
식 (202)



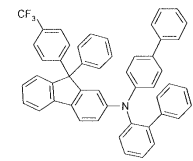
식 (203)



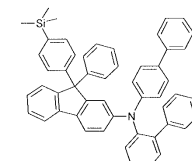
식 (204)



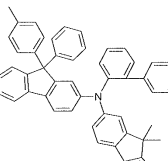
식 (205)



식 (206)

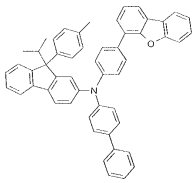


식 (207)

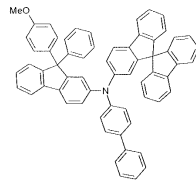


식 (208)

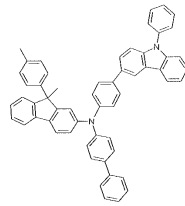
[0170]



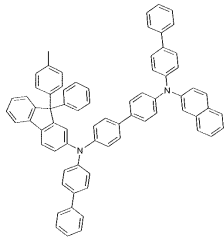
식 (209)



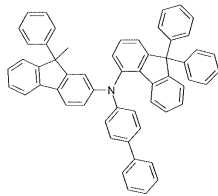
식 (210)



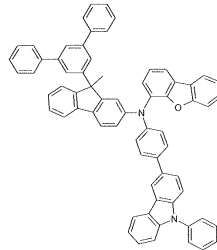
식 (211)



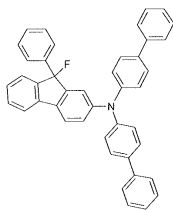
식 (212)



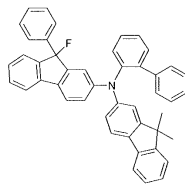
식 (213)



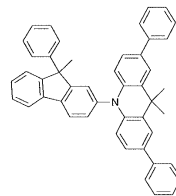
식 (214)



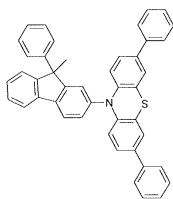
식 (215)



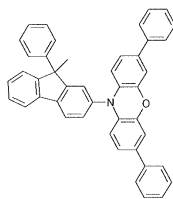
식 (216)



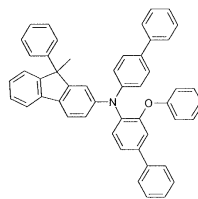
식 (217)



식 (218)

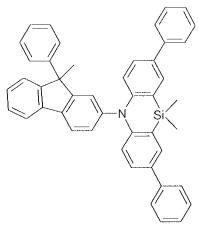


식 (219)

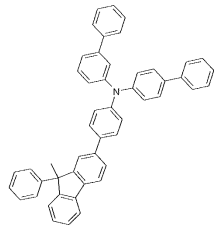


식 (220)

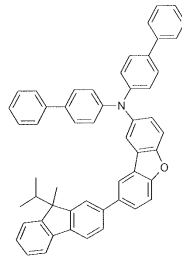
[0171]



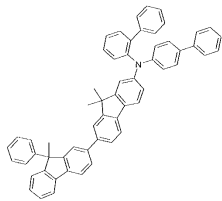
식 (221)



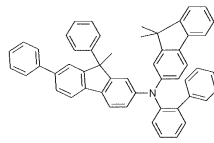
식 (222)



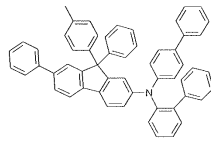
식 (223)



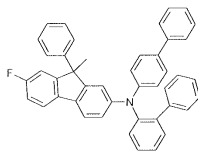
식 (224)



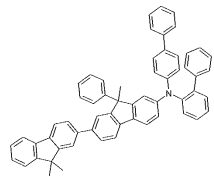
식 (225)



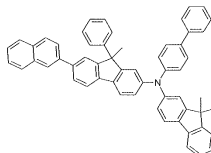
식 (226)



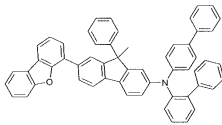
식 (227)



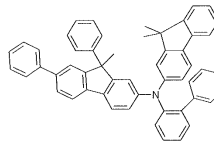
식 (228)



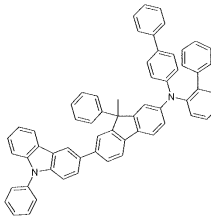
식 (229)



식 (230)

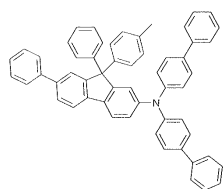


식 (231)

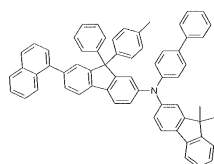


식 (232)

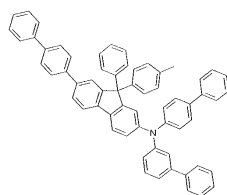
[0172]



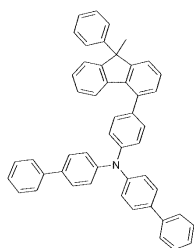
식 (233)



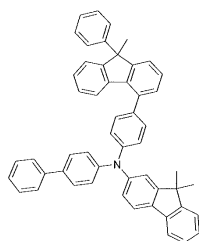
식 (234)



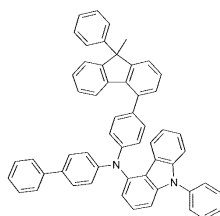
식 (235)



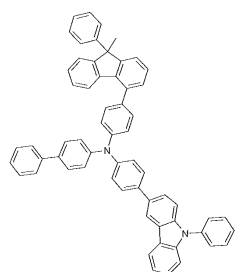
식 (236)



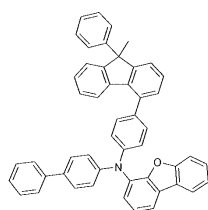
식 (237)



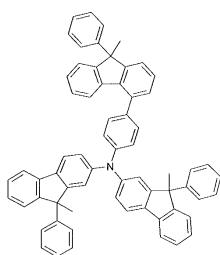
식 (238)



식 (239)

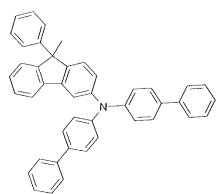


식 (240)

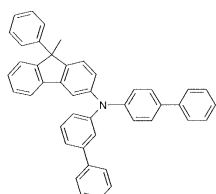


식 (241)

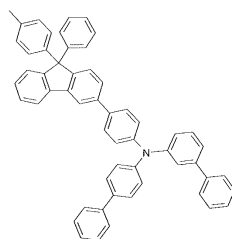
[0173]



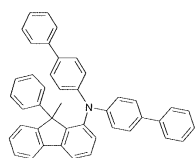
식 (242)



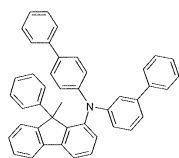
식 (243)



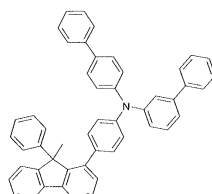
식 (244)



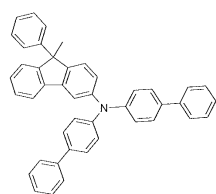
식 (245)



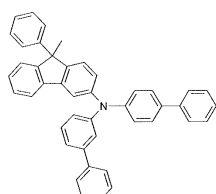
식 (246)



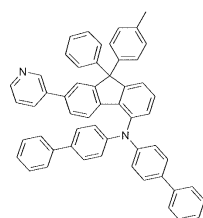
식 (247)



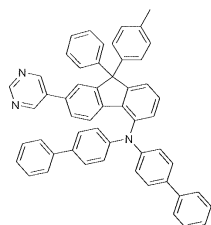
식 (248)



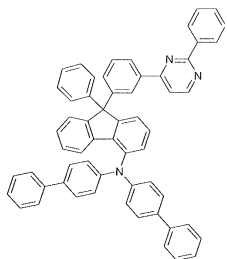
식 (249)



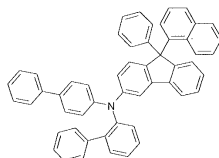
식 (250)



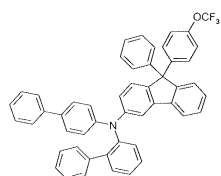
식 (251)



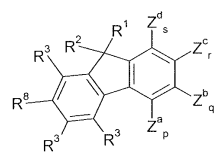
식 (252)



식 (253)

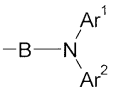


식 (254)



식 (255)

여기에서 사용된 기호 및 지수에 하기가 적용된다:

- [0179] p, q, r, s
- [0180] 는 0 또는 1이고, 이 때 $p + q + r + s = 1$, 바람직하게는 $p = 1$ 또는 $r = 1$ 또는 $s = 1$, 아주 바람직하게는 $p = 1$ 또는 $r = 1$;
- [0181] $Z_0^a, Z_0^b, Z_0^c, Z_0^d$ 는
- [0182] 각 발생시에 동일하게 또는 상이하게 R^4 와 같다
- [0183] $Z_1^a, Z_1^b, Z_1^c, Z_1^d$ 는
- [0184]  와 같다
- [0185] B 는 단일 결합, 6 내지 30 고리 원자들을 갖는 2가 아릴 기 또는 5 내지 30 고리 원자들을 갖는 2가 헤테로아릴기이며, 이들의 각각은 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고,
- [0186] 바람직하게는 단일 결합 또는 페닐렌, 비페닐렌, 테르페닐렌, 나프틸렌, 피리디닐렌, 피리미디닐렌, 피라지닐렌, 피리다지닐렌, 트리아지닐렌, 디벤조푸라닐렌, 디벤조티오펜닐렌, 플루오레닐렌, 또는 카르바조일렌 기이며, 이는 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고,
- [0187] 매우 바람직하게는 단일 결합 또는 페닐렌, 비페닐렌, 테르페닐렌, 나프틸렌, 디벤조푸라닐렌 또는 디벤조티오펜닐렌, 플루오레닐렌, 또는 카르바조일렌기이며, 이는 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고,
- [0188] B 는 아주 특히 바람직하게는 단일 결합 또는 페닐렌 기이며, 이는 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고,
- [0189] B 는 특히 바람직하게는 단일 결합이고,
- [0190] 이 때, B 가 단일 결합이면, 질소 원자가 플루오렌에 직접 결합된다;
- [0191] Ar^1, Ar^2 는
- [0192] 각 발생시에, 동일하게 또는 상이하게, 10 내지 60 고리 원자들을 갖는 비축합 아릴 기 또는 10 내지 60 고리 원자들을 갖는 헤테로아릴기이고, 이들은 하나 이상의 라디칼들 R^5 에 의해 치환될 수도 있고, 이들은 서로 동일하거나 또는 상이하고, 여기서 양쪽 모두의 기 Ar^1 또는 Ar^2 는 각각 적어도 2개 이상의 방향족 또는 헤테로방향족 고리들을 함유하고,
- [0193] 여기서 Ar^1 에서의 방향족 또는 헤테로방향족 고리들 중 2개는 2가 기 $-O-$, $-S-$, $-Si(R^5)_2-$, $-C(R^5)_2-$ 또는 $-NR^5-$ 에 의해 브릿지될 수도 있거나 또는 Ar^2 에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리들 중 2개는 2가 기 $-O-$, $-S-$, $-Si(R^5)_2-$, $-C(R^5)_2-$ 또는 $-NR^5-$ 에 의해 브릿지될 수도 있는데, 브릿지되지 않은 고리들이 바람직하고
- [0194] 여기서 Ar^1 로부터의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 2가 기 $-O-$, $-S-$, $-Si(R^5)_2-$, $-NR^5-$ 또는 $-C(R^5)_2-$ 에 의해 Ar^2 로부터 방향족 또는 헤테로방향족 고리에 브릿지될 수도 있는데, 브릿지되지 않은 기들 Ar^1 및 Ar^2 이 바람직하다;
- [0195] R^1, R^2, R^3 및 R^4 는
- [0196] H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^6$, CN, $Si(R^6)_3$, NO_2 , $N(R^6)_2$, $P(=O)-(R^6)_2$, $S(=O)R^6$, $S(=O)_2R^6$, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬,

알콕시 또는 티오알킬 기 또는 2 내지 20 C 원자들을 갖는 알케닐 또는 알키닐 기, 이 때 전술된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고 전술된 기들에서의 하나 이상의 CH_2 기들은 $-R^6C=CR^6-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=NR^6$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^6-$, $P(=O)(R^6)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 치환될 수도 있고 전술된 기들에서의 하나 이상의 H 원자들은 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수도 있는 것, 또는 6 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 이는 각 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 60 방향족 고리 원자들을 갖는 아릴록시 기, 이는 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 60 방향족 고리 원자들을 갖는 아릴킬 기, 이는 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것이고,

[0197] 여기서 라디칼들 R^1 및 R^2 는 동일할 수 없고 라디칼들 R^3 내지 R^5 는 각 발생시 동일하거나 또는 상이할 수도 있지만, R^1 또는 R^2 중 어느 하나와 동일할 수도 있고

[0198] R^1 및 R^2 로부터의 라디칼들 중 적어도 하나는 6 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내고, 이들은 각 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있다;

[0199] R^5 는

[0200] H, D, $C(=O)R^6$, CN, $Si(R^6)_3$, NO_2 , $N(R^6)_2$, $P(=O)(R^6)_2$, $S(=O)R^6$, $S(=O)_2R^6$, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 2 내지 20 C 원자들을 갖는 알케닐 또는 알키닐 기, 이 때 전술된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고 전술된 기들에서의 하나 이상의 CH_2 기들은 $-R^6C=CR^6-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^6)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=NR^6$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^6-$, $P(=O)(R^6)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 치환될 수도 있고 전술된 기들에서의 하나 이상의 H 원자들은 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수도 있는 것, 또는 6 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 이는 각 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 60 방향족 고리 원자들을 갖는 아릴록시 기, 이들은 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 60 방향족 고리 원자들을 갖는 아릴킬 기, 이들은 각 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있는 것이다,

[0201] R^6 는 각 발생시에, 동일하게 또는 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^7$, CN, $Si(R^7)_3$, NO_2 , $P(=O)(R^7)_2$, $S(=O)R^7$, $S(=O)_2R^7$, $N(R^7)_2$, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 2 내지 20 C 원자들을 갖는 알케닐 또는 알키닐 기, 이 때 전술된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼들 R^7 에 의해 치환될 수도 있고 전술된 기들에서의 하나 이상의 CH_2 기들은 $-R^7C=CR^7-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^7)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=NR^7$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^7-$, $P(=O)(R^7)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 치환될 수도 있고 전술된 기들에서의 하나 이상의 H 원자들은 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수도 있는 것, 또는 5 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 이는 각 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^7 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 아릴록시 또는 헤테로아릴록시 기, 이들은 하나 이상의 라디칼들 R^7 에 의해 치환될 수도 있는 것이고, 여기서 2개 이상의 인접 치환기들 R^6 는 모노- 또는 폴리시클릭 고리 시스템을 서로 형성할 수도 있다;

[0202] R^7 는 H, D, F, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 지방족 하이드로카본 라디칼 또는 5 내지 30 C 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어지는 군으로부터 선택되고, 여기서 하나 이상의 H 원자들이 D

또는 F 에 의해 대체될 수도 있고, 여기서 2개 이상의 인접 치환기들 R^7 은 모노- 또는 폴리시클릭 고리 시스템을 서로 형성할 수도 있다;

[0203] R^8 는

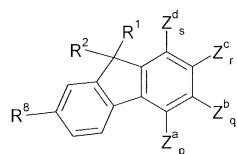
[0204] H, D, $C(=O)R^9$, CN, $Si(R^9)_3$, NO_2 , $N(R^9)_2$, $P(=O)(R^9)_2$, $S(=O)R^9$, $S(=O)_2R^9$, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 2 내지 20 C 원자들을 갖는 알케닐 또는 알키닐 기, 이 때 전술된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼들 R^9 에 의해 치환될 수도 있고 전술된 기들에서의 하나 이상의 CH_2 기들은 $-R^9C=CR^9-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^9)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=NR^9$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^9-$, $P(=O)(R^9)$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있고 전술된 기들에서의 하나 이상의 H 원자들은 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수도 있는 것, 또는 6 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 이는 각 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^9 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 60 방향족 고리 원자들을 갖는 아릴록시 기, 이들은 하나 이상의 라디칼들 R^9 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 60 방향족 고리 원자들을 갖는 아랄킬 기, 이들은 각 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^9 에 의해 치환될 수도 있는 것이다;

[0205] R^9 는 각 발생시에, 동일하게 또는 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^{10}$, CN, $Si(R^{10})_3$, NO_2 , $P(=O)(R^{10})_2$, $S(=O)R^{10}$, $S(=O)_2R^{10}$, $N(R^{10})_2$, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 직쇄 알킬 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 20 C 원자들을 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 2 내지 20 C 원자들을 갖는 알케닐 또는 알키닐 기, 이 때 전술된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼들 R^{10} 에 의해 치환될 수도 있고 전술된 기들에서의 하나 이상의 CH_2 기들은 $-R^{10}C=CR^{10}-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^{10})_2$, $C=O$, $C=S$, $C=NR^{10}$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^{10}-$, $P(=O)(R^{10})$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있고 전술된 기들에서의 하나 이상의 H 원자들은 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수도 있는 것, 또는 5 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 이는 각 경우에 하나 이상의 라디칼들 R^{10} 에 의해 치환될 수도 있는 것, 또는 5 내지 30 방향족 고리 원자들을 갖는 아릴록시 또는 헤테로아릴록시 기, 이는 하나 이상의 라디칼들 R^{10} 에 의해 치환될 수도 있는 것이고, 여기서 2개 이상의 인접 치환기들 R^{10} 은 모노- 또는 폴리시클릭 고리 시스템을 서로 형성할 수도 있다;

[0206] R^{10} 는 H, D, F, 1 내지 20 C 원자들을 갖는 지방족 하이드로카본 라디칼 또는 5 내지 30 C 원자들을 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어지는 군으로부터 선택되고, 여기서 하나 이상의 H 원자들이 D 또는 F 에 의해 대체될 수도 있고, 여기서 2개 이상의 인접 치환기들 R^{10} 은 모노- 또는 폴리시클릭 고리 시스템을 서로 형성할 수도 있다.

[0207] 바람직한 실시형태에서, 본 발명은 일반식 (255) 의 화합물로서, 10 보다 많은 고리 원자들을 갖는 축합 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템들을 함유하지 않는 것을 특징으로 하는 화합물에 관한 것이다.

[0208] 하기 일반식 (256) 의 화합물이 바람직하다.

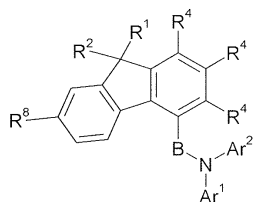


식 (256)

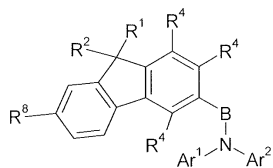
[0209]

[0210] 식중, 위의 정의들이 사용된 기호들에 적용된다.

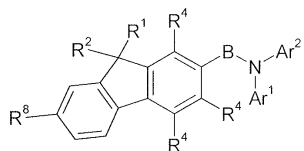
[0211] 하기 일반식 (257) 내지 (260) 의 화합물이 더 바람직하다.



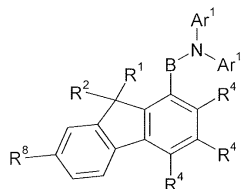
식 (257)



식 (258)



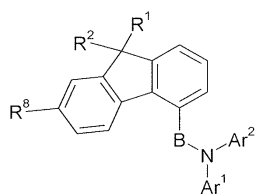
식 (259)



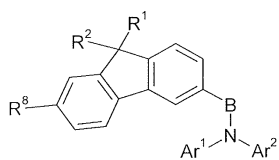
식 (260)

[0212]

[0213] 또한, 하기 일반식 (261) 내지 (264) 의 화합물이 아주 특히 바람직하고, 식 (261) 및 (263) 의 것이 특히 바람직하다.

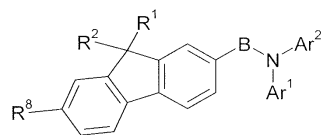


식 (261)

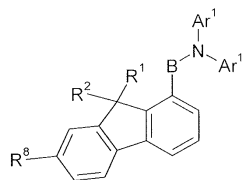


식 (262)

[0214]



식 (263)

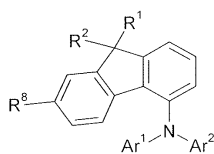


식 (264)

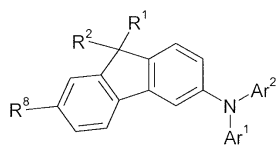
[0215]

[0216] 위의 정의들은 B 그리고 B 의 바람직한 실시형태들에 적용된다.

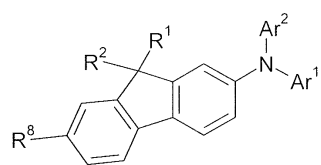
[0217] 또한, 하기 일반식 (265) 내지 (268) 의 화합물이 아주 특히 바람직하고, 식 (265) 및 (267) 의 것이 특히 바람직하다.



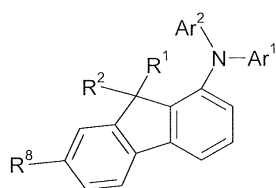
식 (265)



식 (266)



식 (267)



식 (268)

[0218]

[0219] Ar¹ 및 Ar² 는 바람직하게는, 각 발생시에 동일하게 또는 상이하게, 페닐피리딜, 비페닐, 테르페닐 또는 쿼터페

닐 기, 이는 하나 이상의 라디칼들 R^6 에 의해 치환될 수도 있고, 이는 서로 동일하거나 또는 상이할 수도 있고, 이때 Ar^1 에서의 방향족 또는 헤테로방향족 고리들 중 2개가 2가 기 $-O-$, $-S-$, $-Si(R^5)_2-$, $-C(R^5)_2-$ 또는 NR^5 에 의해 브릿지될 수도 있거나 또는 Ar^2 에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리들 중 2개가 2가 기 $-O-$, $-S-$, $-Si(R^5)_2-$, $-C(R^5)_2-$ 또는 NR^5 에 의해 브릿지될 수도 있는데, 브릿지되지 않은 고리들이 바람직하고, Ar^1 로부터의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 Ar^2 로부터의 방향족 또는 헤테로방향족 고리에, 2가 기 $-O-$, $-S-$, $-Si(R^5)_2-$, $-NR^5-$ 또는 $-C(R^5)_2-$ 에 의해 브릿지될 수도 있는 것으로부터 선택되는데, 브릿지되지 않은 기들 Ar^1 및 Ar^2 이 바람직하다.

[0220] 본 발명은 또한 식 (255) 의 화합물의 제조 방법에 관한 것으로서, 여기서 전술된 바처럼, 1 단계 또는 2 단계 부흐발트 커플링이 사용되는 제조 방법에 관한 것이다.

[0221] 본 발명에 따른 화합물들의 바람직한 예들은 식 (149) 내지 (153), (155) 내지 (177), (179) 내지 (254) 를 갖는 것들이다.

[0222] 본 발명에 따른 전술된 식 (1) 의 화합물들 및 식 (255) 의 화합물들은 반응성 이탈기, 이를테면 브로민, 요오드, 염소, 보론산 또는 보론산 에스테르에 의해 치환될 수도 있다. 이것들은, 대응하는 올리고머, 덴드리머 또는 폴리머의 제조를 위한 모노머로서 사용될 수 있다. 적합한 반응성 이탈 기들은, 예를 들어, 브로민, 요오드, 염소, 보론산, 보론산 에스테르, 아민, 말단 C-C 이중 결합 또는 C-C 삼중 결합을 갖는 알케닐 또는 알키닐 기, 옥시란, 옥세탄, 시클로부타, 예를 들어 1,3-양극성 시클로부타를 겪는 기들, 이를테면 예를 들어, 디엔 또는 아지드, 카르복실산 유도체, 알코올 및 실란이다.

[0223] 그러므로 본 발명은 식 (1) 또는 (255) 의 하나 이상의 화합물들을 함유하는 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머로서, 여기서 상기 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머에 대한 결합(들) 이 식 (1) 또는 (255) 에서 임의의 원하는 가능한 위치들에 국부화될 수도 있는 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머에 관한 것이다. 식 (1) 또는 (255) 의 화합물의 링크에 따라, 화합물은 올리고머 또는 폴리머의 측쇄의 구성 성분 또는 주쇄의 구성 성분이다. 본 발명의 의미에서 올리고머는 적어도 3개의 모노머 단위들로부터 구축되는 화합물을 의미하는 것으로 받아들여진다. 본 발명의 의미에서 폴리머는 적어도 10개의 모노머 단위들로부터 구축되는 화합물을 의미하는 것으로 받아들여진다. 본 발명에 따른 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머는 공액, 부분적으로 공액 또는 비공액될 수도 있다. 본 발명에 따른 올리고머 또는 폴리머는 선형, 분지형 또는 수지형일 수도 있다. 선형 방식에서 링크된 구조들에서, 식 (1) 또는 (255) 의 단위들은 서로 직접 링크될 수도 있거나 또는 그것들은 서로 2가 기를 통해, 예를 들면, 치환 또는 비치환의 알킬렌 기를 통해, 헤테로원자를 통해 또는 2가 방향족 또는 헤테로방향족 기를 통해 링크될 수도 있다. 분지형 및 수지형 구조들에서, 예를 들면 식 (1) 또는 (255) 의 3개 이상의 단위들은 3가 또는 다가 기를 통해, 예를 들면 3가 또는 다가 방향족 또는 헤테로방향족 기를 통해 링크되어 분지형 또는 수지형 올리고머 또는 폴리머를 형성할 수도 있다.

[0224] 식 (1) 또는 (255) 의 화합물들에 대해 전술된 것과 동일한 선호들이 올리고머, 덴드리머 및 폴리머에서 식 (1) 또는 (255) 의 반복 단위 (recurring unit) 들에 적용된다.

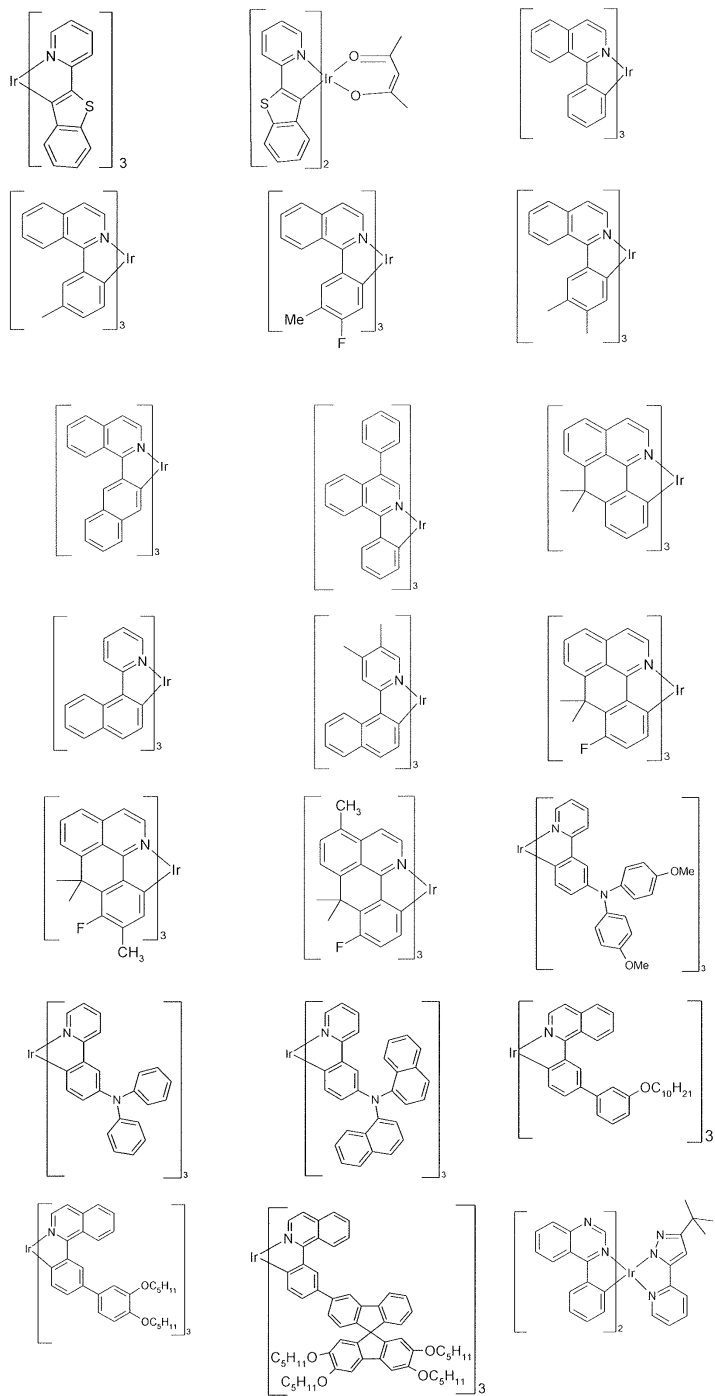
[0225] 올리고머 또는 폴리머의 제조를 위해, 대응하는 모노머 들은 추가의 모노머 들과 동중 중합 (homopolymerise) 또는 공중합 (copolymerise) 된다. 적합하고 바람직한 코모노머들은 (예를 들어 EP 842208 또는 WO 2000/22026 에 따른) 플루오렌, (예를 들어 EP 707020, EP 894107 또는 WO 2006/ 061181에 따른) 스피로비플루오렌, (예를 들어 WO 1992/ 18552에 따른) 파라-페닐렌, (예를 들어 WO 2004/070772 또는 WO 2004/113468에 따른) 카르바졸, (예를 들어 EP 1028136 에 따른) 티오펜, (예를 들어 WO 2005/014689 또는 WO 2007/006383에 따른) 디하이드로페난트렌, (예를 들어 WO 2004/041901 또는 WO 2004/113412 에 따른) 시스- 및 트랜스-인테노플루오렌, (예를 들어 WO 2005/040302에 따른) 케톤, (예를 들어 WO 2005/104264 또는 WO 2007/017066 에 따른) 페난트렌 또는 또한 복수의 이들 단위들로부터 선택된다. 폴리머, 올리고머 및 덴드리머는 보통 또한 추가의 단위들, 예를 들어 방출 (형광 또는 인광) 단위들, 이를테면 예를 들어, (예를 들어 WO 2007/068325에 따른) 비닐트리아릴아민 또는 (예를 들어 WO 2006/003000 에 따른) 인광 금속 착물, 및/또는 전하-수송 단위들, 특히 트리아릴아민에 기초한 것들을 함유한다.

[0226] 본 발명에 따른 폴리머, 올리고머 및 덴드리머는 유리한 특성들, 특히 장수명, 고효율 및 양호한 색좌표를 갖는

다.

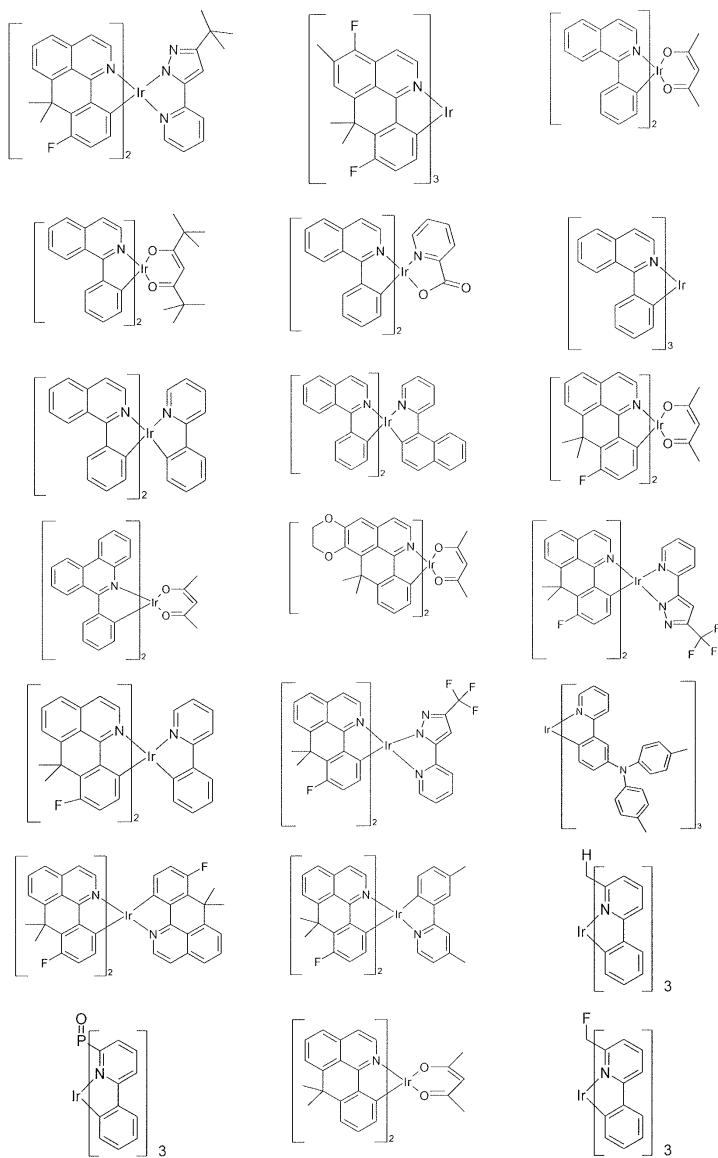
- [0227] 본 발명에 따른 폴리머 및 올리고머는 일반적으로 하나 이상의 타입들의 모노머의 중합에 의해 제조되고, 이들 중 적어도 하나의 모노머는 폴리-머에서 식 (1) 또는 (255) 의 반복 단위들을 초래한다. 적합한 중합 반응은 당업자에게 알려져 있고 문헌에 설명되어 있다. C-C 또는 C-N 링크들을 생성하는 특히 적합하고 바람직한 중합 반응들은 하기와 같다:
- [0228] (A) SUZUKI 중합;
- [0229] (B) YAMAMOTO 중합;
- [0230] (C) STILLE 중합; 및
- [0231] (D) HARTWIG-BUCHWALD 중합.
- [0232] 이들 방법들에 의해 중합이 수행될 수 있는 방식 및 다음으로 폴리머들이 반응 매질로부터 분리되고 정화될 수 있는 방식은 당업자에게 알려져 있고 문헌, 예를 들면, WO 2003/048225, WO 2004/037887 및 WO 2004/037887 에 자세히 설명되어 있다.
- [0233] 따라서, 본 발명은 또한, 본 발명에 따른 폴리머, 올리고머 및 덴드리머의 제조 방법으로서, SUZUKI 중합, YAMAMOTO 중합, STILLE 중합 또는 HARTWIG-BUCHWALD 중합에 의해 제조되는 것을 특징으로 하는 제조 방법에 관한 것이다. 본 발명에 따른 덴드리머들은 당업자에게 알려진 프로세스에 의해 또는 이와 유사하게 제조될 수 있다. 적합한 프로세스들은, 예를 들면, Frechet, Jean M. J.; Hawker, Craig J., "Hyper-branched polyphenylene and hyperbranched polyesters: new soluble, three-dimensional, reactive polymers", *Reactive & Functional Polymers* (1995), 26(1-3), 127-36; Janssen, H. M.; Meijer, E. W., "The synthesis and characterization of dendritic molecules", *Materials Science and Technology* (1999), 20 (Synthesis of Polymers), 403-458; Tomalia, Donald A., "Dendrimer molecules", *Scientific American* (1995), 272(5), 62-6, WO 2002/067343 A1 and WO 2005/026144 A1과 같은 문헌에 기재되어 있다.
- [0234] 본 발명에 따른 화합물, 폴리머, 올리고머 및 덴드리머는 전자 디바이스에서 사용되는 다른 유기 기능성 재료와 조성물들로서 채용될 수 있다. 다수의 가능한 유기 기능성 재료들이 종래 기술로부터 당업자에게 알려져 있다. 그러므로 본 발명은 또한 본 발명에 따른 식 (255) 의 하나 이상의 화합물들 또는 본 발명에 따른 적어도 하나의 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머, 및 형광 방출체, 인광 방출체, 호스트 재료, 매트릭스 재료, 전자 수송 재료, 전자 주입 재료, 정공 도체 재료, 정공 주입 재료, 전자 차단 재료 및 정공 차단 재료로 이루어지는 군으로부터 선택된 적어도 하나의 추가 유기 기능성 재료를 포함하는 조성물에 관한 것이다.
- [0235] 예를 들어, 스핀 코팅 또는 인쇄 프로세스들에 의해, 액상으로부터 화합물의 프로세싱을 위해, 본 발명에 따른 화합물들의 제제 (formulation) 들이 필요하다. 이들 제제들은, 예를 들어, 용액, 디스퍼션 (dispersion) 또는 미니-에멀전 (mini-emulsion) 일 수 있다. 이 목적을 위해 2개 이상의 용매들의 혼합물들을 이용하는 것이 바람직할 수도 있다. 적합하고 바람직한 용매들은, 예를 들어, 톨루엔, 아니솔, o-, m- 또는 p-크실렌, 메틸 벤조에이트, 디메틸아니솔, 메시틸렌, 테트라린, 베라트롤, THF, 메틸-THF, THP, 클로로벤젠, 디옥산 또는 이들 용매들의 혼합물이다.
- [0236] 그러므로 본 발명은 또한, 식 (1) 또는 (255) 의 적어도 하나의 단위를 함유하는 본 발명에 따른 적어도 하나의 화합물, 폴리머, 올리고머, 또는 덴드리머, 및 적어도 하나의 용매, 바람직하게는 유기 용매를 포함하는 제제, 특히 용액, 디스퍼션 또는 미니에멀전에 관한 것이다. 이러한 타입의 용액들이 제조될 수 있는 방식은 당업자에게 알려져 있고 예를 들면, WO 2002/072714, WO 2003/019694 및 거기에 인용된 문헌에 기재되어 있다.
- [0237] 본 발명에 따른 화합물들은 전자 디바이스, 특히 유기 전계 발광 디바이스 (예를 들어, OLED 또는 OLEC) 들에서의 사용에 적합하다. 치환에 따라, 화합물들은 상이한 기능 (function) 들 및 층들에서 채용된다.
- [0238] 그러므로 본 발명은 또한, 전자 디바이스에서의 식 (255) 의 화합물의 사용 그리고 식 (255) 의 하나 이상의 화합물들을 포함하는 전자 디바이스들 그 자체에 관한 것이다. 전자 디바이스들은 여기에서 바람직하게는 유기 집적 회로 (OIC), 유기 전계 효과 트랜지스터 (OFET), 유기 박막 트랜지스터 (OTFT), 유기 발광 트랜지스터 (OLET), 유기 태양 전지 (OSC), 유기 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 전계 켄치 디바이스 (OFQD), 유기 발광 전기화학 셀 (OLEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 특히 바람직하게는 유기 전계 발광 디바이스들 (OLED 및 OLEC) 로 이루어지는 군으로부터 선택된다.

- [0239] 본 발명은, 위에서 언급된 바처럼, 식 (255)의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전자 디바이스들에 관한 것이다. 전자 디바이스들은 여기에서, 바람직하게는 위에 언급된 디바이스들로부터 선택된다. 애노드, 캐소드 및 적어도 하나의 방출 층을 포함하고, 방출 층, 정공 수송 층 또는 또 다른 층일 수도 있는 적어도 하나의 유기 층이 식 (255)의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 디바이스 (OLED)가 특히 바람직하다.
- [0240] 캐소드, 애노드 및 방출 층 이외에, 유기 전계 발광 디바이스는 또한 추가 층들을 포함할 수도 있다. 이것들은, 예를 들어, 각 경우에 하나 이상의 정공 주입 층들, 정공 수송 층들, 정공 차단 층들, 전자 수송 층들, 전자 주입 층들, 전자 차단 층들, 여기자 차단 층들, 중간층들, 전하 생성 층들 (IDMC 2003, Taiwan; Session 21 OLED (5), T. Matsumoto, T. Nakada, J. Endo, K. Mori, N. Kawamura, A. Yokoi, J. Kido, Multiphoton Organic EL Device Having Charge Generation Layer) 및/또는 유기 또는 무기 p/n 접합들로부터 선택된다. 하지만, 이들 층들의 각각은 반드시 존재할 필요는 없고 층들의 선택은 항상 사용되는 화합물 그리고 특히 또한 전계 발광 디바이스가 형광인지 또는 인광인지에 의존한다는 것이 지적되어야 한다.
- [0241] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 디바이스는 복수의 방출 층들을 포함할 수도 있다. 이 경우에 이들 방출 층들은 특히 바람직하게는 전체로서 380 nm 과 750 nm 사이의 복수의 방출 최대치들을 가지며, 종합적으로 백색 방출을 초래하고, 즉 형광 또는 인광이 가능하고 청색 또는 황색 또는 오렌지색 또는 적색 광을 방출하는 다양한 방출 화합물들이 방출 층들에서 사용된다. 3 층 시스템, 즉 3개 방출 층들을 갖는 시스템이 특히 바람직하고, 여기서 3개 층들은 청색, 녹색 및 오렌지색 또는 적색 방출을 나타낸다 (기본 구조에 대해서는, 예를 들면, WO 2005/011013 참조). 본 발명에 따른 화합물들은 그러한 디바이스들에 있어서 정공 수송 층, 방출 층 및/또는 또 다른 층에 존재할 수도 있다. 백색 광의 생성을 위해, 폭넓은 파장 범위에서 방출하는 개별적으로 사용되는 방출체 화합물이 또한, 컬러에서 방출하는 복수의 방출체 화합물들 대신에 적합할 수도 있다는 것에 유의해야 한다.
- [0242] 본 발명에 따라 바람직하게는, 식 (1) 또는 (255)의 화합물이 하나 이상의 인광 도펀트를 포함하는 유기 전계 발광 디바이스에서 채용된다. 화합물은 여기에서 다양한 층들에서, 바람직하게는 정공 수송 층, 정공 주입 층, 또는 방출 층에서 사용될 수 있다. 하지만, 식 (255)의 화합물은 또한, 하나 이상의 형광 도펀트들을 포함하는 전자 디바이스에서 본 발명에 따라 채용될 수 있다.
- [0243] 용어 인광 도펀트들은 통상적으로, 광 방출이 스핀 금지 천이, 예를 들어, 여기된 트리플 상태 또는 상대적으로 높은 스핀 양자 수를 갖는 상태, 예를 들어 켈렛 상태로부터의 천이에 의해 일어나는 화합물들을 포함한다.
- [0244] 적합한 인광 도펀트 (=삼중항 (triplet) 방출체)는, 특히, 적합한 여기서, 바람직하게는 가시 영역에서, 광을 방출하고 또한 20 초과, 바람직하게는 38 초과 그리고 84 미만, 특히 바람직하게는 56 초과 그리고 80 미만의 원자 번호를 갖는 적어도 하나의 원자를 함유하는 화합물들이다. 사용되는 인광 방출체는 바람직하게는, 구리, 몰리브덴, 텅스텐, 레늄, 루테튬, 오스뮴, 로듐, 이리듐, 팔라듐, 백금, 은, 금 또는 유로퓸을 함유하는 화합물들, 특히 이리듐, 백금 또는 구리를 함유하는 화합물들이다.
- [0245] 본 발명의 목적을 위해, 모든 발광성 이리듐, 백금 또는 구리 착물들은 인광 화합물로 간주된다.
- [0246] 전술된 방출체들의 예들은 출원 WO 00/70655, WO 01/41512, WO 02/02714, WO 02/15645, EP 1191613, EP 1191612, EP 1191614, WO 05/033244, WO 2005/019373 및 US 2005/0258742 에 의해 드러나 있다. 인광 OLED를 위해 종래 기술에 따라 사용되고 유기 전계 발광 디바이스들의 분야의 당업자에게 알려져 있는 모든 인광 착물들이 적합하다. 당업자는 또한, 유기 전계 발광 디바이스에서 식 (1) 또는 (255)의 화합물들과 조합하여 진보성 없이 추가의 인광 착물들을 채용 가능할 것이다.
- [0247] 적합한 인광 방출체 화합물들의 분명한 예들은 또한, 다음 표에 의해 드러난다.

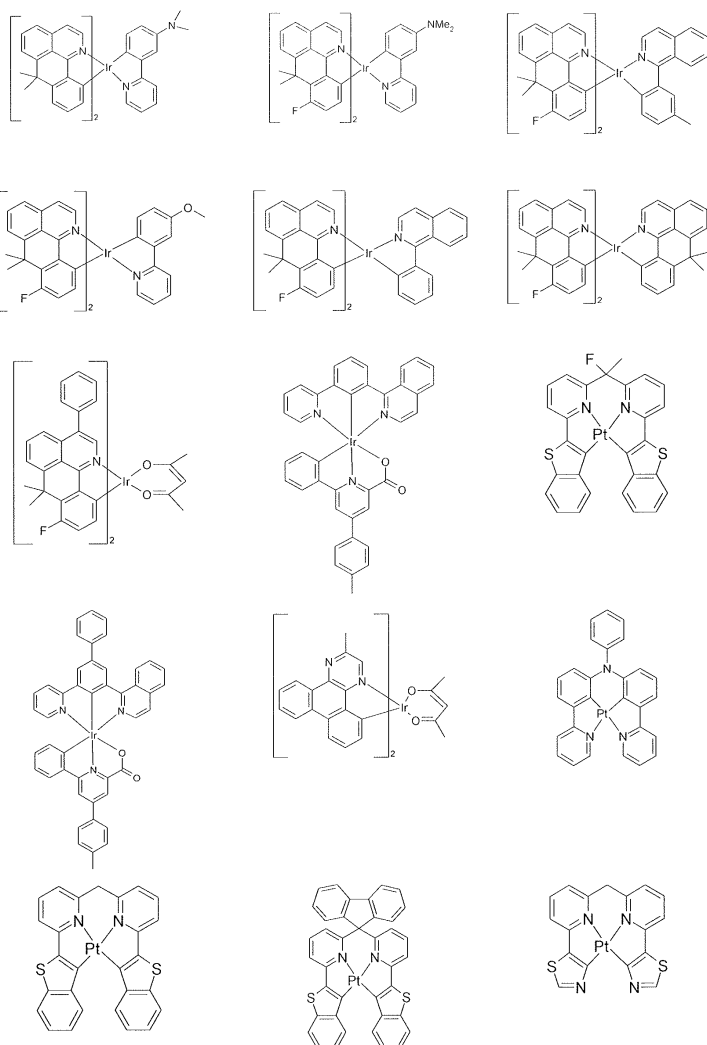


[0248]

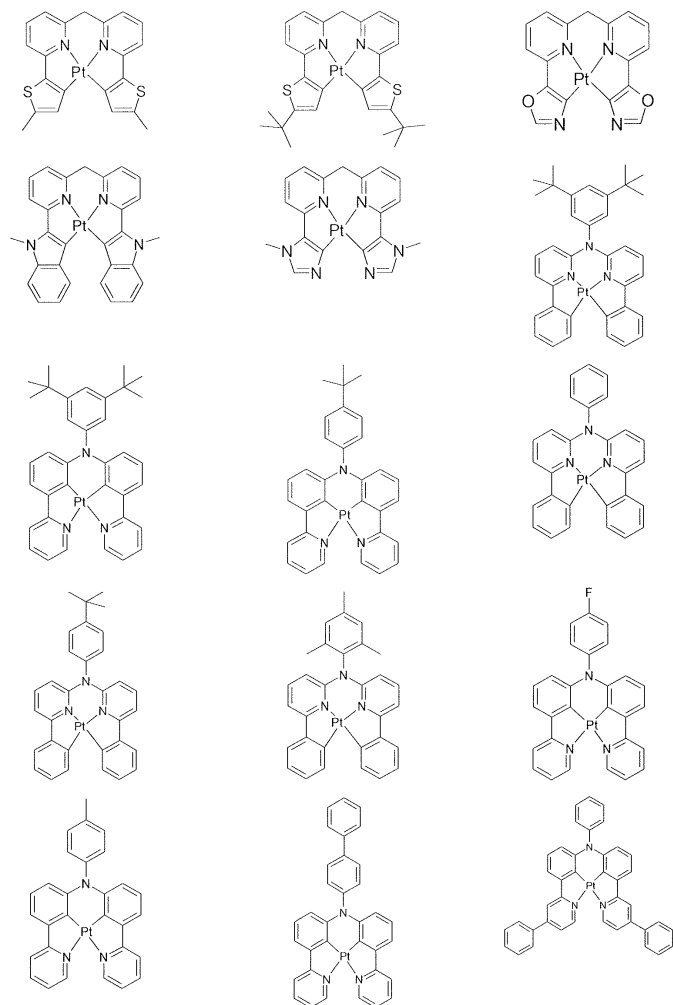
[0249]



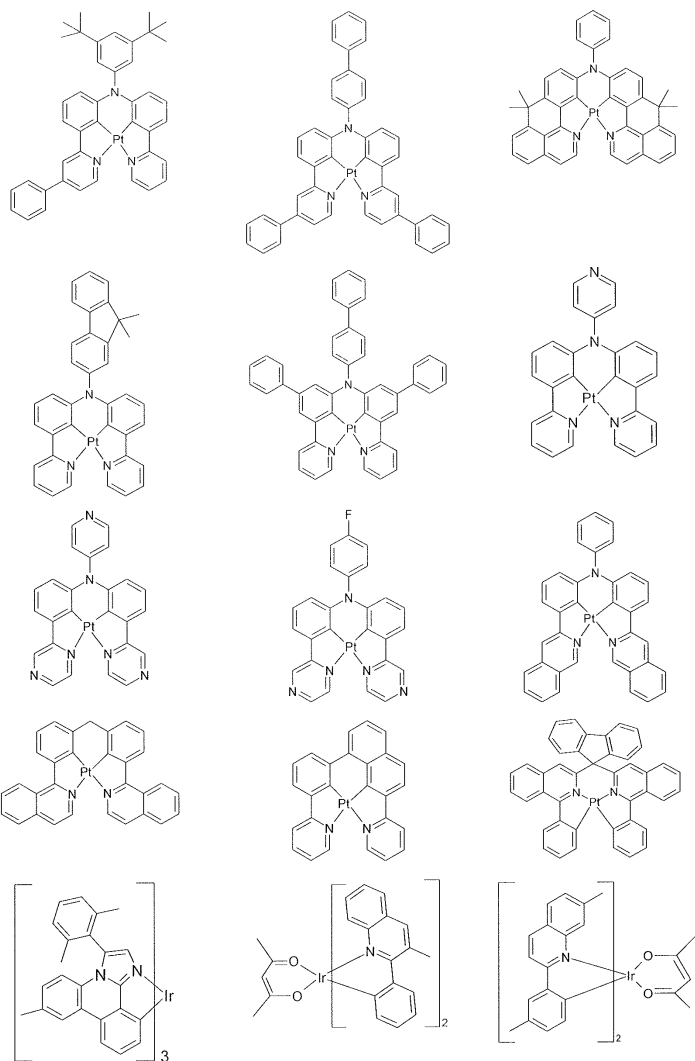
[0250]



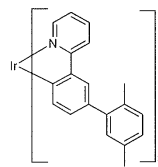
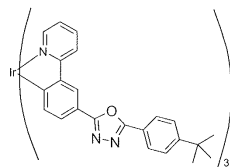
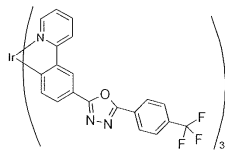
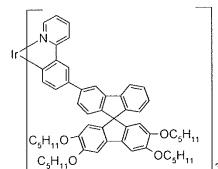
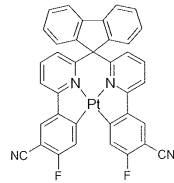
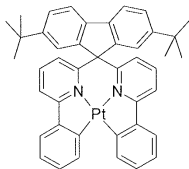
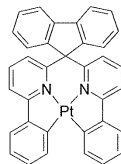
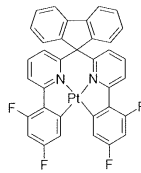
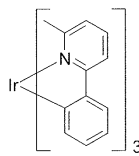
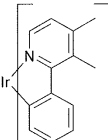
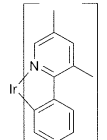
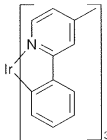
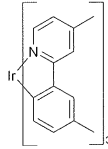
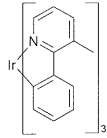
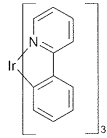
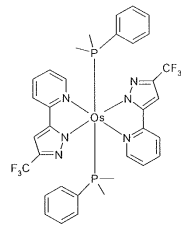
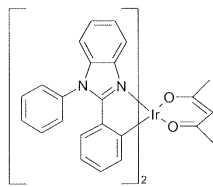
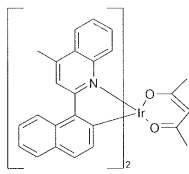
[0251]



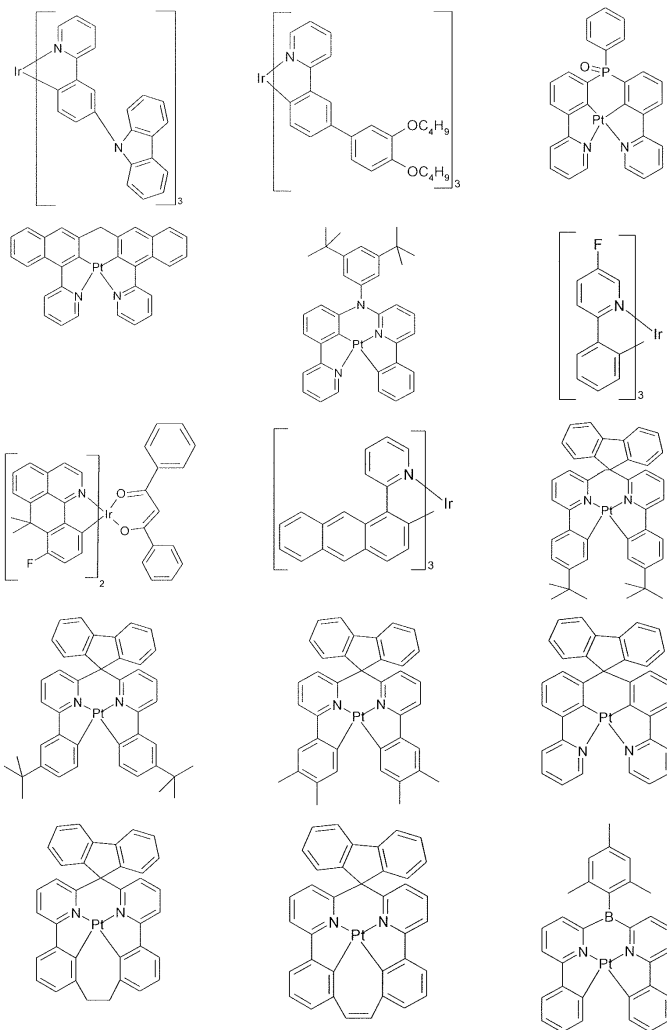
[0252]



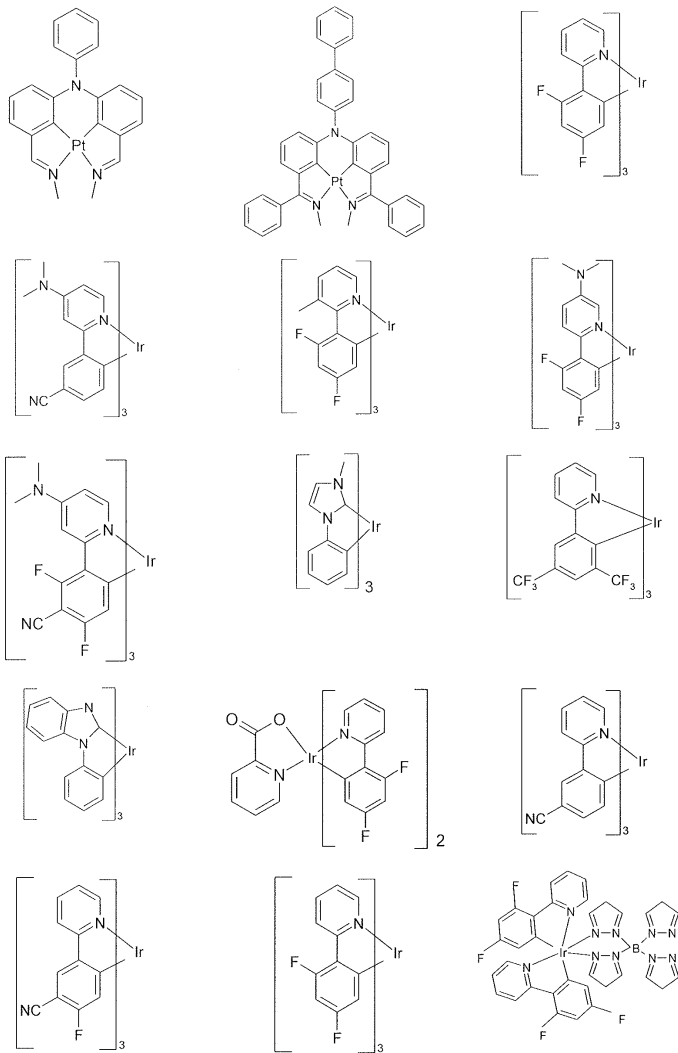
[0253]



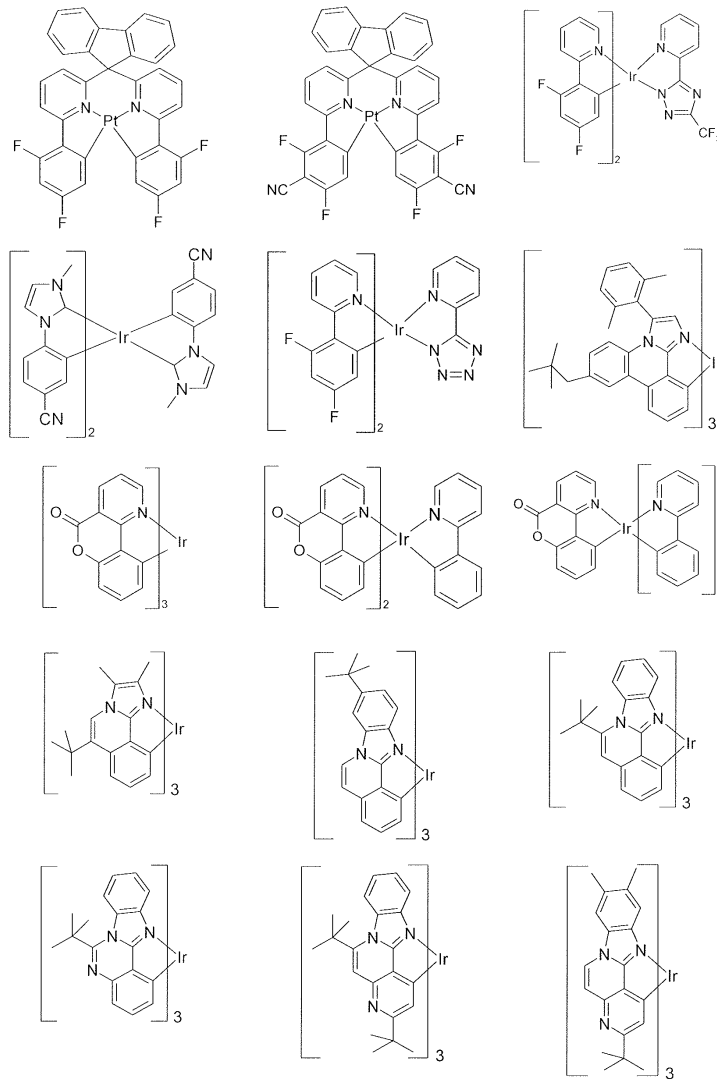
[0254]



[0255]



[0256]



[0257]

[0258]

본 발명의 바람직한 실시형태에서, 일반식 (1) 또는 (255) 의 화합물들은 정공 수송 재료로서 채용된다. 다 음으로 화합물들은 정공 수송 층 및/또는 정공 주입 층에서 채용된다. 본 발명의 의미에서 정공 주입 층은 애노드에 바로 인접한 층이다. 본 발명의 의미에서 정공 수송 층은, 정공 주입 층과 방출 층 사이에 위치한 층이다. 정공 수송 층은 방출 층에 바로 인접할 수도 있다. 식 (1) 또는 (255) 의 화합물들이 정공 수송 재료 또는 정공 주입 재료로서 사용되면, 전자 수용체 화합물로 도핑 (p-도핑), 예를 들어, EP 1476881 또는 EP 1596445 에 기재된 바처럼 F₄-TCNQ, F₆-TNAP 또는 화합물들로 도핑되는 것이 바람직할 수도 있다. 본 발 명의 추가 바람직한 실시형태에서, 식 (1) 또는 (255) 의 화합물은 US 2007/0092755 에 기재된 바처럼 헥사아자 트리페닐렌 유도체와 조합하여 정공 수송 재료로서 사용된다. 여기서 헥사아자트리페닐렌 유도체는 특히 바 람직하게는 분리된 층에서 채용된다.

[0259]

일반식 (1) 또는 (255) 의 화합물들이 정공 수송 층에서 정공 수송 재료로서 채용되면, 화합물은 순수한 재료로 서, 즉 100% 의 비율로, 정공 수송 층에서 채용될 수도 있거나, 또는 하나 이상의 추가 화합물들과 조합하여 정 공 수송 층에서 채용될 수도 있다.

[0260]

본 발명의 추가 실시형태에서, 일반식 (1) 또는 (255) 의 화합물들은 방출 재료로서 채용된다. 이 목적을 위하여, 화합물들은 바람직하게는 방출 층에 채용된다. 일반식 (1) 또는 (255) 의 화합물들의 적어도 하나 이외에, 방출 층은 적어도 하나의 호스트 재료를 더 포함한다. 당업자는 여기에서 알려진 호스트 재료들로 부터 어려움 없이 그리고 진보성 없이 선택 가능할 것이다.

[0261]

본 발명의 추가 실시형태에서, 일반식 (1) 또는 (255) 의 화합물들은 하나 이상의 도펀트들, 바람직하게는 인광 도펀트와 조합하여 매트릭스 재료로서 채용된다.

[0262]

매트릭스 재료 및 도펀트를 포함하는 시스템에서 도펀트는 혼합물에서의 비율이 더 작은 성분을 의미하는 것으

로 받아들여진다. 대응하여, 매트릭스 재료 및 도펀트를 포함하는 시스템에서 매트릭스 재료는 혼합물에서의 비율이 더 큰 성분을 의미하는 것으로 받아들여진다.

[0263] 방출 층에서 매트릭스 재료의 비율은 이 경우에 형광 방출 층들에 대해서는 50.0 과 99.9부피% 사이, 바람직하게는 80.0 과 99.5부피% 사이, 그리고 특히 바람직하게는 92.0 과 99.5부피% 사이이고, 인광 방출 층들에 대해서는 85.0 과 97.0부피% 사이이다.

[0264] 대응하여, 도펀트의 비율은 형광 방출 층들에 대해서는 0.1 과 50.0부피% 사이, 바람직하게는 0.5 과 20.0부피% 사이 그리고 특히 바람직하게는 0.5 과 8.0부피% 사이 그리고 인광 방출 층들에 대해서는 3.0 과 15.0부피% 사이이다.

[0265] 유기 전계 발광 디바이스의 방출 층은 또한, 복수의 매트릭스 재료들 (혼합 매트릭스 시스템들) 및/또는 복수의 도펀트들을 포함하는 시스템들을 포함할 수도 있다. 이 경우에 역시, 도펀트는 일반적으로, 시스템에서의 비율이 더 작은 재료들이고 매트릭스 재료들은 시스템에서의 비율이 더 큰 재료들이다. 하지만, 개개의 경우들에서, 시스템에서의 개개의 매트릭스 재료의 비율은 개개의 도펀트의 비율보다 더 작을 수도 있다.

[0266] 본 발명의 추가 바람직한 실시형태에서, 일반식 (1) 또는 (255) 의 화합물들은 혼합 매트릭스 시스템들의 성분으로서 사용된다. 혼합 매트릭스 시스템들은 바람직하게는 2개 또는 3개의 상이한 매트릭스 재료들, 특히 바람직하게는 2개의 상이한 매트릭스 재료들을 포함한다. 여기에서 2개 재료들 중 하나는 바람직하게는 정공 수송 특성을 갖는 재료이고 다른 하나는 전자 수송 특성을 갖는 재료이다. 하지만, 혼합된 매트릭스 성분들의 원하는 전자 수송 및 정공 수송 특성들은 또한 단일 혼합 매트릭스 성분들에서 주로 또는 완전히 조합될 수도 있고, 여기서 추가의 혼합 매트릭스 성분(들) 은 다른 기능들을 이행한다. 여기에서 2개의 상이한 매트릭스 재료들은 1:50 내지 1:1, 바람직하게는 1:20 내지 1:1, 특히 바람직하게는 1:10 내지 1:1 그리고 아주 특히 바람직하게는 1:4 내지 1:1의 비에서 존재할 수도 있다. 혼합 매트릭스 시스템들은 바람직하게는 인광 유기 전계 발광 디바이스들에서 채용된다. 혼합 매트릭스 시스템들에 관한 보다 정확한 정보는, 특히, 출원 WO 2010/108579 에 주어져 있다.

[0267] 혼합 매트릭스 시스템들은 하나 이상의 도펀트들, 바람직하게는 하나 이상의 인광 도펀트들을 포함할 수도 있다. 일반적으로, 혼합 매트릭스 시스템들은 바람직하게는 인광 유기 전계 발광 디바이스들에서 채용된다.

[0268] 본 발명에 따른 화합물들과 조합하여 혼합 매트릭스 시스템의 매트릭스 성분들로서 사용될 수 있는 특히 바람직한 매트릭스 재료들은, 어떤 타입의 도펀트가 혼합 매트릭스 시스템에 채용되는지에 따라, 아래 나타난 인광 도펀트들을 위한 바람직한 매트릭스 재료들 또는 형광 도펀트들을 위한 바람직한 매트릭스 재료들로부터 선택된다.

[0269] 혼합 매트릭스 시스템들에서의 사용을 위한 바람직한 인광 도펀트들은 위의 표에 나타난 인광 도펀트들이다.

[0270] 본 발명에 따른 디바이스들에서의 관련있는 기능들에서 바람직하게 채용되는 재료들은 아래에 나타나 있다.

[0271] 바람직한 형광 도펀트들은 아릴아민의 부류로부터 선택된다. 본 발명의 의미에서 아릴아민 또는 방향족 아민은, 질소에 직접 결합되는 3개의 치환 또는 비치환의 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템들을 함유하는 화합물을 의미하는 것으로 받아들여진다. 이들 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템들의 적어도 하나는 바람직하게는 축합 고리 시스템이며, 특히 바람직하게는 적어도 14개의 방향족 고리 원자들을 갖는다. 이들의 바람직한 예들은 방향족 안트라센아민, 방향족 안트라센디아민, 방향족 피렌아민, 방향족 피렌디아민, 방향족 크리센아민 또는 방향족 크리센디아민이다. 방향족 안트라센아민은 하나의 디아릴아미노기가 직접 안트라센 기에, 바람직하게는 9-위치에서 결합되는 화합물을 의미하는 것으로 받아들여진다. 방향족 안트라센디아민은 2개의 디아릴아미노기들이 직접 안트라센 기에, 바람직하게는 9,10-위치에서 결합되는 화합물을 의미하는 것으로 받아들여진다. 방향족 피렌아민, 피렌디아민, 크리센아민 및 크리센디아민은 이와 유사하게 정의되고, 여기서 디아릴아미노기들은 바람직하게는 피렌에 1 위치 또는 1,6-위치에서 결합된다.

[0272] 본 발명에 따른 화합물들 이외에, 바람직하게는 형광 도펀트들을 위한 적합한 매트릭스 재료들은 다양한 부류의 물질로부터의 재료들이다. 바람직한 매트릭스 재료들은 올리고아릴렌 (예를 들어 EP 676461에 따른 2,2',7,7'-테트라페닐-스피로비플루오렌 또는 디나프틸안트라센), 특히 축합 방향족 기들을 함유하는 올리고아릴렌, 올리고아릴렌비닐렌 (예를 들어 EP 676461 에 따른 DPVBi 또는 스피로-DPVBi), (예를 들어, WO 2004/081017에 따른) 폴리포달 금속 착물, (예를 들어 WO 2004/058911 에 따른) 정공-전도 화합물, (예를 들어 WO 2005/084081 및 WO 2005/084082 에 따른) 전자 전도 화합물, 특히 케톤, 포스핀 옥사이드, 설폭사이드 등, (예를 들어 WO 2006/048268 에 따른) 아트로프이소머, (예를 들어 WO 2006/117052 에 따른) 보론산 유도체 또

는 (예를 들어 WO 2008/145239 에 따른) 벤즈안트라센의 부류들로부터 선택된다. 특히 바람직한 매트릭스 재료들은 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센 및/또는 피렌 또는 이들 화합물들의 아트로프이소머, 올리고아틸렌 비닐렌, 케톤, 포스핀 옥사이드 및 설폭사이드를 포함하는, 올리고아틸렌의 부류들로부터 선택된다. 아주 특히 바람직한 매트릭스 재료들은 안트라센, 벤즈안트라센, 벤조페난트렌 및/또는 피렌 또는 이들 화합물들의 아트로프이소머를 포함하는, 올리고아틸렌들의 부류들로부터 선택된다. 본 발명의 의미에서 올리고아틸렌은 적어도 3개의 아틸 또는 아틸렌 기들이 서로 결합되는 화합물을 의미하는 것으로 받아들여지도록 의도된다.

[0273] 본 발명에 따른 화합물들 이외에도, 인광 도펀트들을 위해 바람직한 매트릭스 재료들은, 예를 들어 US 2005/0069729 에 따른, 방향족 아민, 특히 트리아릴아민, 카르바졸 유도체 (예를 들어 CBP, N,N-비스카르바졸릴 비페닐) 또는 WO 2005/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527 또는 WO 2008/086851 에 따른 화합물들, 예를 들어 WO 2011/088877 및 WO 2011/128017에 따른 브릿지된 카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 2010/136109 및 WO 2011/000455 에 따른 인데노카르바졸 유도체, 예를 들어 EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160 에 따른 아자카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따른 인돌로카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 2004/093207 또는 WO 2010/006680 에 따른 케톤, 예를 들어 WO 2005/003253 에 따른 포스핀 옥사이드, 설폭사이드 및 설폰, 예를 들어 WO 2007/137725 에 따른 올리고페닐렌, 양극성 (bipolar) 매트릭스 재료, 예를 들어 WO 2005/111172 에 따른 실란, 예를 들어 WO 2006/117052 에 따른 아자보롤 또는 보론 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, 알루미늄 착물, 예를 들어 BA1q, 예를 들어 WO 2010/054729 에 따른 디아자실롤 및 테트라아자실롤 유도체, 예를 들어 WO 2010/054730 에 따른 디아자포스폴 유도체, 및 알루미늄 착물, 예를 들어 BA1q 이다.

[0274] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 디바이스의 정공 주입 또는 정공 수송 층에서 또는 전자 수송 층에서 사용될 수 있는 적합한 전하 수송 재료들은, 예를 들어, Y. Shirota 등의, Chem. Rev. 2007, 107(4), 953-1010 에 개시된 화합물들 또는 종래 기술에 따라 이들 층들에서 채용되는 다른 재료들이다.

[0275] 유기 전계 발광 디바이스의 캐소드는 바람직하게는, 낮은 일함수를 갖는 금속, 예를 들면, 알칼리토 금속, 알칼리 금속, 주족 금속 또는 란타노이드 (예를 들면, Ca, Ba, Mg, Al, In, Mg, Yb, Sm 등) 와 같은 다양한 금속들을 포함하는 금속 합금 또는 다층 구조를 포함한다. 또한, 알칼리 금속 또는 알칼리토 금속 및 은을 포함하는 합금, 예를 들어, 마그네슘 및 은을 포함하는 합금이 적합하다. 다층 구조들의 경우에, 예를 들면, Ag 또는 Al 과 같은, 상대적으로 높은 일함수를 갖는 추가 금속들이 또한 상기 금속들에 추가적으로 사용될 수 있고 이 경우에 예를 들면, Ca/Ag, Mg/Ag 또는 Ag/Ag 와 같은 금속들의 조합이 일반적으로 사용된다. 또한, 금속 캐소드와 유기 반도체 사이에 고 유전 상수를 갖는 재료의 박형 중간층을 도입하는 것이 바람직할 수도 있다. 예를 들어, 알칼리 금속 플루오라이드 또는 알칼리토 금속 플루오라이드뿐만 아니라, 대응하는 옥사이드 또는 카보네이트 (예를 들어, LiF, Li₂O, BaF₂, MgO, NaF, CsF, Cs₂CO₃, 등) 이 이 목적에 적합하다. 또한, 리튬 퀴놀리네이트 (LiQ) 가 이 목적에 사용될 수도 있다. 이 층의 층 두께는 바람직하게는 0.5 과 5 nm 사이이다.

[0276] 애노드는 바람직하게는 높은 일함수를 갖는 재료들을 포함한다. 애노드는 바람직하게는 진공에 대한 4.5 eV 보다 더 큰 일 함수를 갖는다. 한편, 이러한 목적으로, 예를 들면 Ag, Pt 또는 Au와 같은 높은 리독스 포텐셜 (redox potential) 을 갖는 금속들이 적합하다. 다른 한편, 금속/금속 옥사이드 전극들 (예를 들면, Al/Ni/NiO_x, Al/PtO_x) 가 또한 바람직할 수도 있다. 일부 응용들을 위해, 유기 재료 (유기 태양 전지) 의 조사 (irradiation) 또는 광의 커플링 아웃 (OLED, O-레이저) 중 어느 하나를 용이하게 하기 위하여 전극들 중 적어도 하나는 투명하거나 또는 부분적으로 투명해야 한다. 바람직한 애노드 재료들은 여기에서 전도성, 혼합 금속 옥사이드이다. ITO (indium tin oxide) 또는 IZO (indium zinc oxide) 가 특히 바람직하다. 또한, 전도성, 도핑된 유기 재료, 특히 전도성, 도핑된 폴리머가 바람직하다.

[0277] (응용에 따라) 디바이스는 적절히 구조화되며, 콘택트들이 제공되고 최종적으로 실링되는데, 왜냐하면 본 발명에 따른 디바이스들의 수명은 물 및/또는 공기의 존재시에 단축되기 때문이다.

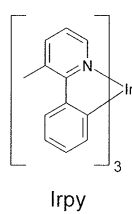
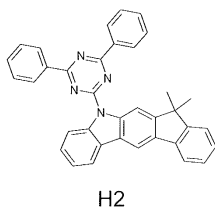
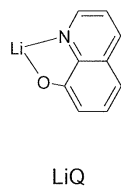
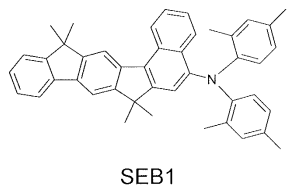
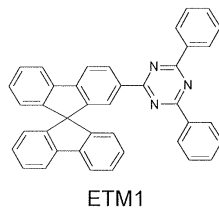
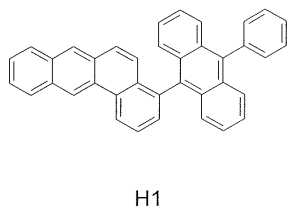
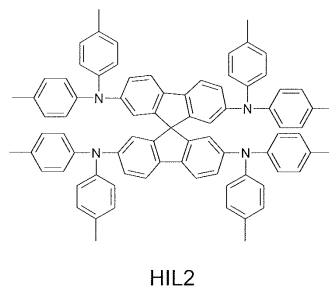
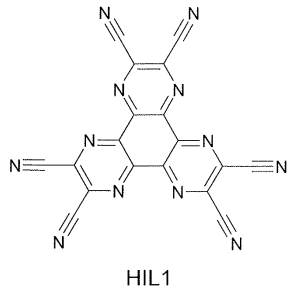
[0278] 바람직한 실시형태에서, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 디바이스는 하나 이상의 층들이 승화 프로세스에 의해 코팅되고, 여기서 재료들은 진공 승화 유닛들에서 10⁻⁵ mbar, 미만, 바람직하게는 10⁻⁶ mbar 미만의 초기 압력에서 기상 증착에 의해 도포되는 것을 특징으로 한다. 하지만, 또한 여기에서 초기 압력은 더욱 더 낮은, 예를 들어 10⁻⁷ mbar 미만이 가능하다.

- [0279] 마찬가지로, 하나 이상의 층들이 OVPD (organic vapour phase deposition) 법에 의해 또는 캐리어 가스 승화의 도움으로 코팅되고, 여기에서 재료들이 10^{-5} mbar 와 1 bar 사이의 압력에서 도포되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 디바이스가 바람직하다. 이 프로세스의 특수한 경우는 OVJP (organic vapour jet printing) 프로세스이고, 여기서 재료들이 직접 노즐을 통해 도포되고 따라서 구조화된다 (예를 들어 M. S. Arnold 등의, Appl. Phys. Lett. **2008**, 92, 053301).
- [0280] 또한, 하나 이상의 층들이 용액으로부터, 이를테면 예를 들어 스핀 코팅에 의해, 또는 임의의 원하는 인쇄법에 의해, 이를테면 예를 들어 스크린 인쇄, 플렉소그래픽 인쇄, 노즐 인쇄 또는 오프셋 인쇄, 그러나 특히 바람직하게는 LITI (광 유도 열 이미징, 열 전사 인쇄) 또는 잉크젯 인쇄에 의해 제조되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 디바이스가 바람직하다. 식 (1) 또는 (255) 의 가용 화합물들이 이 목적을 위해 필요하다. 화합물들의 적합한 치환을 통해 높은 용해도가 달성될 수 있다.
- [0281] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 디바이스의 제조를 위해, 또한, 용액으로부터 하나 이상의 층들을 그리고 승화 프로세스에 의해 하나 이상의 층들을 도포하는 것이 바람직하다.
- [0282] 본 발명에 따르면, 일반식 (1) 또는 (255) 의 하나 이상의 화합물들을 포함하는 전자 디바이스들은 디스플레이들에서, 조명 용도에서의 광원으로서 그리고 의료 및/또는 미용 용도 (예를 들어 광선 요법) 에서의 광원으로서 채용될 수 있다.
- [0283] 일반식 (1) 또는 (255) 의 화합물들을 포함하는 디바이스들은 매우 다용도 방식으로 채용될 수 있다. 따라서, 예를 들어, 일반식 (1) 또는 (255) 의 하나 이상의 화합물들을 포함하는 전계 발광 디바이스들은 텔레비전, 이동 전화, 컴퓨터 및 카메라를 위한 디스플레이들에서 채용될 수 있다. 하지만, 그 디바이스들은 또한 조명 용도들에서 사용될 수 있다. 또한, 일반식 (1) 또는 (255) 의 화합물들의 적어도 하나를 포함하는, 예를 들어, OLED 또는 OLEC 에서의, 전계 발광 디바이스들은 의학 또는 미용 분야에서 광선 요법에 사용될 수 있다. 따라서, 많은 수의 질병들 (건선, 아토피성 피부염, 염증, 여드름, 피부암 등) 이 치료될 수 있거나 또는 피부 주름, 피부 적화 (skin reddening) 및 피부 노화가 방지되거나 또는 감소될 수 있다. 또한, 발광 디바이스들은 음료, 식사 또는 음식을 신선하게 유지하기 위해서 또는 장비 (예를 들어 의료 장비) 를 소독하기 위하여 이용될 수 있다.
- [0284] 본 발명에 따른 화합물들 및 본 발명에 따른 유기 전계 발광 디바이스들은 종래 기술에 비해 다음의 놀라운 이점들에 의해 구별된다:
- [0285] 1. 본 발명에 따른 화합물들은 특히 그들의 높은 정공 이동도 덕분에, 전자 디바이스에서, 이를테면 예를 들어 유기 전계 발광 디바이스에서의 정공 수송 층 또는 정공 주입 층에서의 사용에 아주 적합하다.
- [0286] 2. 본 발명에 따른 화합물들은 상대적으로 낮은 승화 온도, 높은 온도 안정성 및 높은 산화 안정성, 높은 유리 전이 온도 및 낮은 결정성을 갖는데, 이는 예를 들어 용액 또는 기체 상으로부터 가공성, 및 또한 전자 디바이스들에서의 사용 양자 모두에 유리하다.
- [0287] 3. 특히 정공 수송 또는 정공 주입 재료로서 채용되는, 전자 디바이스들에서의 본 발명에 따른 화합물들의 사용은, 높은 효율, 낮은 동작 전압 및 장수명을 가져온다.
- [0288] 본 발명에 설명된 실시형태들의 변형들은 본 발명의 범위내에 속한다는 것이 지적되어야 한다. 본 발명에 개시된 각 피쳐는, 명시적으로 제외되지 않으면, 동일하거나, 동일하게 또는 유사한 목적에 도움이 되는 대안의 피쳐들에 의해 대체될 수 있다. 따라서, 본 발명에 개시된 각 피쳐는, 달리 언급되지 않으면, 일반 계열 (generic series) 의 예로서, 또는 동등 또는 유사 피쳐로서 간주될 것이다.
- [0289] 본 발명의 모든 피쳐들은, 특정 피쳐들 및/또는 단계들이 상호 제외되지 않으면, 임의의 방식으로 서로 조합될 수 있다. 이것은 특히 본 발명의 바람직한 피쳐들에 적용된다. 동일하게, 비본질적인 조합들의 피쳐들은 (조합이 아닌) 따로 사용될 수 있다.
- [0290] 또한, 본 발명의 많은 피쳐들 그리고 특히 바람직한 실시형태들의 피쳐들은, 그것들 자체로 진보성이 있고 단순히 본 발명의 실시형태들의 부분으로서 간주되어서는 안된다는 것이 지적되어야 한다. 이들 피쳐들에 대해, 현재 청구되는 각 발명에 추가적으로 또는 대안적으로 독립적인 보호가 추구될 수도 있다.
- [0291] 본 발명에 개시된 기술적 작용에 관한 교시가 추출될 수 있고 다른 예들과 조합될 수 있다.
- [0292] 본 발명은, 다음의 예들에 의해 보다 상세히 설명되며, 이에 의해 본 발명을 제한하길 원하는 것은 아니다.

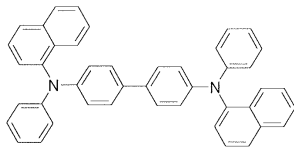
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0293] 실시예

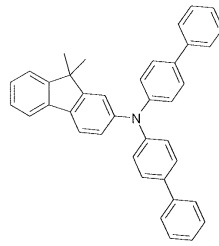
[0294] 재료



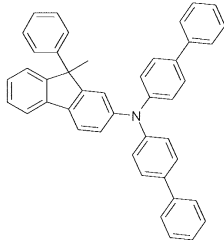
[0295]



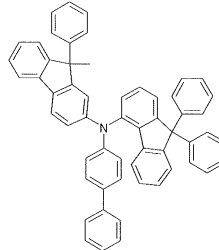
NPB



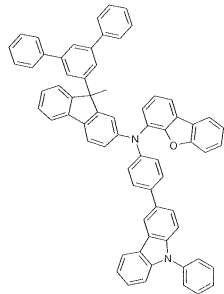
HTMV1



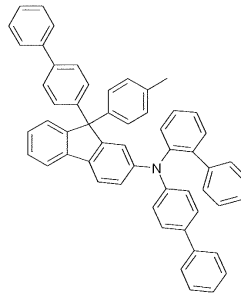
(2-7)



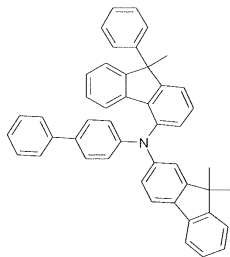
(2-4)



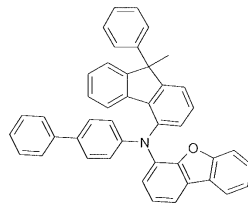
(2-5)



(1-11)



(2-1)

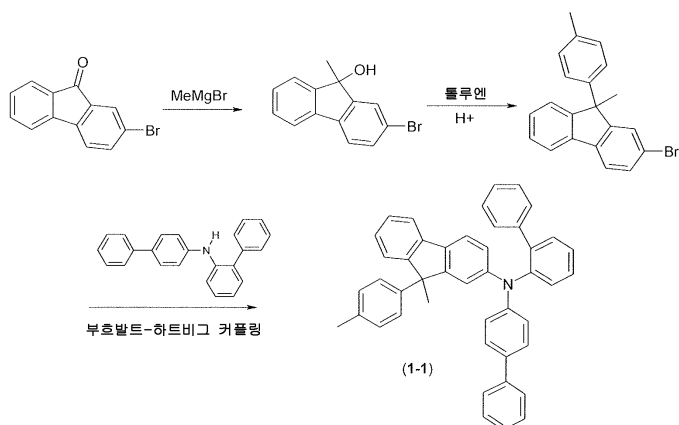


(2-8)

재료들 HIL1, HIL2 (EP 0676461), H1 (WO 2008/145239), ETM1 (WO 2005/053055), SEB1 (WO 2008/006449), LiQ 및 NPB 는 종래 기술로부터 당업자에게 잘 알려져 있다. 화합물 HTMV1 은, 예 1에 나타난 합성과 유사하게 제조될 수 있고, 여기서 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌은 비스비페닐-4-일아민과 부흐발트 반응에서 변환된다. 화합물들 (2-7), (2-4), (2-5), (1-11), (2-1) 및 (2-8) 는 본 발명에 따른다.

실시예 1

화합물 비페닐-2-일비페닐-4-일-(9-메틸-9-p-톨릴-9H-플루오렌-2-일)아민 (1-1) 및 화합물 (1-2) 내지 (1-11) 의 합성



[0301]

[0302]

2-브로모-9-메틸-9H-플루오렌

[0303]

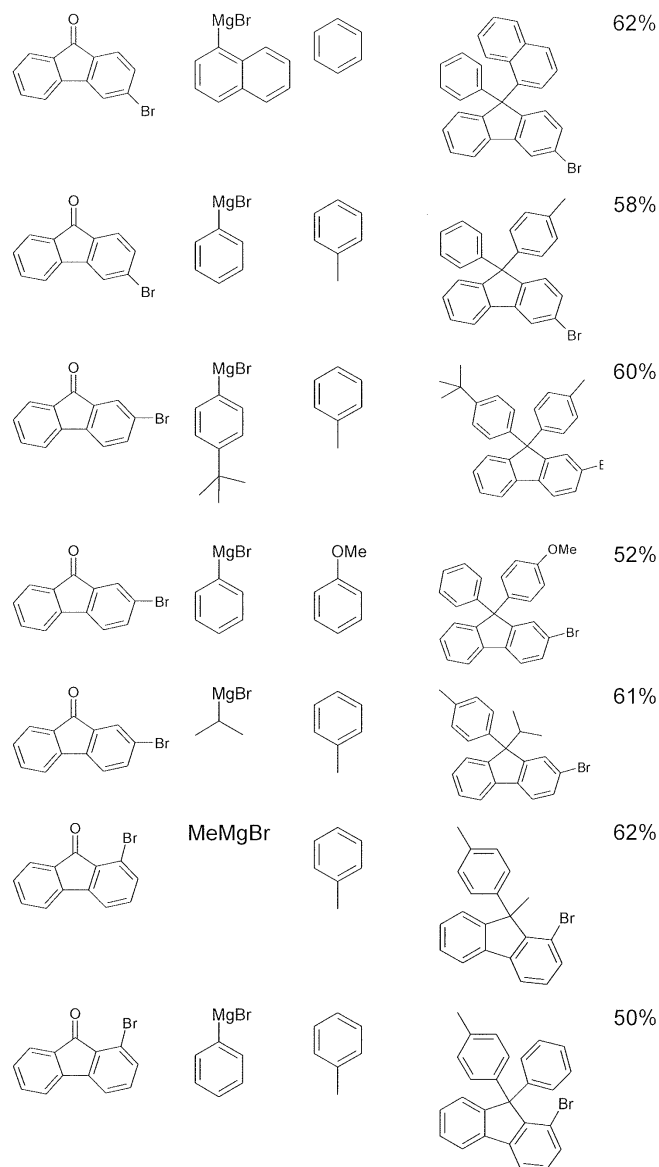
40 g (154 mmol)의 2-브로모-9H-플루오렌이 가열에 의해 건조된 플라스크에서 500 ml의 건조된 THF에 용해된다. 그 용액은 N_2 로 포화되고, 15.0 g (170 mmol)의 세륨(III) 클로라이드가 첨가된다. 맑은 용액이 $-10^\circ C$ 로 냉각되고 다음으로 121 ml (170 mmol)의 1.4M 메틸마그네슘 브로마이드 용액이 첨가된다. 반응 혼합물은 실온으로 천천히 가온되고 NH_4Cl (500 ml)를 사용하여 담금질(quick)된다. 그 혼합물은 후속하여 에틸 아세테이트와 물 사이에 배치되고, 유기 상(phase)이 물로 3번 세척되고, Na_2SO_4 상에서 건조되고 로타리 증발기에서 증발된다. 60 ml의 톨루엔이 증발된 용액에 첨가된다. 뱃치(batch)는 $50^\circ C$ 로 가열되고, 27.2 ml의 트리플루오로메탄설폰 산(308 mmol)이 후속하여 적하(dropwise) 첨가된다. 1시간 후에, 반응 혼합물은 실온으로 냉각되고 1 l의 물 속에 부어진다. 그 혼합물은 톨루엔과 물 사이에 배치되고, 유기 상(phase)이 물로 3번 세척되고, Na_2SO_4 상에서 건조되고 로타리 증발기에서 증발된다. (헵탄:에틸 아세테이트, 1:1)로 실리카 겔을 통해 조생성물(crude product)의 여과는 32 g(이론의 60%)를 제공한다.

[0304]

다음의 브롬화 화합물들이 유사하게 조제된다:

출발 재료 1	출발 재료 2	출발 재료 3	생성물	수율
				55%

[0305]



[0306]

[0307]

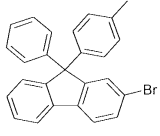
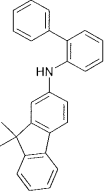
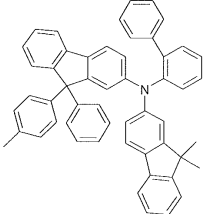
[0308] 비페닐-2-일비페닐-4-일-(9-메틸-9-*p*-톨릴-9H-플루오렌-2-일)아민 (1-1)

[0309]

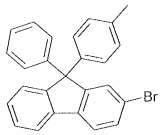
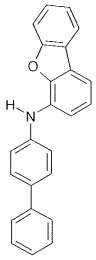
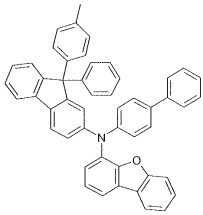
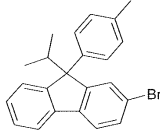
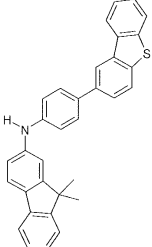
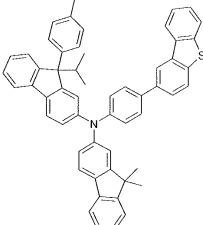
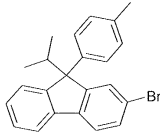
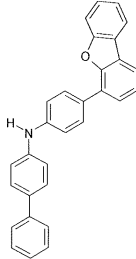
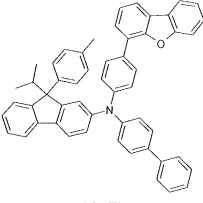
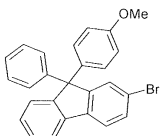
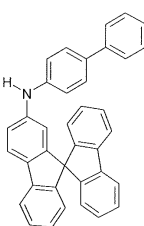
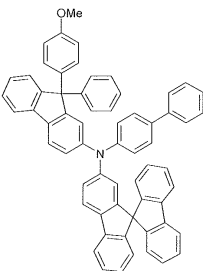
27.6 g 의 비페닐-2-일비페닐-4-일아민 (85.9 mmol), 30.0 g 의 2-브로모플루오렌 (85.9 mmol) 가 500 ml 의 톨루엔에서 용해된다: 그 용액은 탈가스되고 N₂ 로 포화된다. 다음으로, 4.3 ml (4.3 mmol) 의 1 M 트리-테르트-부틸-포스핀 용액 및 0.48 g (2.15 mmol) 의 팔라듐(II) 아세테이트가 첨가된다. 20.6 g 의 나트륨 테르트-부톡사이드 (214.7 mmol) 가 후속하여 첨가된다. 반응 혼합물이 보호성 분위기 (protective atmosphere) 하에서 5 h 동안 비등에서 가열된다. 그 혼합물은 후속하여 톨루엔과 물 사이에 배치되고, 유기 상 (phase) 이 물로 3번 세척되고, Na₂SO₄ 상에서 건조되고 로타리 증발기에서 증발된다. 톨루엔으로 실리카 겔을 통해 조생성물의 여과 후에, 잔류하는 잔류물이 헵탄/톨루엔으로부터 재결정화되고 최종적으로 고진공에서 승화되고, 순도는 99.9% 이다. 수율은 39.5 g (이론의 78%) 이다.

[0310]

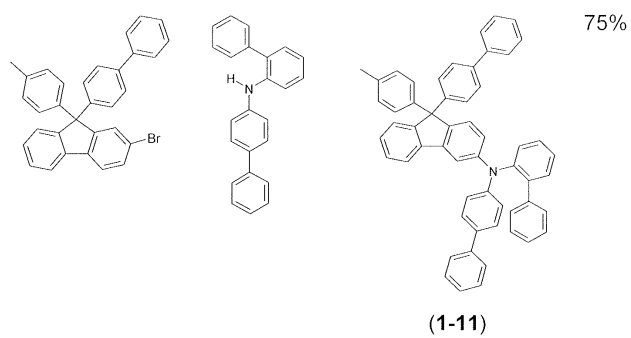
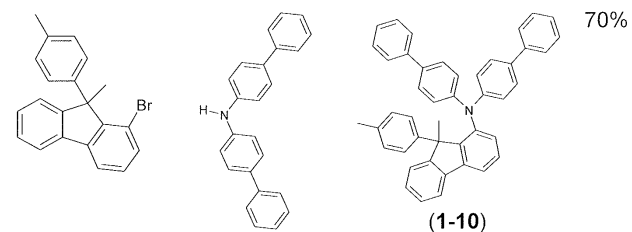
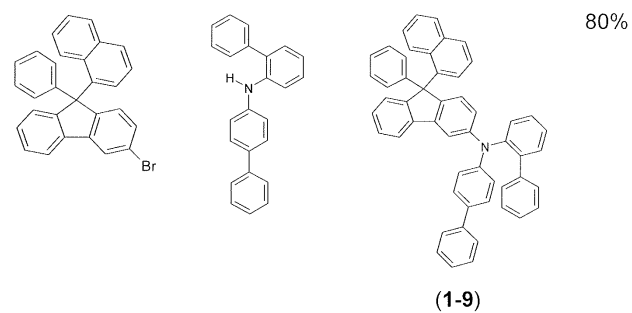
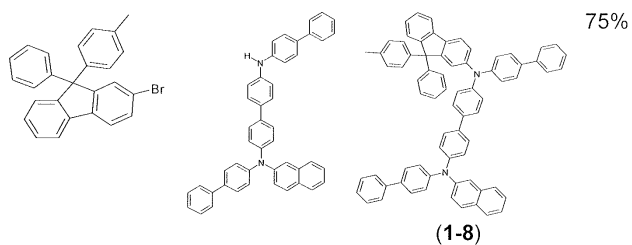
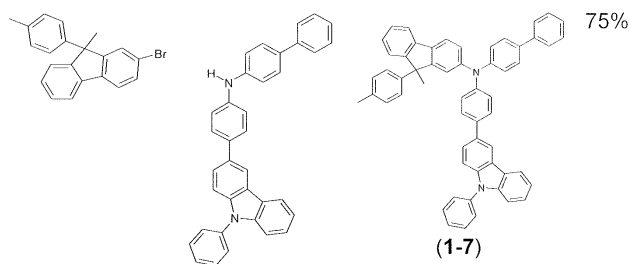
화합물 (1-2) 내지 (1-11) 가 유사하게 제조된다:

출발 재료 1	출발 재료 2	생성물	수율
			78%

[0311]

(1-2)			
			92%
(1-3)			
			88%
(1-4)			
			85%
(1-5)			
			80%
(1-6)			

[0312]



[0313]

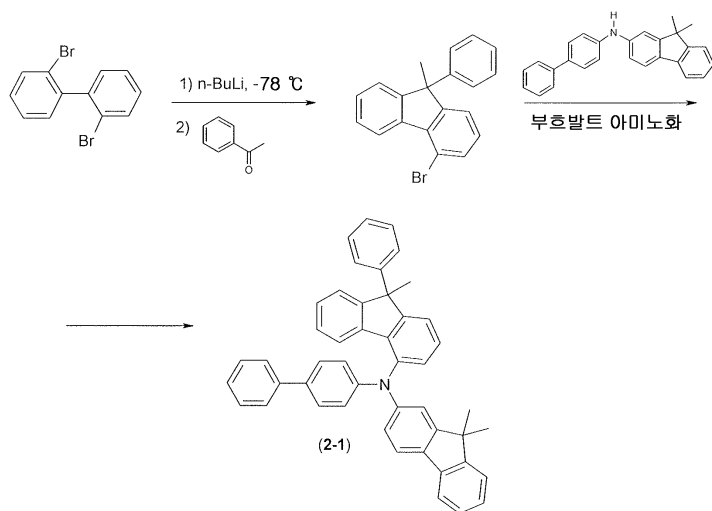
[0314]

[0315]

[0316]

실시예 2

화합물 비페닐-4-일-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)-(9-메틸-9-페닐-9H-플루오렌-4-일)아민 (2-1) 및 화합물들 (2-2) 내지 (2-8) 의 합성



[0317]

[0318]

4-브로모-9-메틸-9H-페닐-9H-플루오렌

[0319]

30 g (94 mmol)의 2,2'-디브로모비페닐이 가열에 의해 건조된 플라스크에서 200 ml의 건조된 THF에 용해된다. 반응 혼합물은 -78°C로 냉각된다. 헥산 (94 mmol)에서 n-BuLi의 2.5 M 용액 37.7 ml가 이 온도에서 천천히 적하 첨가된다 (지속시간: 약 1 h). 배치는 추가 1 h 동안 -70°C에서 교반된다. 11.1 ml의 아세트페논 (94 mmol)이 후속하여 100 ml의 THF에 용해되고 -70°C에서 적하 첨가된다. 첨가가 완료될 때, 반응 혼합물은 천천히 실온으로 가온되고, NH₄Cl를 이용하여 담금질되고 후속하여 로타리 증발기에서 증발된다. 300 ml의 아세트 산이 증발된 용액에 조심스럽게 첨가되고, 50 ml의 발연 (fuming) HCl이 후속하여 첨가된다. 배치는 75°C로 가열되고 여기에서 6 h 동안 유지된다. 백색 고체가 이 시간 동안 석출된다. 다음으로 배치는 실온으로 냉각되고, 석출된 고체는 석션으로 걸러내지고 메탄올로 린싱된다. 잔류물은 진공에서 40°C로 건조된다. 수율은 25.3 g (75 mmol) (이론의 80%)이다

[0320]

다음의 브롬화 화합물들이 유사하게 제조된다:

출발 재료 1	출발 재료 2	생성물	수율
			78%
			80%
			87%

[0321]

[0322]

[0323]

비페닐-4-일-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)-(9-메틸-9H-페닐-9H-플루오렌-4-일)아민 (2-1)

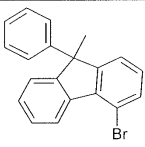
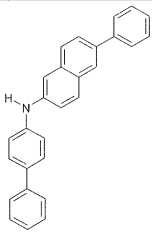
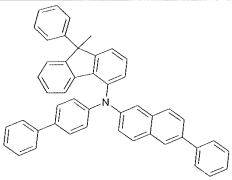
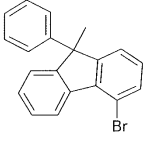
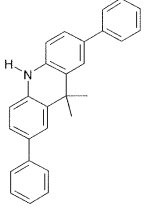
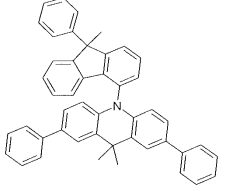
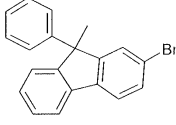
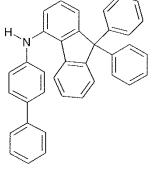
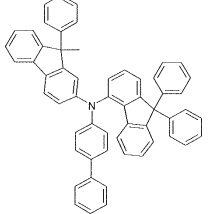
[0324]

17.8 g의 비페닐-2-일비페닐-4-일아민 (49.4 mmol), 18.2 g의 2-브로모-(9-메틸-9H-플루오렌) (54.3 mmol)가 400 ml의 톨루엔에서 용해된다: 그 용액은 탈가스되고 N₂로 포화된다. 다음으로, 2.96 ml (2.96 mmol)의 트리-테르트-부틸포스핀 및 0.33 g (1.48 mmol)의 팔라듐(II) 아세테이트가 첨가되고, 9.8 g의 나트륨 테르트-부톡사이드 (98.8 mmol)가 후속하여 첨가된다. 반응 혼합물이 보호성 분위기하에서 3 h 동안 비등에서 가열된다. 그 혼합물은 후속하여 톨루엔과 물 사이에 배치되고, 유기 상이 물로 3번 세척되고,

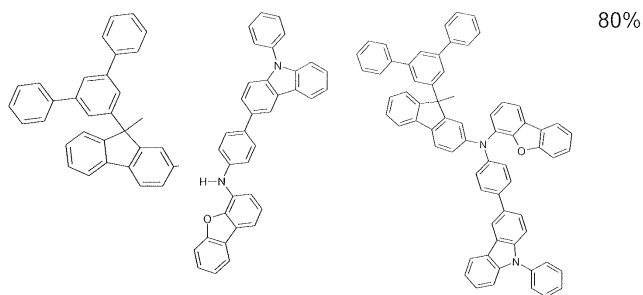
Na₂SO₄ 상에서 건조되고 로타리 증발기에서 증발된다. 톨루엔으로 실리카 겔을 통해 조생성물의 여과 후에, 잔류하는 잔류물이 헵탄/톨루엔으로부터 재결정화되고 최종적으로 고진공에서 승화되고, 순도는 99.9% 이다. 수율은 24.3 g (이론의 80%) 이다.

[0325]

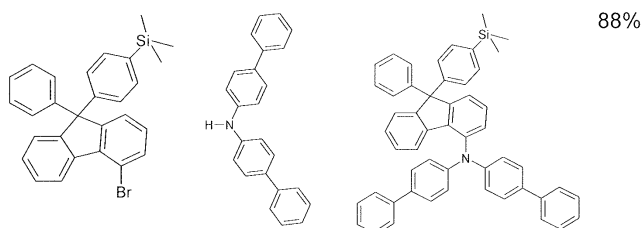
화합물 (2-2) 내지 (2-8) 가 유사하게 제조된다:

출발	출발 재료 2	생성물	수율
재료 1			
		 (2-2)	78%
		 (2-3)	75%
		 (2-4)	80%

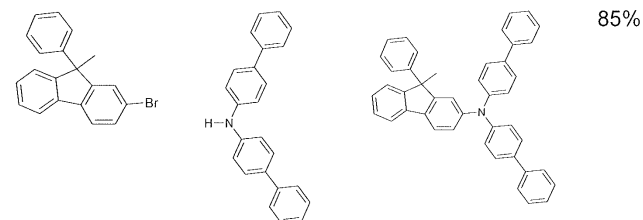
[0326]



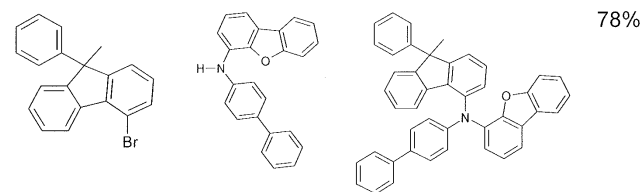
(2-5)



(2-6)



(2-7)



(2-8)

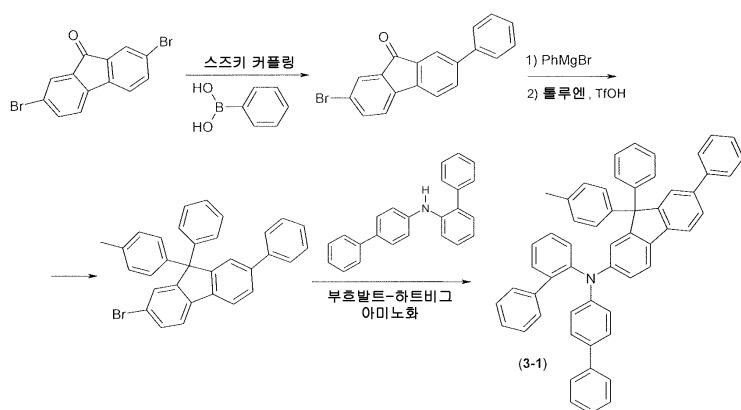
[0327]

[0328]

실시예 3

[0329]

화합물 비페닐-4-일비페닐-2-일-(7,9-디페닐-9-p-톨릴-9H-플루오렌-2-일)아민 (3-1) 및 화합물들 (3-2) 내지 (3-4) 의 합성



[0330]

[0331]

2-브로모-7-페닐플루오렌-9-온

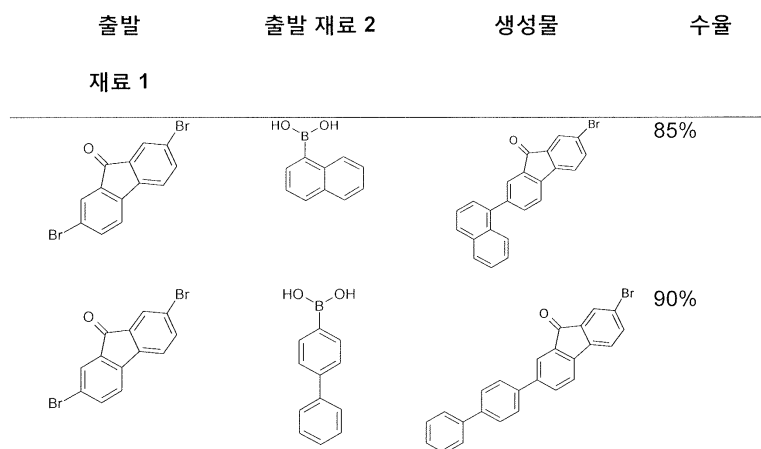
[0332]

21.6 g (178 mmol) 의 페닐보론 산, 60 g (178 mmol) 의 2,7-디브로모플루오렌은 800 ml 의 디메톡시에탄 및 265 ml 의 2 M 나트륨 카보네이트 용액 (533 mmol) 에 현탁된다. 6.154 g (5 mmol) 의 테트라키스-(트리페닐포스핀)팔라듐이 이 현탁액 (suspension) 에 첨가되고, 반응 혼합물이 18 h 동안 리플럭스 (reflux) 하에서

가열된다. 반응 혼합물의 냉각 후에, 유기 상이 분리되고, 실리카 겔을 통해 여과되고, 100 ml 의 물로 3회 세척되고 후속하여 증발 건조된다. 톨루엔으로 실리카 겔을 통한 조생성물의 여과는 38.6 g (85%) 의 2-브로모-7-페닐플루오렌-9-온을 제공한다.

[0333]

다음의 브로마 화합물들이 유사하게 제조된다:



[0334]

[0335]

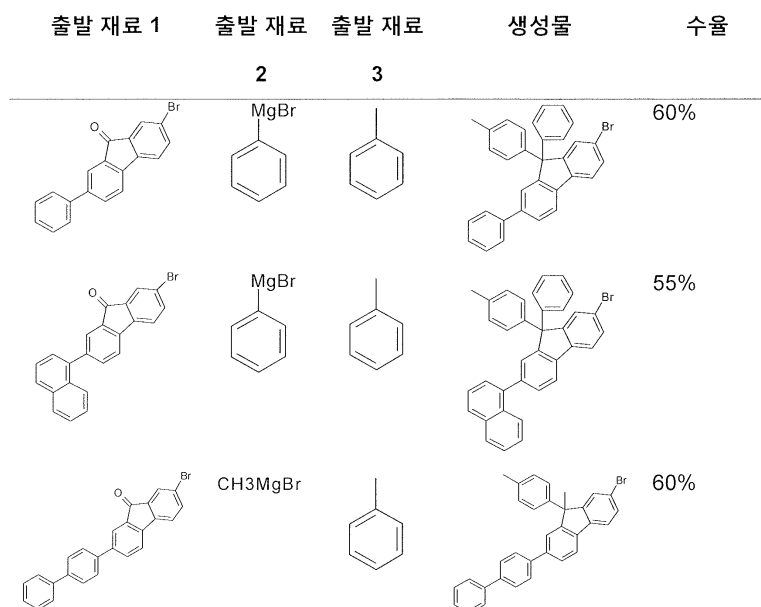
2-브로모-7,9-디페닐-9-p-톨릴-9H-플루오렌

[0336]

35 g (104 mmol) 의 2-브로모-7-페닐플루오렌온이 가열에 의해 건조된 플라스크에서 600 ml 의 건조된 THF 에 용해된다. 맑은 용액 (clear solution) 이 -10°C 로 냉각되고 다음으로 38.3 ml (115 mmol) 의 3 M 페닐마그네슘 브로마이드 용액이 첨가된다. 반응 혼합물은 실온으로 천천히 가온되고 NH_4Cl (300 ml) 를 사용하여 담금질된다. 그 혼합물은 후속하여 에틸 아세테이트와 물 사이에 배치되고, 유기 상이 물로 3회 세척되고, Na_2SO_4 상에서 건조되고 로타리 증발기에서 증발된다. 100 ml 의 톨루엔이 증발된 용액에 첨가된다. 뱃치 (batch) 는 50°C 로 가열되고, 20.4 ml 의 트리플루오로메탄설포산 (208 mmol) 이 후속하여 적하 첨가된다. 1 시간 후에, 반응 혼합물은 실온으로 냉각되고 1 l 의 물 속에 부어진다. 그 혼합물은 톨루엔과 물 사이에 배치되고, 유기 상이 물로 3회 세척되고, Na_2SO_4 상에서 건조되고 로타리 증발기에서 증발된다. (헵탄:에틸 아세테이트, 1:1) 로 실리카 겔을 통해 조생성물의 여과는 41 g (이론의 61%) 를 제공한다.

[0337]

다음의 브로마 화합물들이 유사하게 제조된다:



[0338]

[0339]

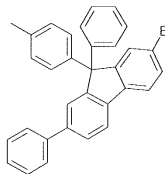
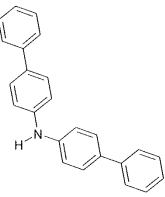
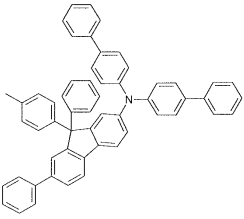
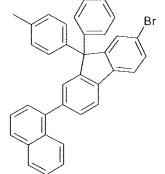
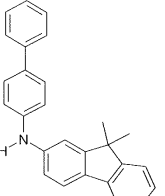
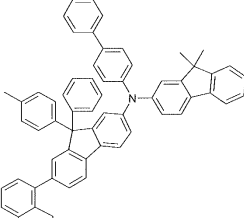
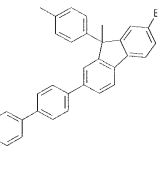
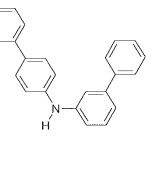
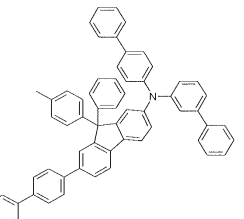
비페닐-4-일비페닐-2-일-(7,9-디페닐-9-p-톨릴-9H-플루오렌-2-일)-아민 (3-1)

[0340]

13.18 g 의 비페닐-2-일비페닐-4-일아민 (41 mmol), 20 g 의 2-브로모-7,9-디페닐-9-p-톨릴-9H-플루오렌이 350

ml 의 톨루엔에서 용해된다: 그 용액은 탈가스되고 N₂ 로 포화된다. 다음으로, 1.6 ml (1.6 mmol) 의 트리테르트-부틸포스핀 및 184 mg (0.82 mmol) 의 팔라듐(II) 아세테이트가 첨가된다. 9.86 g 의 나트륨 테르트-부톡사이드 (102 mmol) 가 후속하여 첨가된다. 반응 혼합물이 보호성 분위기하에서 5 h 동안 비등 가열된다. 그 혼합물은 후속하여 톨루엔과 물 사이에 배치되고, 유기 상이 물로 3회 세척되고, Na₂SO₄ 상에서 건조되고 로타리 증발기에서 증발된다. 톨루엔으로 실리카 겔을 통해 조생성물의 여과 후에, 잔류하는 잔류물이 헵탄/톨루엔으로부터 재결정화되고 최종적으로 고진공에서 승화된다. 순도는 99.9% 이다. 수율은 21.8 g (이론의 73%) 이다.

[0341] 다음의 화합물들이 유사하게 제조된다:

출발 재료 1	출발 재료 2	생성물	수율
			85%
			82%
			80%

[0343]

[0344] 실시예 4

[0345] 화합물들의 특성화

[0346] 본 발명에 따른 OLED 및 종래 기술에 따른 OLED 는 WO 04/058911 에 따른 일반 프로세스에 의해 제조되고, 이는 여기에 설명된 상황들 (예를 들어, 층 두께 변화, 재료) 에 적용된다.

[0347] 다양한 OLED 들의 데이터가 다음 예들 V1, V2 및 E1 내지 E3 에 제시되어 있다 (표 1 및 표 2 참조). 사용된 기판들은, 50 nm 의 두께에서 구조화된 ITO (인듐 주석 산화물) 로 코팅된 유리 플레이트이다. OLED 는 기본적으로 다음의 층 구조를 갖는다: 기판 / 정공 주입 층 (HIL1) / 정공 수송 층 (HTL) / 정공 주입 층 (HIL2) / 전자 차단 층 (EBL) / 방출 층 (EML) / 전자 수송 층 (ETL) / 전자 주입 층 (EIL) 및 최종적으로 캐소드. 캐소드는 100 nm 의 두께를 갖는 알루미늄 층에 의해 형성된다. OLED 의 정확한 구조는 표 1에 나타나 있다. OLED 의 제조를 위해 필요한 재료들은 위에 나타났다.

[0348] 모든 재료들은 진공 챔버에서 열 기상 증착에 의해 도포된다. 여기에서 방출 층은 항상 적어도 하나의 매트릭스 재료 (호스트 재료) 및 방출 도펀트 (방출체) 로 이루어지고, 이와 매트릭스 재료 또는 매트릭스 재료들이 동시 증발 (co-evaporation) 에 의해 소정 체적 비율로 혼합된다. 여기에서 H1:SEB1 (95%:5%) 와 같은 표

현은 재료 H1 가 95% 의 체적 비율로 층에 존재하고 SEB1 가 5% 의 비율로 층에 존재한다는 것을 의미한다. 유사하게, 전자 수송 층은 또한 2개 재료들의 혼합물로 이루어질 수도 있다.

[0349] OLED 는 표준 방법들에 의해 특성화된다. 이 목적을 위해, Lambert 방출 특성을 가정한 전류/전압/루미네스 밀도 (luminous density) 특성 라인들 (IUL 특성 라인들)로부터 산출되는, 루미네스 밀도의 함수로서, 전계 발광 스펙트럼, 전류 효율 (cd/A 단위로 측정), 전력 효율 (lm/W 단위로 측정) 및 외부 양자 효율 (EQE, 퍼센트 단위로 측정), 그리고 수명이 결정된다. 전계 발광 스펙트럼은 1000 cd/m^2 의 루미네스 밀도에서 결정되고, 그로부터 CIE 1931 x 및 y 색좌표가 산출된다. 표현 EQE @ 1000 cd/m^2 는 1000 cd/m^2 의 동작 루미네스 밀도에서의 외부 양자 효율을 나타낸다. LT80 @ 6000 cd/m^2 는 6000 cd/m^2 의 광도 (luminosity) 에서 OLED 가 초기 세기의 80%, 즉 4800 cd/m^2 으로 떨어진 수명이다. 다양한 OLED들의 데이터가 표 2에 요약되어 있다.

[0350] **형광 OLED 에서 정공 수송 재료로서 본 발명에 따른 화합물의 사용**

[0351] 본 발명에 따른 화합물은 OLED 에서 HIL, HTL 또는 EBL 로서 특히 적합하다. 이것들은, 단일 층으로서 적합하지만, 또한 HIL, HTL, EBL 로서 혼합된 성분으로서 또는 EML 내에서 적합하다.

[0352] NPB 참고 성분들 (V1) 과 비교하여, 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 샘플들은 더 높은 효율 및 또한 현저히 향상된 수명을 일중향 청색 (singlet blue) 에서 나타낸다.

[0353] 참고 재료 HTMV1 (V2) 와 비교하여, 본 발명 (E1-E4) 에 따른 화합물 (2-7), (2-4), (2-5), (1-11), (2-1) 및 (2-8) 는 더 좋은 수명을 갖는다.

[0354] 녹색 삼중항 성분들에서, 본 발명에 따른 화합물 (2-7), (2-4), (2-1) 는 참고 성분들 V3 (NPB) 및 V4 (HTMV1) 과 비교하여 더 좋은 효율 및 더 좋은 수명을 나타낸다.

표 1: OLED 의 구조						
(층 구조: 기판/IL/HTL/IL/EBL/EML/ETL/EIL (1 nm LiQ)/캐소드)						
예	HIL1	HTL	HIL2	EBL	EML	ETL
	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm
V1	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	NPB 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
V2	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	HTMV1 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E1	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(2-7) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E2	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(2-4) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E3	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(2-5) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E4	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(1-11) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E5	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(2-1) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E6	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(2-8) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm

[0355]

표 2: OLED 의 데이터				
예	EQE @ 1000 cd/m ² %	LT80 @ 6000 cd/m ² [h]	CIE	
			x	y
V1	4.8	70	0.14	0.17
V2	7.0	130	0.13	0.15
E1	6.1	155	0.13	0.15
E2	7.0	161	0.14	0.15
E3	6.9	158	0.13	0.14
E4	6.5	155	0.13	0.15
E5	7.0	155	0.14	0.15
E6	6.9	160	0.14	0.15

[0356]

표 3: OLED 의 구조					
(층 구조: 기판/HTL/HIL2/EBL/EML/ETL/캐소드)					
예	HTL	HIL2	EBL	EML	ETL
	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm
V3	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	NPB 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
V4	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	HTMV1 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E7	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	(2-7) 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E8	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	(2-4) 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E9	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	(2-1) 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm

[0357]

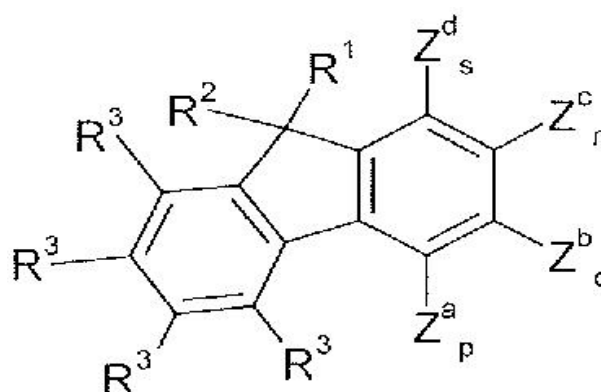
표 4: OLED 의 데이터				
예	효율 @ 1000 cd/m ² %	LT80 @ 8000 cd/m ² [h]	CIE	
			x	Y
V3	13.4	85	0.36	0.61
V4	17.0	170	0.35	0.62
E7	17.5	190	0.34	0.62
E8	18.3	215	0.35	0.62
E9	18.5	225	0.37	0.60

[0358]

专利名称(译)	化合物和有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR101807925B1	公开(公告)日	2017-12-11
申请号	KR1020157004363	申请日	2013-06-27
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	MUJICA FERNAUD TERESA 뮤히카페르나우드테레사 MONTENEGRO ELVIRA 몬테네그로엘비라 PARHAM AMIR HOSSAIN 파르함아미르호싸인 BUESING ARNE 뷔징아르네 VOGES FRANK 포게스프랑크		
发明人	뮤히카 페르나우드테레사 몬테네그로엘비라 파르함아미르호싸인 뷔징아르네 포게스프랑크		
IPC分类号	C09K11/06 C07C13/567 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C07C13/567 H01L51/50 C09K2211/1011 C07D209/86 C07D219/02 C07D307/91 C07D333/76 C07D405/12 C09K2211/1014 C07C2603/18 C07C2603/94 C07F7/081 H01L51/5056 H05B33/14 C07C209/10 C07C211/61 C07C213/02 C07C217/94 H01L51/0059 H01L51/0065 H01L51/0067 H01L51/0068 C07F7/083		
优先权	2012005369 2012-07-23 EP		
其他公开文献	KR1020150036721A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及包含预定笏的电子器件，以及该电子器件中该化合物和这些化合物的至少一种用途。本发明还涉及所述试剂和组合物，还包括所述化合物的制备方法和一种或多种所述化合物。



식 (1)