



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2022-0162156
(43) 공개일자 2022년12월07일

- | | |
|---|---|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
 <i>C07D 513/14</i> (2006.01) <i>C07D 471/14</i> (2006.01)
 <i>C07D 487/14</i> (2006.01) <i>C07D 498/14</i> (2006.01)
 <i>H01L 51/00</i> (2006.01) <i>H01L 51/50</i> (2006.01)</p> <p>(52) CPC특허분류
 <i>C07D 513/14</i> (2013.01)
 <i>C07D 471/14</i> (2013.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2022-7037614
 (22) 출원일자(국제) 2021년03월30일
 심사청구일자 없음
 (85) 번역문제출일자 2022년10월27일
 (86) 국제출원번호 PCT/EP2021/058222
 (87) 국제공개번호 WO 2021/198213
 국제공개일자 2021년10월07일</p> <p>(30) 우선권주장
 20167658.2 2020년04월02일
 유럽특허청(EPO)(EP)</p> | <p>(71) 출원인
 메르크 파텐트 게엠베하
 독일 64293 다름슈타트 프랑크푸르터 스트라세 250</p> <p>(72) 발명자
 파르함 아미르 호싸인
 독일 64293 다름슈타트 프랑크푸르터 슈트라세 250 메르크 카게아아 씨/오
 에렌라이히 크리스티안
 독일 64293 다름슈타트 프랑크푸르터 슈트라세 250 메르크 카게아아 씨/오
 엔겔하르트 옌스
 독일 64293 다름슈타트 프랑크푸르터 슈트라세 250 메르크 카게아아 씨/오</p> <p>(74) 대리인
 특허법인코리아나</p> |
|---|---|

전체 청구항 수 : 총 11 항

(54) 발명의 명칭 **유기 전계 발광 디바이스용 재료**

(57) 요약

본 발명은 전자 디바이스에서 사용하기에 적합한 화합물, 및 상기 화합물을 포함하는 전자 디바이스, 특히 유기 전계 발광 디바이스에 관한 것이다.

(52) CPC특허분류

C07D 487/14 (2013.01)

C07D 498/14 (2013.01)

H01L 51/0054 (2013.01)

H01L 51/0067 (2013.01)

H01L 51/0071 (2013.01)

H01L 51/0072 (2013.01)

H01L 51/0073 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

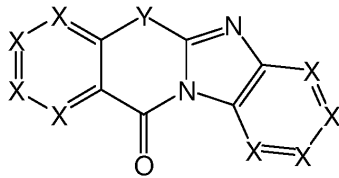
H01L 51/5072 (2013.01)

명세서

청구범위

청구항 1

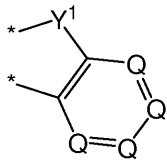
하기 식 (1) 의 화합물.



식 (1)

식 중 사용된 기호들은 다음과 같다:

X 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 CR 또는 N 이고, 하기 식 (2) 의 기인 2 개의 인접한 X 기 중 적어도 하나의 경우가 있고, 다른 기호 X는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 CR 또는 N 이다:



식 (2) ;

Y, Y¹ 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, NR, NAr, CR₂, SiR₂, BAr, C=O, O 또는 S 이다;

Q 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, N 또는 CR 이다;

Ar 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이다;

R 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, B(OR¹)₂, CHO, C(=O)R¹, CR¹=C(R¹)₂, CN, C(=O)OR¹, C(=O)N(R¹)₂, Si(R¹)₃, N(R¹)₂, NO₂, P(=O)(R¹)₂, OSO₂R¹, OR¹, S(=O)R¹, S(=O)₂R¹, SR¹, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 기 또는 2 내지 20개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐 기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (상기 알킬, 알케닐 또는 알키닐 기는 각 경우에 하나 이상의 R¹ 라디칼로 치환될 수도 있고 하나 이상의 비인접 CH₂ 기는 -R¹C=CR¹-, -C≡C-, Si(R¹)₂, C=O, C=S, C=NR¹, -C(=O)O-, -C(=O)NR¹-, NR¹, P(=O)(R¹), -O-, -S-, SO 또는 SO₂ 로 대체될 수도 있음), 또는 5 내지 60개 방향족 고리 원자, 바람직하게는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고, 각 경우에 하나 이상의 R¹ 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 여기서 둘 이상의 R 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있다;

R¹ 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, B(OR²)₂, CHO, C(=O)R², CR²=C(R²)₂, CN, C(=O)OR², C(=O)N(R²)₂, Si(R²)₃, N(R²)₂, NO₂, P(=O)(R²)₂, OSO₂R², OR², S(=O)R², S(=O)₂R², 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 기 또는 2 내지 20개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐 기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (상기 알킬, 알케닐 또는 알키닐 기는 각 경우에 하나 이상의 R² 라디칼로 치환될 수도 있고 위에 언급된 기에서 하나 이상의 CH₂ 기는 -R²C=CR²-, -C≡C-, Si(R²)₂, C=O, C=S,

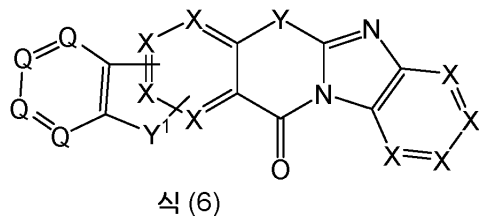
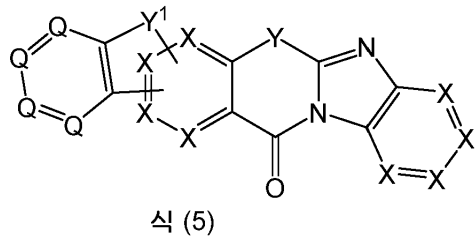
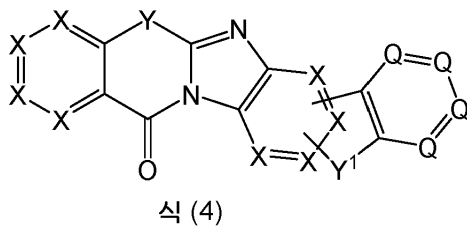
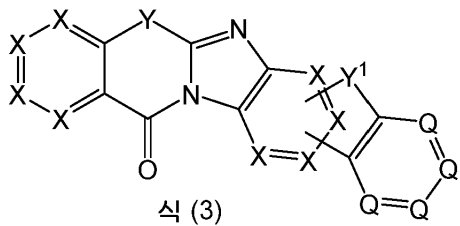
$C=NR^2$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^2-$, NR^2 , $P(=O)(R^2)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 로 대체될 수도 있고 위에 언급된 기에서 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 로 대체될 수도 있음), 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의 R^2 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 여기서 둘 이상의 R^1 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있다;

R^2 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고 H, D, F 또는 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 유기 라디칼이고, 여기서 하나 이상의 수소 원자는 또한 D 또는 F 로 대체될 수도 있고; 동시에, 둘 이상의 R^2 치환기는 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있다.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

하기 식 (3) 내지 (6) 의 화합물로부터 선택되는 화합물.



식중 사용된 기호는 제 1 항에 주어진 정의를 갖는다.

청구항 3

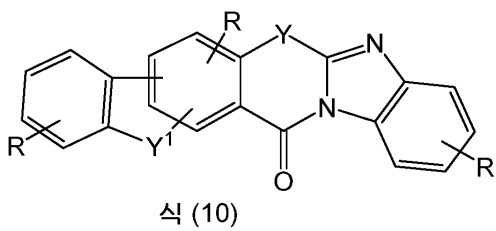
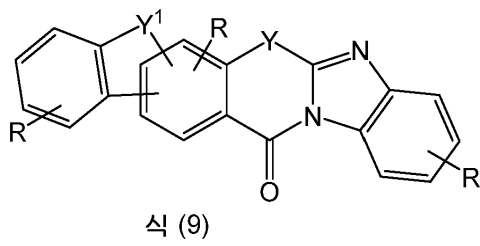
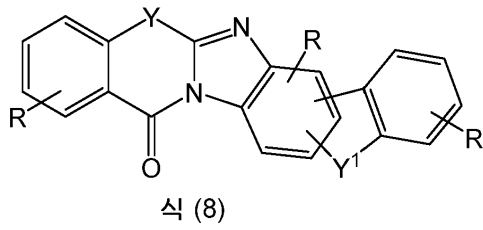
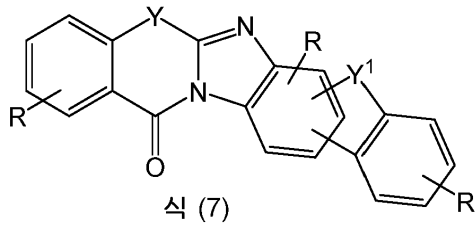
제 1 항 또는 제 2 항에 있어서,

환당 2개 이하의 기호 X가 N인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 4

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서,

하기 식 (7) 내지 (10) 의 화합물로부터 선택되는 화합물.



식중 사용된 기호는 제 1 항에 주어진 정의를 갖는다.

청구항 5

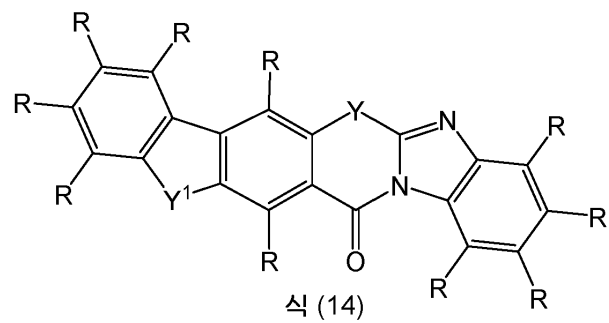
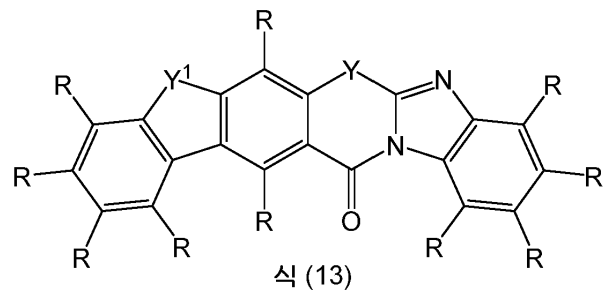
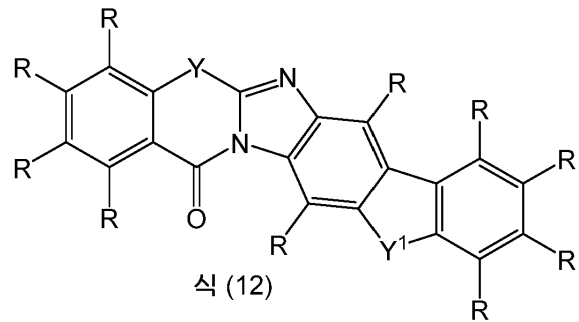
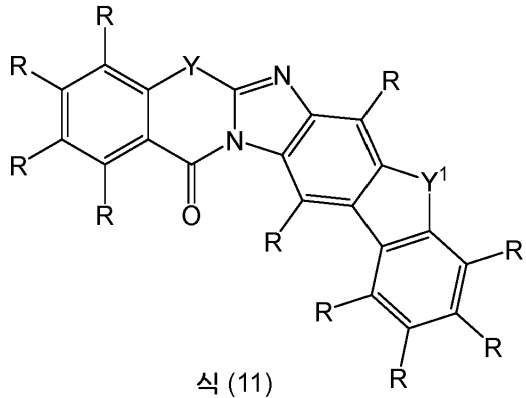
제 2 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 있어서,

식 (3) 및 (4) 또는 (7) 및 (8) 에서 Y^1 기는 질소 원자에 대해 파라 위치에 있고, 식 (5) 및 (6) 또는 (9) 및 (10) 에서 케토 기에 대해 또는 Y에 대해 파라 위치에 있는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 6

제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 있어서,

하기 식 (11) 내지 (14) 의 화합물로부터 선택되는 화합물.



식중 사용된 기호는 제 1 항에 주어진 정의를 갖는다.

청구항 7

제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 제조하는 방법으로서, 다음의 단계들

(A) 아직 식 (2) 의 기를 갖지 않는 식 (1) 의 베이스 골격을 합성하는 단계, 및

(B) 적어도 하나의 커플링 반응에 의해 식 (2) 의 기를 도입하는 단계

를 특징으로 하는 화합물을 제조하는 방법.

청구항 8

제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 기재된 적어도 하나의 화합물 및 적어도 하나의 추가의 화합물 및/또는 적어도 하나의 용매를 포함하는, 포블레이션.

청구항 9

제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 기재된 화합물 또는 제 8 항에 기재된 포블레이션의 전자 디바이스에서 의 용도.

청구항 10

제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 기재된 적어도 하나의 화합물 또는 제 8 항에 기재된 포블레이션을 포함 하는, 전자 디바이스.

청구항 11

제 10 항에 있어서,

상기 전자 디바이스는 유기 전계 발광 디바이스이고, 제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 기재된 상기 화합 물은 인광 방출체용 또는 TADF (thermally activated delayed fluorescence) 를 나타내는 방출체용 매트릭스 재료로서 방출층에서, 또는 전자 수송층에서 및/또는 정공 차단층에서 및/또는 정공 수송층에서 및/또는 여기자 차단층에서 사용되는 것을 특징으로 하는 전자 디바이스.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 전자 디바이스, 특히 유기 전계 발광 디바이스에서 사용하기 위한 재료, 및 이들 재료를 포함하는 전 자 디바이스, 특히 유기 전계 발광 디바이스에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 전계 발광 디바이스 (OLED) 에서 사용된 방출 재료는 흔히 인광 유기금속성 착물이다. 일반적으로, 예 를 들어 효율, 작동 전압 및 수명과 관련하여 OLED, 특히 또한 삼중항 방출 (인광) 을 나타내는 OLED 에서의 개 선의 필요성이 여전히 존재한다. 인광 OLED 의 특성은 사용되는 삼중항 방출체에 의해서만 결정되는 것은 아니다. 더욱 구체적으로, 사용되는 다른 재료, 예컨대 매트릭스 재료도 여기서 특히 중요하다. 따라서, 이들 재료의 개선은 또한 OLED 특성의 개선에 이를 수 있다. OLED 에 적합한 매트릭스 재료는 예를 들어 WO 2011/116865, WO 2011/137951, WO 2013/064206 또는 KR 2015-037703 에 개시된 바와 같은 방향족 락탐 이다.

발명의 내용

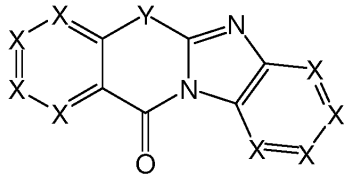
해결하려는 과제

[0003] 본 발명의 목적은 OLED 에서, 특히 인광 방출체용 매트릭스 재료로서 또는 전자 수송 재료로서 사용하기에 적합 하고 그 안에서 특성을 개선시키는 화합물을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0004] 놀랍게도, 이 목적은 OLED 에서 사용하기에 양호하게 적합한 이하 상세히 설명되는 특정 화합물에 의해 달성된 다는 것을 알아냈다. 이들 OLED 는 특히 긴 수명, 고효율 및 상대적으로 낮은 작동 전압을 갖는다. 따 라서 본 발명은 이들 화합물, 및 이들 화합물을 포함하는 전자 디바이스, 특히 유기 전계 발광 디바이스를 제공 한다.

[0005] 본 발명은 하기 식 (1) 의 화합물을 제공한다



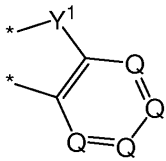
식 (1)

[0006]

[0007] 식에서 사용된 기호들은 다음과 같다:

[0008]

X 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 CR 또는 N 이고, 하기 식 (2) 의 기인 2 개의 인접한 X 기 중 적어도 하나의 경우가 있고, 다른 기호 X는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 CR 또는 N 이다:



식 (2) ;

[0009]

[0010] Y, Y¹ 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, NR, NAr, CR₂, SiR₂, BAr, C=O, O 또는 S 이다;

[0011]

Q 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, N 또는 CR 이다;

[0012]

Ar 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이다;

[0013]

R 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, B(OR¹)₂, CHO, C(=O)R¹, CR¹=C(R¹)₂, CN, C(=O)OR¹, C(=O)N(R¹)₂, Si(R¹)₃, N(R¹)₂, NO₂, P(=O)(R¹)₂, OSO₂R¹, OR¹, S(=O)R¹, S(=O)₂R¹, SR¹, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 기 또는 2 내지 20개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐 기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (상기 알킬, 알케닐 또는 알키닐 기는 각 경우에 하나 이상의 R¹ 라디칼로 치환될 수도 있고 하나 이상의 비인접 CH₂ 기는 -R¹C=CR¹-, -C≡C-, Si(R¹)₂, C=O, C=S, C=NR¹, -C(=O)O-, -C(=O)NR¹-, NR¹, P(=O)(R¹), -O-, -S-, SO 또는 SO₂ 로 대체될 수도 있음), 또는 5 내지 60개 방향족 고리 원자, 바람직하게는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고, 각 경우에 하나 이상의 R¹ 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 여기서 둘 이상의 R 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있다;

[0014]

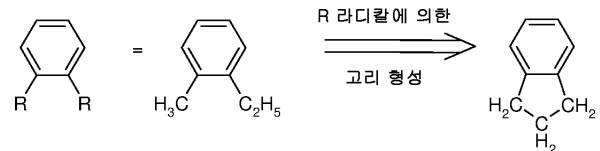
R¹ 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, B(OR²)₂, CHO, C(=O)R², CR²=C(R²)₂, CN, C(=O)OR², C(=O)N(R²)₂, Si(R²)₃, N(R²)₂, NO₂, P(=O)(R²)₂, OSO₂R², OR², S(=O)R², S(=O)₂R², 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 기 또는 2 내지 20개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐 기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (상기 알킬, 알케닐 또는 알키닐 기는 각 경우에 하나 이상의 R² 라디칼로 치환될 수도 있고 위에 언급된 기에서 하나 이상의 CH₂ 기는 -R²C=CR²-, -C≡C-, Si(R²)₂, C=O, C=S, C=NR², -C(=O)O-, -C(=O)NR²-, NR², P(=O)(R²), -O-, -S-, SO 또는 SO₂ 로 대체될 수도 있고 위에 언급된 기에서 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂ 로 대체될 수도 있음), 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의 R² 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 여기서 둘 이상의 R¹ 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있다;

- [0015] R^2 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고 H, D, F 또는 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 유기 라디칼이고, 여기서 하나 이상의 수소 원자는 또한 D 또는 F 로 대체될 수도 있고; 동시에, 둘 이상의 R^2 치환기는 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있다.
- [0016] 본 발명의 맥락에서 아릴 기는 6 내지 40 개의 탄소 원자를 함유하고; 본 발명의 맥락에서 헤테로아릴 기는 2 내지 40 개의 탄소 원자 및 적어도 하나의 헤테로원자를 함유하며, 단, 탄소 원자 및 헤테로원자의 총합은 적어도 5이다. 헤테로원자는 바람직하게 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 아릴 기 또는 헤테로아릴 기는 여기서 단순 방향족 환, 즉 벤젠, 또는 단순 헤테로방향족 환, 예를 들어 피리딘, 피리미딘, 티오펜, 등, 또는 융합된 (아닐레이트화 (annelated)) 아릴 또는 헤테로아릴 기, 예를 들어 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 등을 의미하는 것으로 이해된다. 단일 결합에 의해 서로 연결된 방향족은, 예를 들어 바이페닐은, 대조적으로, 아릴 또는 헤테로아릴 기가 아니라 방향족 고리 시스템으로 지칭된다.
- [0017] 본 발명의 맥락에서 방향족 고리 시스템은 고리 시스템에서 6 내지 60 개의 탄소 원자, 바람직하게는 6 내지 40 개의 탄소 원자를 포함한다. 본 발명의 맥락에서 헤테로방향족 고리 시스템은 고리 시스템에서 2 내지 60 개의 탄소 원자, 바람직하게는 2 내지 40 개의 탄소 원자와 적어도 하나의 헤테로원자를 함유하는데, 다만, 탄소 원자와 헤테로원자의 총합은 적어도 5 이다. 헤테로원자는 바람직하게 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 본 발명의 맥락에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은, 반드시 아릴 또는 헤테로아릴 기만을 함유하는 것이 아니라, 둘 이상의 아릴 또는 헤테로아릴 기가 비방향족 단위, 예를 들어 탄소, 질소 또는 산소 원자에 의해 연결되는 것도 가능한 시스템을 의미하는 것으로 이해될 것이다. 이들은 마찬가지로 둘 이상의 아릴 또는 헤테로아릴 기가 서로 직접 연결된 시스템, 예를 들어, 바이페닐, 테르페닐, 바이피리딘 또는 페닐피리딘을 의미하는 것으로 이해될 것이다. 예를 들어, 플루오렌, 9,9'-스피로바이플루오렌, 9,9'-디아틸플루오렌, 트리아틸아민, 디아틸 에테르, 스틸벤 등과 같은 시스템은 또한 본 발명의 맥락에서 방향족 고리 시스템으로서 간주될 것이며, 둘 이상의 아릴기가 예를 들어 짧은 알킬기에 의해 연결되는 시스템도 마찬가지로 포함된다. 바람직한 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 단순 아릴 또는 헤테로아릴 기이며, 2 개 이상의 아릴 또는 헤테로아릴 기가 서로 직접 연결되는 기이고, 예를 들어 바이페닐 또는 바이피리딘, 그리고 또한 플루오렌 또는 스피로바이플루오렌이다.
- [0018] 전자-풍부 헤테로방향족 고리 시스템은 전자-결핍 헤테로아릴기를 함유하지 않는 헤테로방향족 고리 시스템인 것을 특징으로 한다. 전자-결핍 헤테로아릴기는 적어도 하나의 질소 원자를 갖는 적어도 하나를 갖는 6원 헤테로아릴기 또는 적어도 2개의 헤테로원자를 갖고 그 중 하나는 질소 원자이고 다른 하나는 산소, 황 또는 치환된 질소 원자인 5원 헤테로아릴기이며, 여기서 추가의 아릴 또는 헤테로아릴 기는 또한 각 경우에 이들 기에 융합될 수도 있다. 대조적으로, 전자 풍부 헤테로아릴 기는 산소, 황 및 치환된 질소로부터 선택된 정확히 하나의 헤테로원자를 갖는 5원 헤테로아릴 기이며, 그에 추가 아릴 기 및/또는 추가 전자 풍부 5원 헤테로아릴 기가 융합될 수도 있다. 따라서, 전자 풍부 헤테로아릴 기의 예는 피롤, 푸란, 티오펜, 인돌, 벤조푸란, 벤조티오펜, 카르바졸, 디벤조푸란, 디벤조티오펜 또는 인데노카르바졸이다.
- [0019] 본 발명의 맥락에서, 용어 "알킬 기"는 선형 및 분지형 알킬 기 및 환형 알킬 기 양자 모두를 위한 포괄적인 용어로 사용된다. 유사하게, 용어 "알케닐 기" 및 "알키닐 기"는 선형 또는 분지형 알케닐 또는 알키닐 기를 위한 그리고 환형 알키닐 기 양자 모두를 위한 포괄적인 용어로 사용된다.
- [0020] 본 발명의 맥락에서, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 함유할 수도 있으며 개개의 수소 원자 또는 CH_2 기가 또한 전술한 기에 의해 치환될 수도 있는 지방족 히드록카르빌 라디칼 또는 알킬기 또는 알케닐 또는 알키닐 기는 바람직하게는 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, s-부틸, t-부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, s-펜틸, 네오펜틸, 시클로펜틸, n-헥실, 네오펜틸, 시클로헥실, n-헵틸, 시클로헵틸, n-옥틸, 시클로옥틸, 2-에틸헥실, 트리플루오로메틸, 펜타플루오로에틸, 2,2,2-트리플루오로에틸, 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 시클로펜테닐, 헥세닐, 시클로헥세닐, 헵테닐, 시클로헵테닐, 옥테닐, 시클로옥테닐, 에티닐, 프로피닐, 부티닐, 펜티닐, 헥시닐, 헵티닐 또는 옥티닐 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다. 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알콕시 기 OR^1 은 바람직하게는 메톡시, 트리플루오로메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, s-부톡시, t-부톡시, n-펜톡시, s-펜톡시, 2-메틸부톡시, n-헥소키, 시클로헥실옥시, n-헵톡시, 시클로헵틸옥시, n-옥틸옥시, 시클로옥틸옥시, 2-에틸헥실옥시, 펜타플루오로에톡시 및 2,2,2-트리플루오로에톡시를 의미하는 것으로 이해된다. 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 티오알킬 기 SR^1 는 특히 메틸티오, 에틸티오, n-프로필티오, i-프로필티오, n-부틸티오, i-부틸티오, s-부틸티오, t-부틸티오,

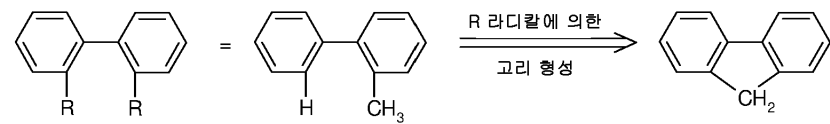
n-펜틸티오, s-펜틸티오, n-헥실티오, 시클로헥실티오, n-헵틸티오, 시클로헵틸티오, n-옥틸티오, 시클로옥틸티오, 2-에틸헥실티오, 트리플루오로메틸티오, 펜타플루오로에틸티오, 2,2,2-트리플루오로에틸티오, 에테닐티오, 프로페닐티오, 부테닐티오, 펜테닐티오, 시클로펜테닐티오, 헥세닐티오, 시클로헥세닐티오, 헵테닐티오, 시클로헵테닐티오, 옥테닐티오, 시클로옥테닐티오, 에티닐티오, 프로피닐티오, 부티닐티오, 펜티닐티오, 헥시닐티오, 헵티닐티오 또는 옥티닐티오를 의미하는 것으로 이해된다. 일반적으로, 본 발명에 따른 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기는 직쇄, 분지형 또는 환형일 수도 있으며, 여기서 하나 이상의 비인접 CH₂ 기는 전술한 기들에 의해 대체될 수도 있고; 추가로, 또한 하나 이상의 수소 원자가 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂, 바람직하게는 F, Cl 또는 CN, 더욱 바람직하게는 F 또는 CN 에 의해 대체될 수 있다.

[0021] 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖고 또한 각 경우 전술된 R² 라디칼 또는 히드로카르빌 라디칼에 의해 치환될 수도 있고, 임의의 원하는 위치를 통해 방향족 또는 헤테로방향족 시스템에 연결될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 특히 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센, 페난트렌, 피렌, 크리센, 페틸렌, 플루오란텐, 나프타센, 펜타센, 벤조피렌, 바이페닐, 바이페닐렌, 테르페닐, 트리페닐렌, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 디히드로페난트렌, 디히드로피렌, 테트라히드로피렌, 시스- 또는 트랜스-인덴오플루오렌, 시스- 또는 트랜스-인덴오키아졸, 시스- 또는 트랜스-인돌오키아졸, 트루센, 이소트루센, 스피로트루센, 스피로이소트루센, 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, 벤즈이미다졸, 나프티이미다졸, 페난트림이미다졸, 피리디이미다졸, 피라진이미다졸, 퀴놀살린이미다졸, 옥사졸, 벤즈옥사졸, 나프티옥사졸, 안트라옥사졸, 페난트록사졸, 이소옥사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 헥사아자트리페닐렌, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴놀살린, 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, 나프티리딘, 아자카르바졸, 벤조카르볼린, 페난트롤린, 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 유도된 기 또는 이들 시스템의 조합으로부터 유도된 기를 의미하는 것으로 이해된다.

[0022] 둘 이상의 라디칼이 함께 고리 시스템을 형성할 수도 있다는 문구는, 본 상세한 설명의 맥락에서, 특히, 2 개의 라디칼이 2 개의 수소 원자의 형식적 제거와 함께 화학 결합에 의해 서로 연결됨을 의미하는 것으로 이해되어야 한다. 이것은 다음 도식으로 예시된다:



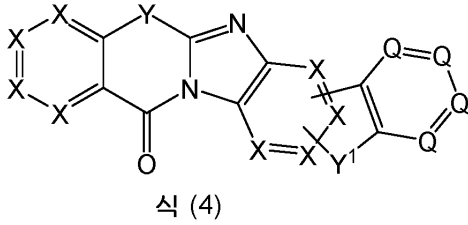
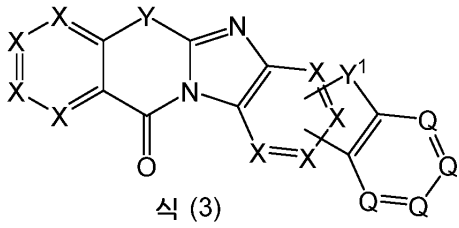
[0023] 그러나, 추가적으로, 위에 언급된 문구는 또한 2 개의 라디칼 중 하나가 수소인 경우에, 수소 원자가 결합되었던 위치에 제 2 라디칼이 결합되어 고리를 형성한다는 것을 의미하는 것으로 이해되어야 한다. 이것은 다음 도식으로 예시될 것이다:



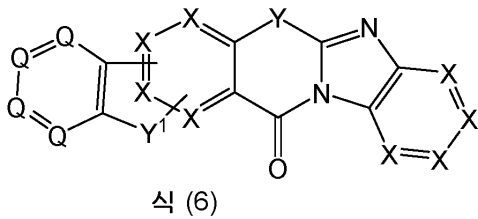
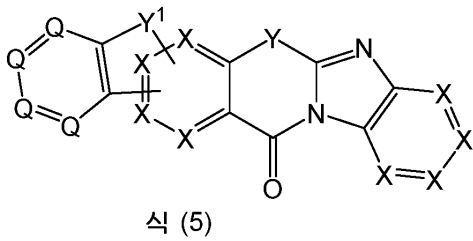
[0024] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, 식 1의 화합물에서 측방 방향족 6원 고리 각각에서, 식 (2) 의 기인 2개의 인접한 X 기 중 동일하거나 상이한 경우가 하나에 이르기까지 있고; 바람직하게는, 식 (1) 당 정확히 2개의 인접한 X 기는 식 (2) 의 기이다.

[0025] 2개의 인접한 X 기가 식 (2) 의 기인 경우, 각각의 X 기는 식 (2) 에서 * 로 식별되는 위치에 대응하는 C이다. 따라서, 식 (2) 와 함께, 결과는 2개의 X 기 및 식 (2) 로부터 형성된 식 (1) 에 융합된 5원 고리이다.

[0028] 이것은 하기 식 (3) 내지 (6) 의 바람직한 화합물을 낳는다:



[0029]



[0030]

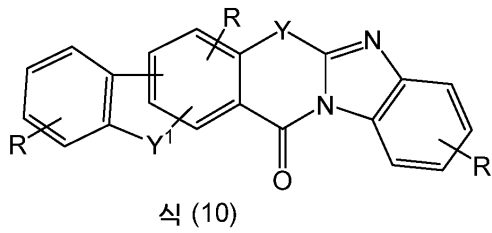
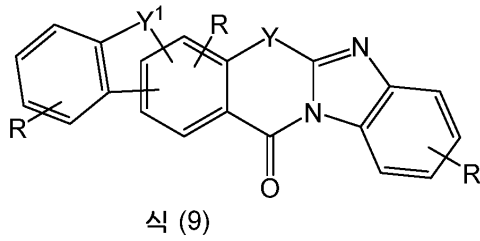
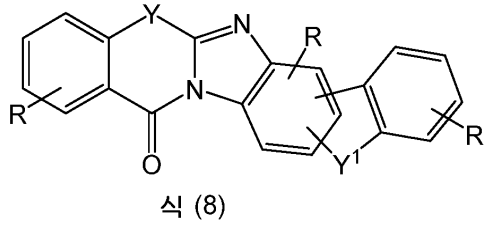
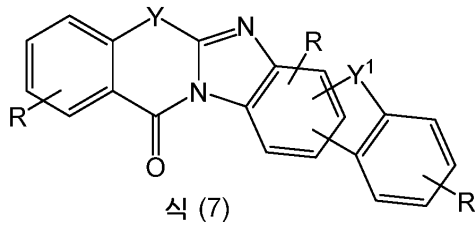
[0031] 식 중 사용된 기호는 위에 주어진 정의를 가지며, 단, X는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 N 또는 CR이고 2개의 인접한 X 기는 C이고 Y¹ 을 함유하는 기와 함께 융합된 5원 고리를 형성한다.

[0032] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, 환당 2개 이하의 기호 X는 N이고, 보다 바람직하게는 1개 이하의 기호 X는 N이다.

[0033] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, 환당 2개 이하의 기호 Q 는 N 이다.

[0034] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, X 는, 그것이 CR 또는 N인 경우, CR 이다. 추가의 바람직한 실시 형태에서, Q 는 CR 이다.

[0035] 추가의 바람직한 실시형태는 하기 식 (7) 내지 (10) 로 나타낸다:



[0036]

[0037]

식 중 사용된 기호는 위에 주어진 정의를 갖고 방향족 시스템은 도시된 바와 같이 하나 이상의 R 기에 의해 동일하거나 상이하게 치환될 수도 있다.

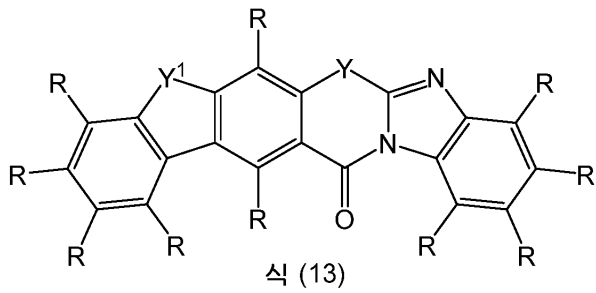
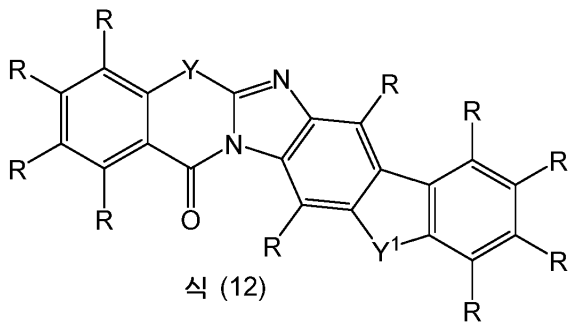
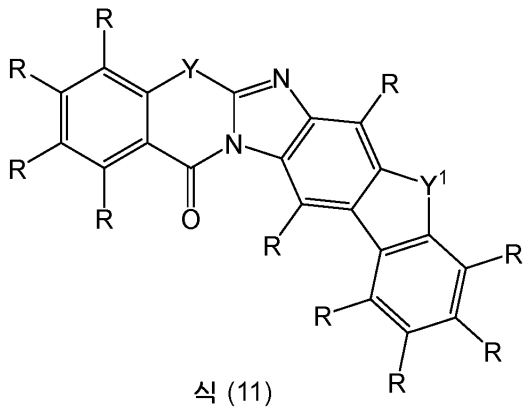
[0038]

본 발명의 바람직한 실시형태에서, 식 (3) 및 (4) 에서 Y^1 기는 질소 원자에 대해 파라 위치에 있고, 식 (5) 및 (6) 에서 케토 기에 대해 또는 Y에 대해 파라 위치에 있다.

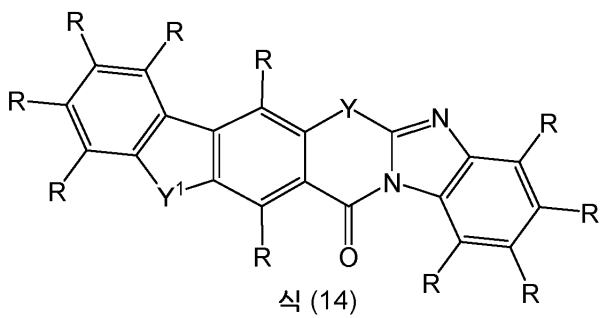
[0039]

본 발명의 바람직한 실시형태에서, 식 (7) 및 (8) 에서 Y^1 기는 질소 원자에 대해 파라 위치에 있고, 식 (9) 및 (10) 에서 케토 기에 대해 또는 Y에 대해 파라 위치에 있다.

[0040] 본 발명의 추가의 바람직한 실시형태에서, 화합물은 식 (11) 내지 (14) 의 화합물로부터 선택된다:



[0041]



[0042]

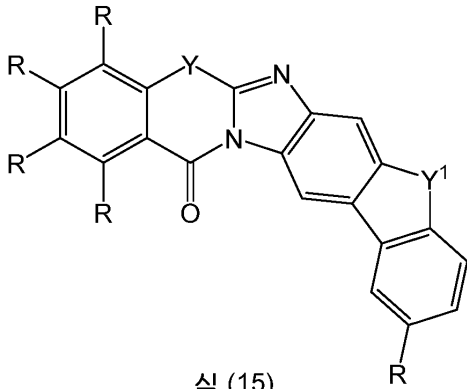
[0043]

식 중 사용된 기호는 위에 주어진 정의를 갖는다.

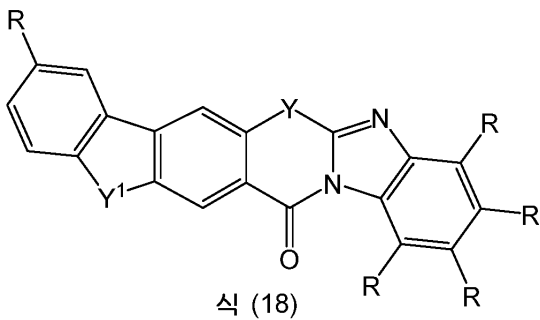
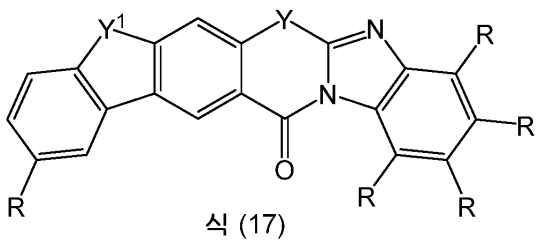
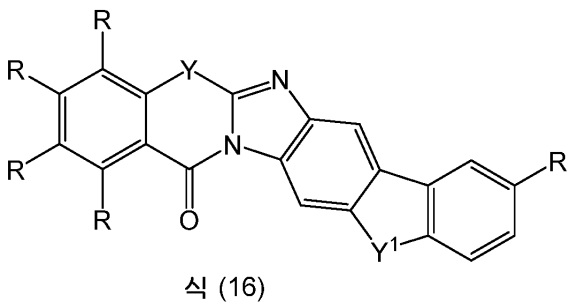
[0044]

본 발명의 바람직한 실시형태에서, 식 (11) 내지 (14) 에서 3개 이하의 R 기, 바람직하게는 2개 이하의 R 기는, H 또는 D가 아니다.

[0045] 추가의 바람직한 실시형태에서, 화합물은 식 (15) 내지 (18) 의 화합물이다:



[0046]



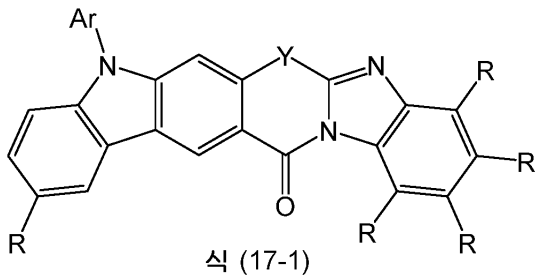
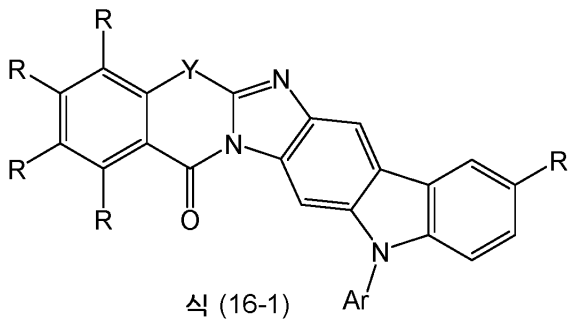
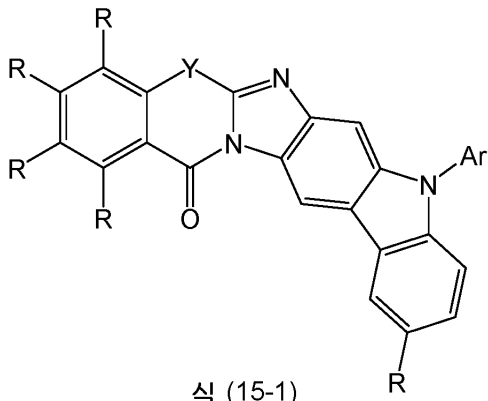
[0047]

[0048] 식 중 사용된 기호는 위에 주어진 정의를 갖는다.

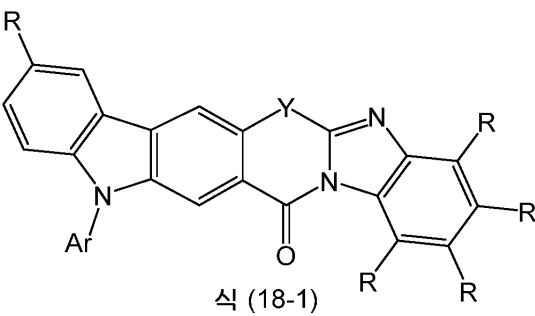
[0049] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, Y 및 Y¹ 은 동일하거나 상이하고 CR₂, NR, NAr, O 또는 S, 보다 바람직하게는 S, O, NAr 또는 NR이다. 특히 바람직한 실시형태에서, Y 및 Y¹ 은 동일하거나 상이하고 S, O 또는 NAr 이다.

[0050] 추가의 특히 바람직한 실시형태에서, Y¹ 는 NAr 이고; 특히, Y¹ 은 NAr 이고 Y 는 NAr, O 또는 S 이다.

[0051] 보다 바람직하게는, Y¹ 및 Y 에 대해 위에 언급된 바람직한 것들은 위에 언급된 식에서, 특히 식 (15) 내지 (18) 에서, 동시에 발생하고, 따라서 하기 식 (15-1) 내지 (18-1) 의 화합물이 특히 바람직하다:



[0052]



[0053]

[0054]

식 중 사용된 기호는 위에 주어진 정의를 갖는다.

[0055]

바람직한 치환기 R, Ar, R¹ 및 R²의 설명이 뒤따른다. 본 발명의 특히 바람직한 실시형태에서, R, Ar, R¹ 및 R²에 대해 이하에 명시된 바람직한 것들이 동시에 발생하고 식 (1)의 구조 및 위에 상술된 모든 바람직한 실시형태에 적용가능하다.

[0056]

바람직한 실시형태에서, Ar은 6 내지 30개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 고리 시스템, 또는 6 내지 30개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수도 있는 헤테로방향족 고리 시스템이다. 본 발명의 특히 바람직한 실시형태에서, Ar은, 6 내지 24개의 방향족 고리 원자들을 갖고 하나 이상의 바람직하게는 비방향족 R 라디칼들에 의해 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이다.

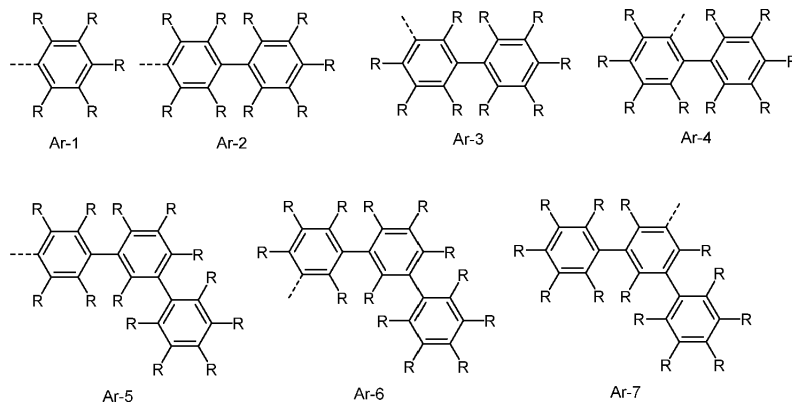
[0057]

적합한 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 Ar은 각각의 경우 동일하거나 상이하고 페닐, 바이페닐, 특히

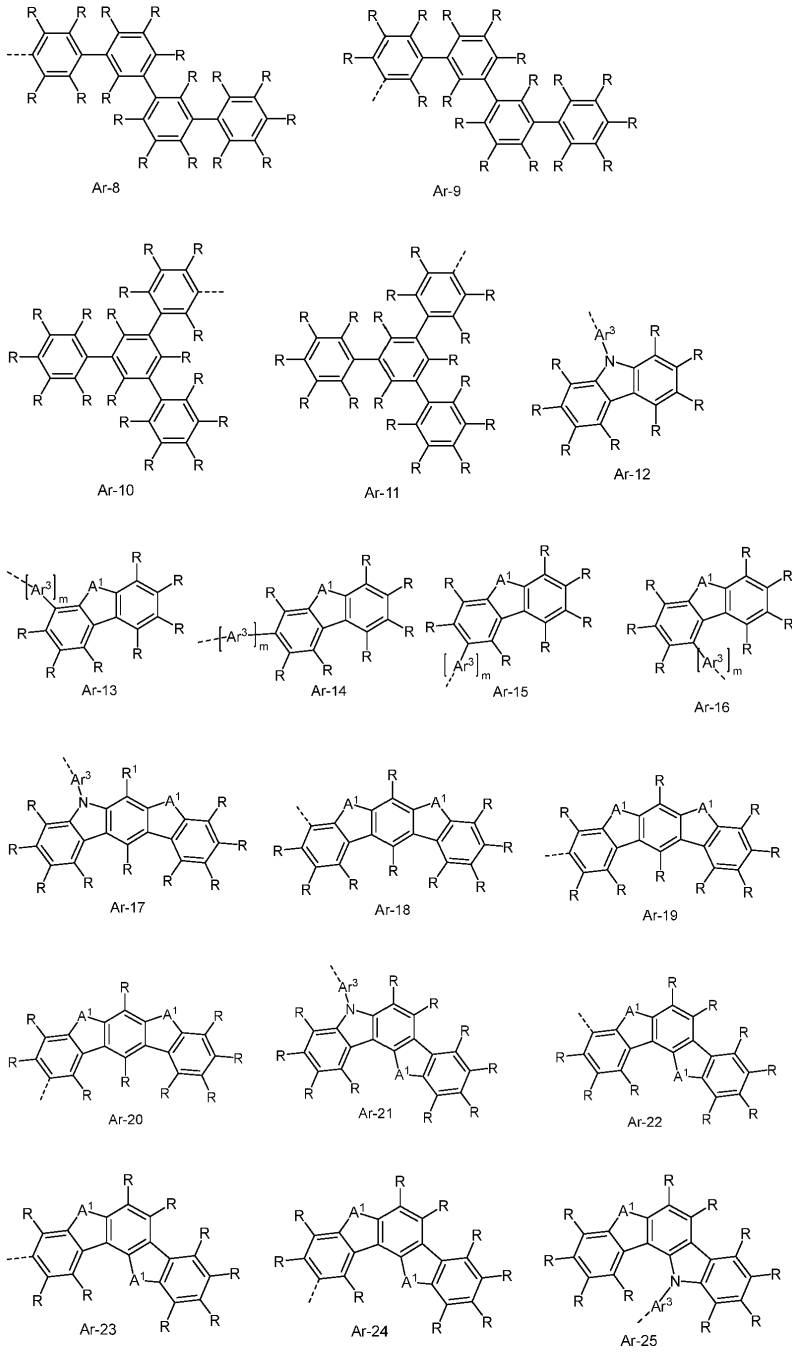
오르토-, 메타- 또는 파라-바이페닐, 테르페닐, 특히 오르토-, 메타- 또는 파라-테르페닐 또는 분지형 테르페닐, 쿼터페닐, 특히 오르토-, 메타- 또는 파라-쿼터페닐 또는 분지형 쿼터페닐, 1, 2, 3 또는 4 위치를 통해 연결될 수도 있는 플루오렌, 1, 2, 3 또는 4 위치를 통해 연결될 수도 있는 스피로바이플루오렌, 1 또는 2 위치를 통해 연결될 수 있는 나프탈렌, 인돌, 벤조푸란, 벤조티오펜, 1, 2, 3 또는 4 위치를 통해 연결될 수도 있는 카르바졸, 1, 2, 3 또는 4 위치를 통해 연결될 수도 있는 디벤조푸란, 1, 2, 3 또는 4 위치를 통해 연결될 수도 있는 디벤조티오펜, 인데노카르바졸, 인돌로카르바졸, 페난트렌, 트리페닐렌 또는 이들 기들의 2 개 또는 3 개의 조합으로부터 선택되고, 이들의 각각은 하나 이상의 R 라디칼, 바람직하게는 비방향족 R 라디칼에 의해 치환될 수도 있다.

[0058] Ar의 추가의 바람직한 실시형태들은, 이들이 방향족 고리 시스템을 나타내는 경우, 피리딘, 피리미딘, 피라진, 피리다진, 트리아진, 퀴놀린, 퀴나졸린 및 벤즈이미다졸 또는 이들 기와 위에 언급된 기 중 하나의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택된다. Ar이 헤테로아릴기, 특히 트리아진, 피리미딘, 퀴나졸린 또는 카르바졸인 경우, 이 헤테로아릴기 상의 방향족 또는 헤테로방향족 R 라디칼이 또한 바람직할 수도 있다.

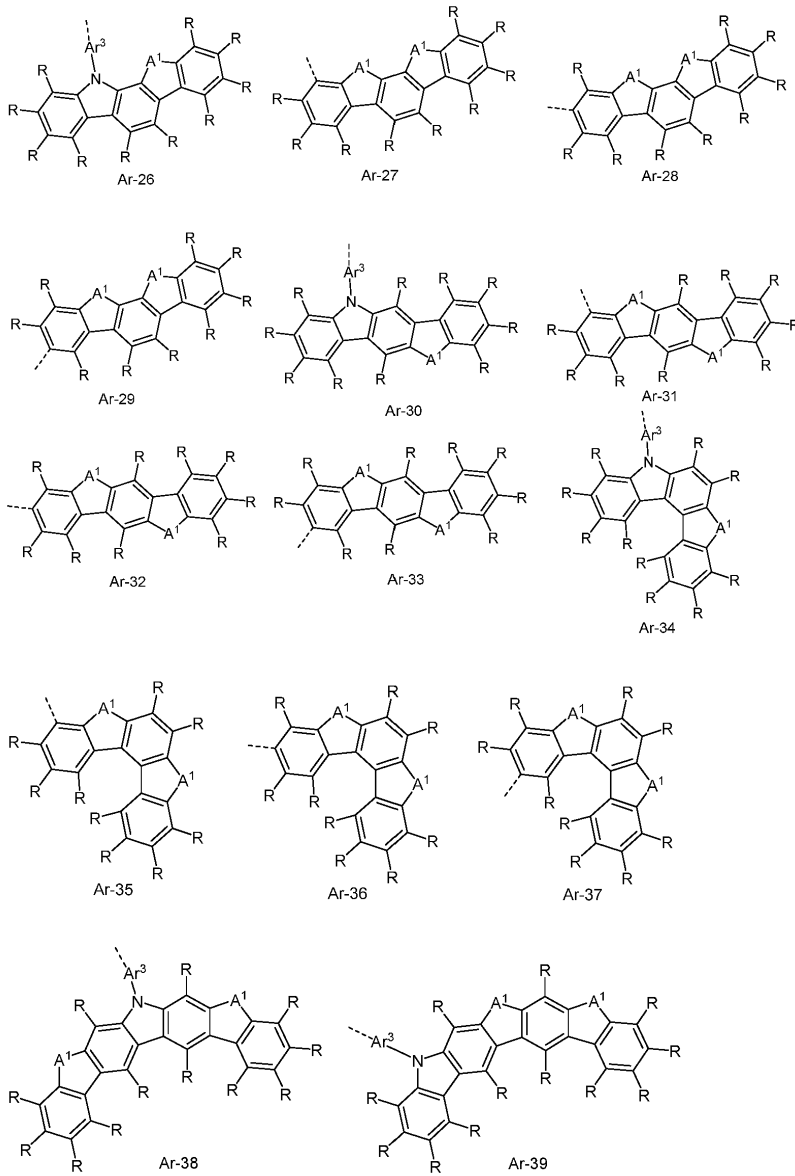
[0059] Ar은 여기서 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이며, 바람직하게 각각의 경우 동일하거나 상이하고 하기 식 Ar-1 내지 Ar-76의 기로부터 선택된다:



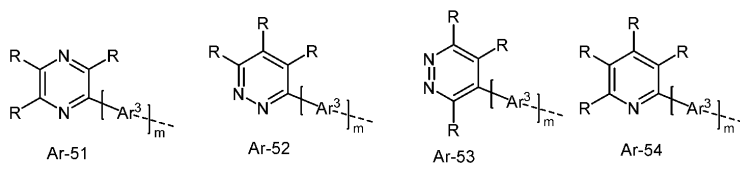
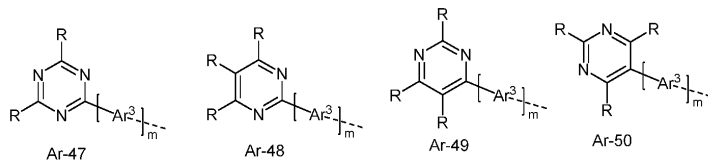
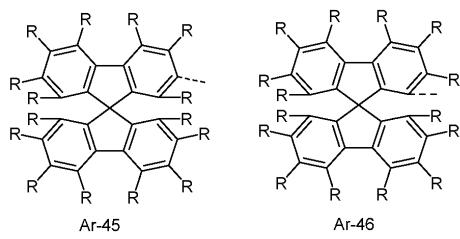
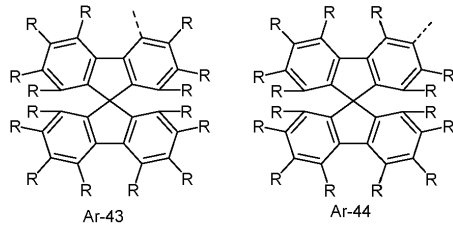
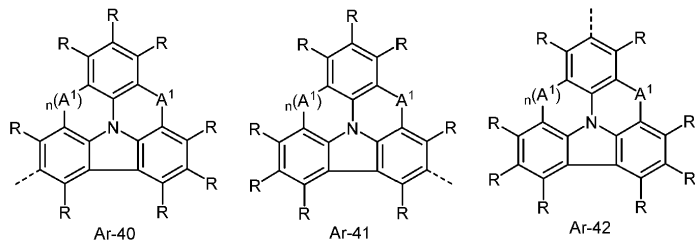
[0060]



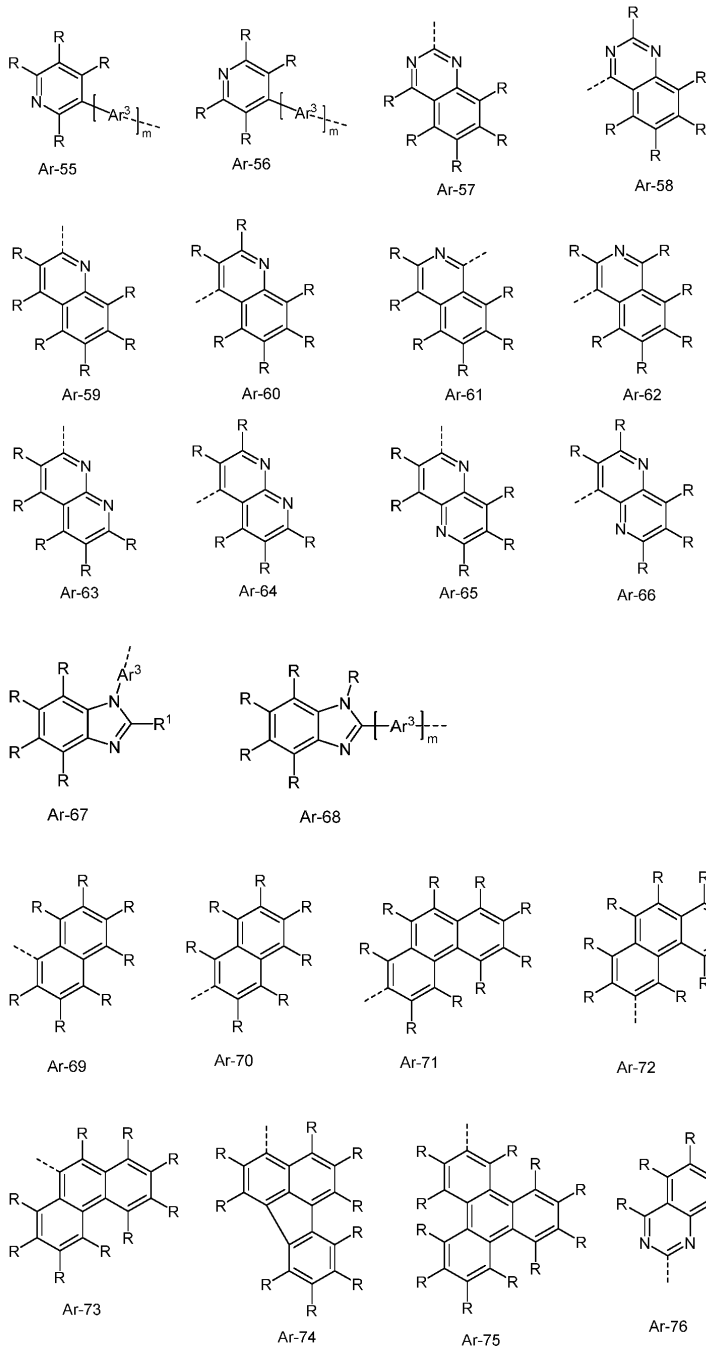
[0061]



[0062]



[0063]



[0064]

[0065] 식 중, 점선은 Ar 의 경우에 질소 원자에 대한 결합을 나타내고, 또한:

[0066] Ar³ 은 각각의 경우 동일하거나 상이하며, 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 가지며 각 경우에 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수도 있는 2가 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이다;

[0067] Ar³ 는, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자들을 갖고 하나 이상의 R 라디칼들에 의해 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이다;

[0068] A¹ 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고 NAr², O, S 또는 C(R)₂ 이다;

[0069] n 은 0 또는 1 이고, 여기서 n = 0 는, A¹ 가 이 위치에서 결합되지 않고, R 라디칼은 그의 자리에 있는 대응하는 탄소 원자에 결합됨을 의미한다;

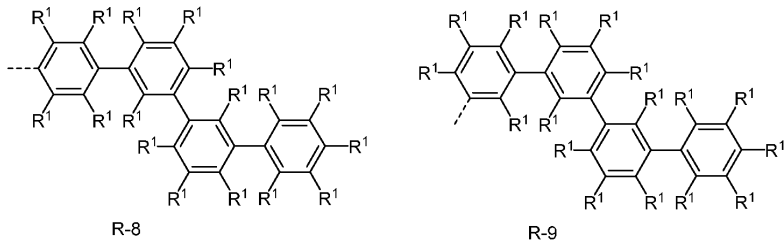
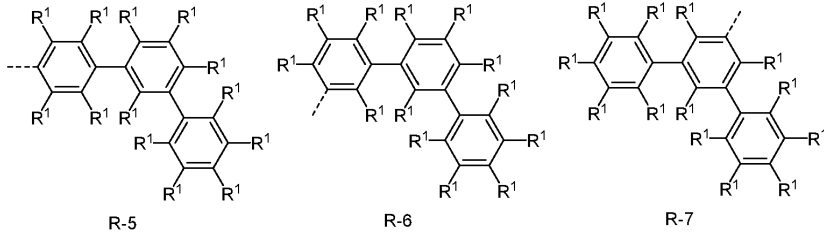
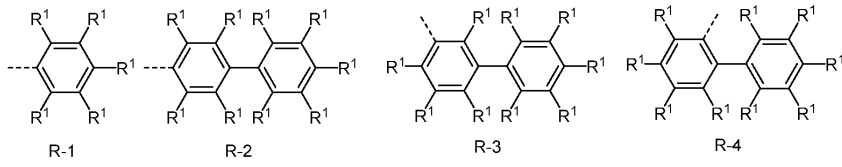
[0070] m 은 0 또는 1이고, 여기서 m = 0 은 Ar³ 가 부재하는 것 그리고 대응하는 방향족 또는 헤테로방향족 기가 질

소 원자에 직접 결합되는 것을 의미한다.

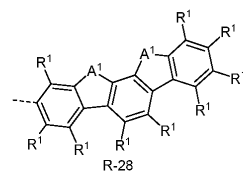
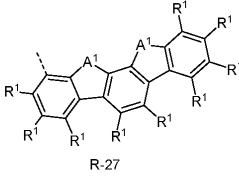
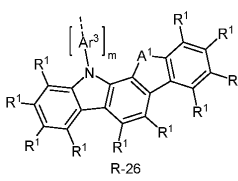
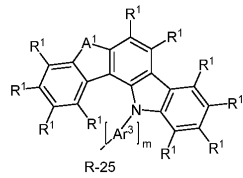
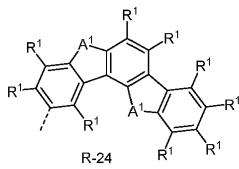
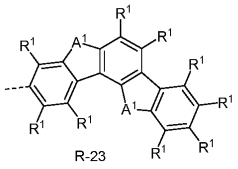
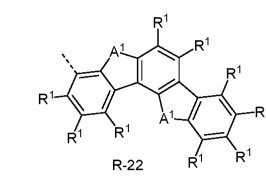
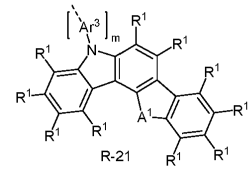
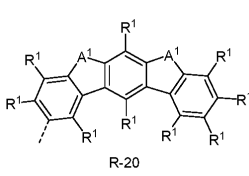
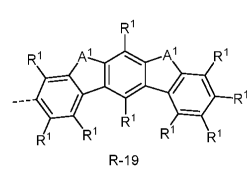
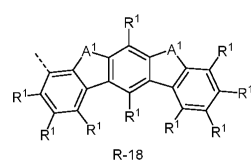
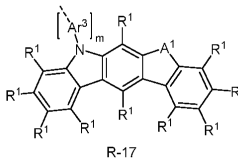
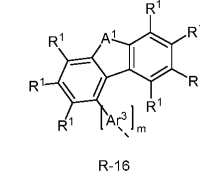
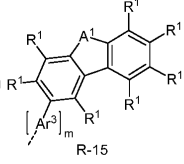
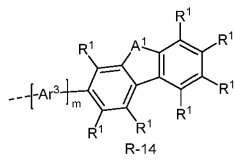
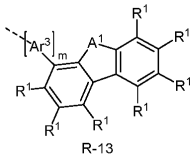
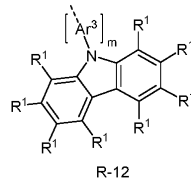
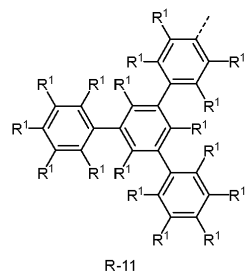
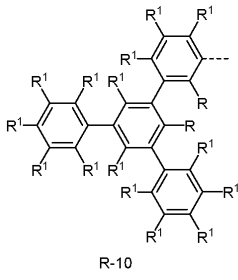
[0071] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, R 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, N(R¹)₂, CN, OR¹, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 기 또는 2 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 또는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (여기서 알킬 또는 알케닐 기는 각각 하나 이상의 R¹ 라디칼에 의해 치환될 수도 있지만 바람직하게는 치환되지 않고, 하나 이상의 비인접 CH₂ 기는 0 에 의해 대체될 수도 있음), 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의 R¹ 라디칼에 의해 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 2 개의 R 라디칼은 함께 또한 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성할 수도 있다. 더욱 바람직하게는, R 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, N(R¹)₂, 1 내지 6 개의 탄소 원자를 갖는, 특히 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 기, 또는 3 내지 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (여기서 각 경우에 알킬 기는 하나 이상의 R¹ 라디칼에 의해 치환될 수도 있으나, 바람직하게는 치환되지 않음), 또는 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의 R¹ 라디칼, 바람직하게는 비방향족 R¹ 라디칼에 의해 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어지는 군으로부터 선택된다. 가장 바람직하게는, R 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고 H, 또는 6 내지 24 개 방향족 고리 원자를 가지며 각 경우에 하나 이상의 R² 라디칼, 바람직하게는 비방향족 R¹ 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어지는 군으로부터 선택된다. 또한, R 이 하나 이상의 R¹ 라디칼로 치환될 수도 있는 트리아릴- 또는 -헤테로아릴아민 기인 경우가 바람직할 수도 있다. 이 기는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템의 일 실시형태이며, 이 경우에 둘 이상의 아릴 또는 헤테로아릴 기가 질소 원자에 의해 서로 연결된다. R 이 트리아릴- 또는 -헤테로아릴아민 기인 경우, 이 기는 바람직하게는 18 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R¹ 라디칼, 바람직하게는 비방향족 R¹ 라디칼에 의해 치환될 수도 있다.

[0072] 적합한 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 R 은 페닐, 바이페닐, 특히 오르토-, 메타- 또는 파라-바이페닐, 테르페닐, 특히 오르토-, 메타- 또는 파라-테르페닐 또는 분지형 테르페닐, 쿼터페닐, 특히 오르토-, 메타- 또는 파라-쿼터페닐 또는 분지형 쿼터페닐, 1, 2, 3 또는 4 위치를 통해 연결될 수도 있는 플루오렌, 1, 2, 3 또는 4 위치를 통해 연결될 수도 있는 스피로바이플루오렌, 1 또는 2 위치를 통해 연결될 수도 있는 나프탈렌, 인돌, 벤조푸란, 벤조티오펜, 1, 2, 3 또는 4 위치를 통해 연결될 수도 있는 카르바졸, 1, 2, 3 또는 4 위치를 통해 연결될 수도 있는 디벤조푸란, 1, 2, 3 또는 4 위치를 통해 연결될 수도 있는 디벤조티오펜, 인데노카르바졸, 인돌로카르바졸, 피리딘, 피리미딘, 피라진, 피리다진, 트리아진, 퀴놀린, 퀴나졸린, 벤즈이미다졸, 페난트렌, 트리페닐렌 또는 이들 기들 중 2 개 또는 3 개의 조합으로부터 선택되고, 이들의 각각은 하나 이상의 R¹ 라디칼에 의해 치환될 수도 있다. R 이 헤테로아릴 기, 특히 트리아진, 피리미딘 또는 퀴나졸린인 경우, 이 헤테로아릴 기 상의 방향족 또는 헤테로방향족 R¹ 라디칼이 또한 바람직할 수도 있다.

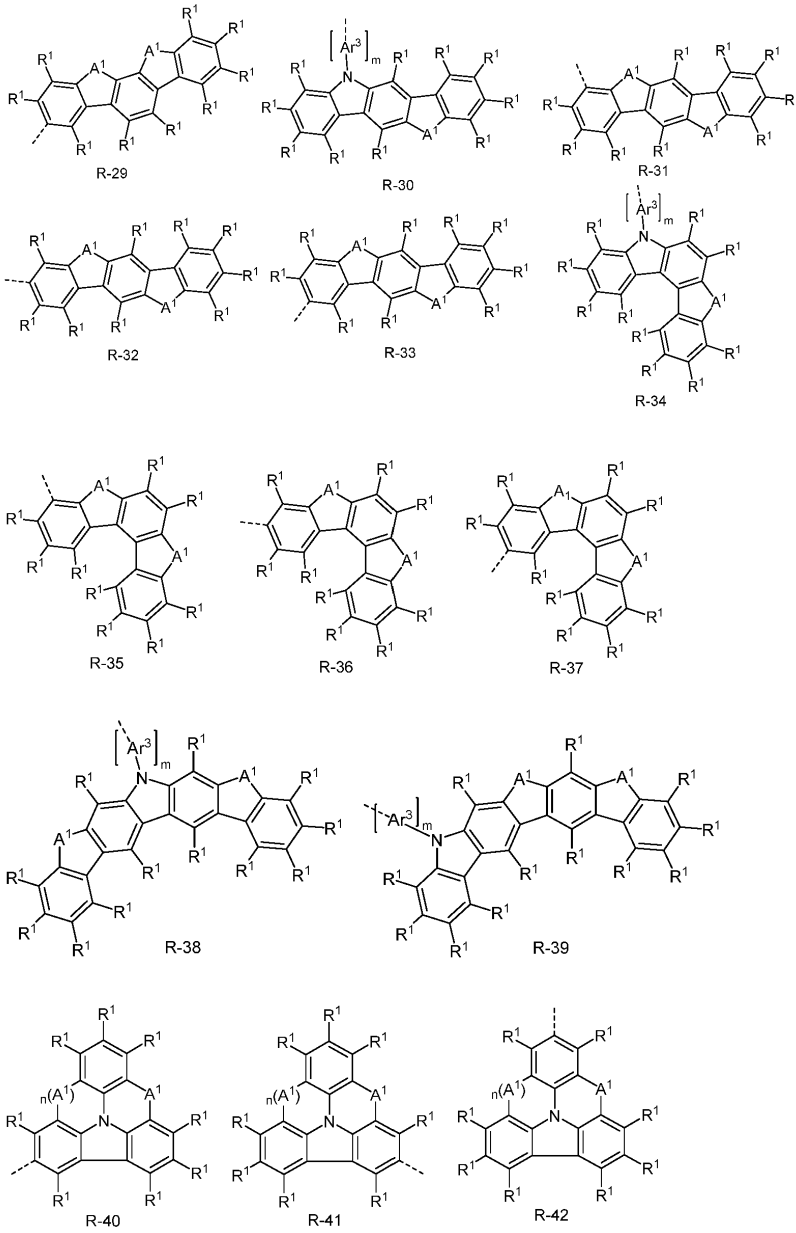
[0073] 여기서 R 기는, 이들이 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템인 경우, 바람직하게는 하기 식 R-1 내지 R-76 의 기들로부터 선택된다:



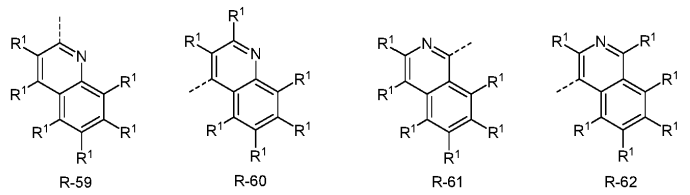
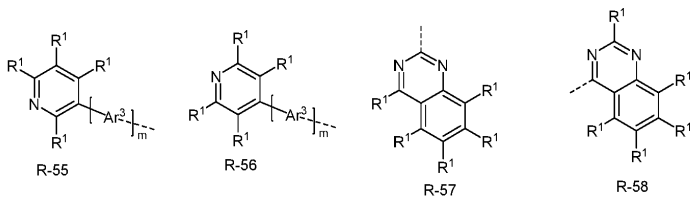
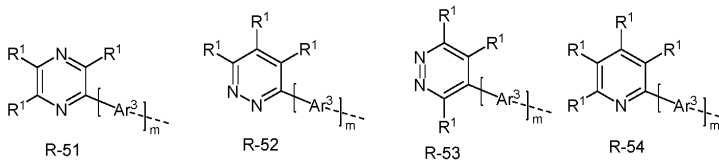
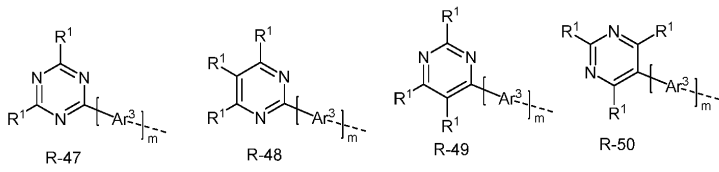
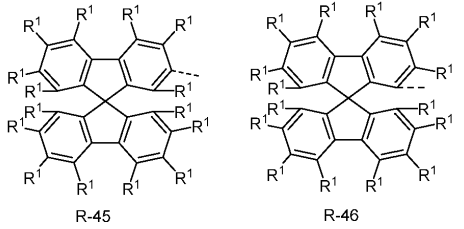
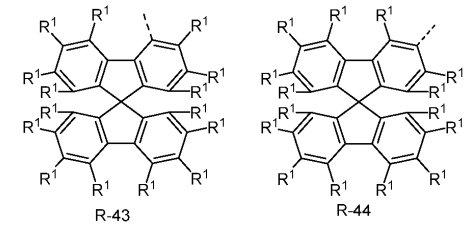
[0074]



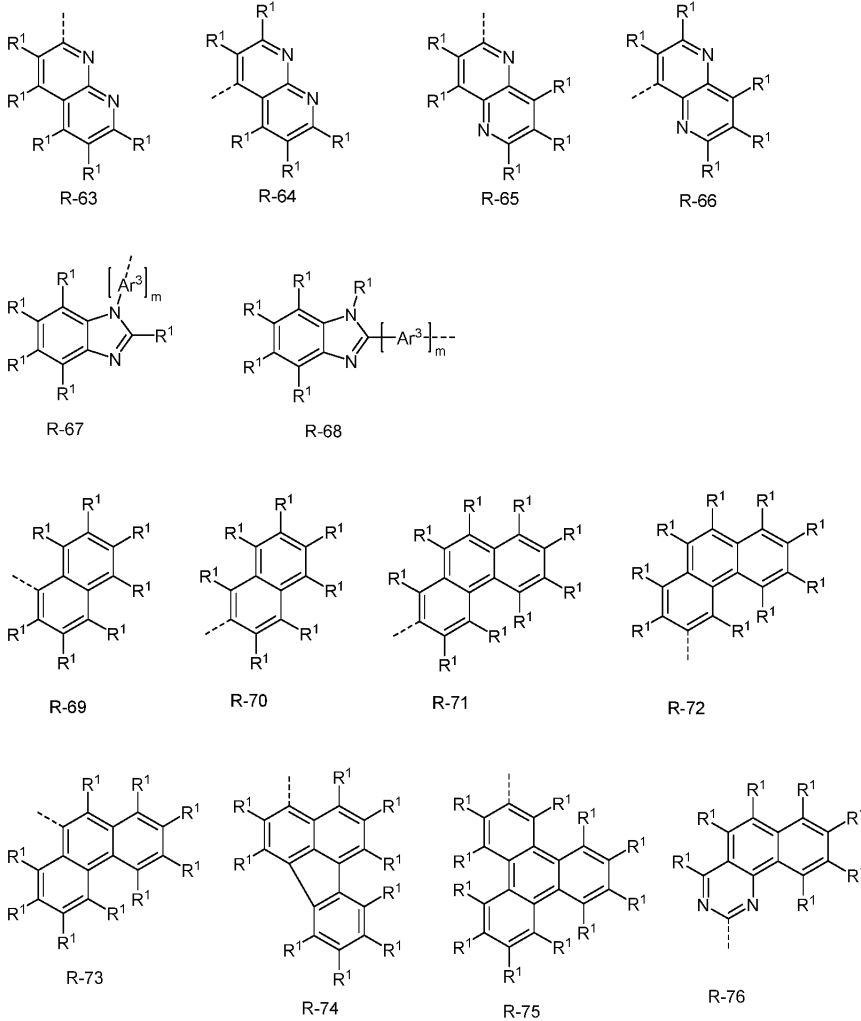
[0075]



[0076]



[0077]



[0078]

[0079] 식중 R¹ 은 위에 주어진 정의를 갖고, 점선 결합은 식 (1) 또는 (2) 에서 또는 바람직한 실시형태에서 베이스 골격의 탄소 원자에 대한 결합을 나타내고, 추가로:

[0080] Ar³ 은 각각의 경우 동일하거나 상이하며, 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 가지며 각 경우에 하나 이상의 R¹ 라디칼로 치환될 수도 있는 2가 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고;

[0081] A¹ 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, C(R¹)₂, NR¹, O 또는 S 이고;

[0082] n 은 0 또는 1 이고, 여기서 n = 0 는, A 기가 이 위치에서 결합되지 않고, 그 대신 R¹ 라디칼이 대응하는 탄소 원자에 결합됨을 의미하고;

[0083] m 은 0 또는 1이고, 여기서 m = 0 은 Ar³ 기가 부재하는 것 그리고 대응하는 방향족 또는 헤테로방향족 기가 식 (1) 또는 식 (2) 에서 또는 바람직한 실시형태에서 베이스 골격의 탄소 원자에 직접 결합됨을 의미한다;

[0084] 전술된 Ar 에 대한 Ar-1 내지 Ar-76 기 및 R 에 대한 R-1 내지 R-76 기가 둘 이상의 A¹ 기를 갖는 경우, 이들에 대한 가능한 선택들은 A¹ 의 정의로부터의 모든 조합들을 포함한다. 그 경우에 바람직한 실시형태는 하나의 A¹ 기가 NR 또는 NR¹ 이고 다른 하나의 A¹ 기가 C(R)₂ 또는 C(R¹)₂ 이거나 또는 두 A¹ 기 모두가 NR 또는 NR¹ 이거나 또는 두 A¹ 기 모두가 O 인 것들이다. 본 발명의 특히 바람직한 실시형태에서, 둘 이상의 A¹ 기를 갖는 Ar¹, Ar² 또는 R 기에서, 적어도 하나의 A¹ 기는 C(R¹)₂ 또는 NR¹ 이다.

[0085] A¹ 이 NR¹ 인 경우, 질소 원자에 결합된 치환기 R¹ 은 바람직하게는, 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자들을 갖고

또한 하나 이상의 R^2 라디칼들에 의해 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이다. 특히 바람직한 실시형태에서, 이 R^1 치환기는 각각의 경우 동일하거나 상이하며 6 내지 24개의 방향족 고리 원자, 바람직하게는 6 내지 12 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 이는 2 개 이상의 방향족 또는 헤테로방향족 6원 고리 기들이 서로 직접 융합되는 융합된 아릴 기 또는 헤테로아릴 기를 갖지 않으며, 또한, 하나 이상의 R^2 라디칼에 의해 각 경우에 치환될 수도 있다. Ar-1 내지 Ar-11 또는 R-1 내지 R-11에 대해 위에 열거된 바와 같은 결합 패턴을 갖는 페닐, 바이페닐, 테르페닐 및 쿼터페닐이 특히 바람직하고, 여기서 이들 구조들은 하나 이상의 R^2 라디칼에 의해 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않는다.

[0086] A^1 이 $C(R^1)_2$ 인 경우, 이 탄소 원자에 결합된 치환기 R^1 은 바람직하게는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 선형 알킬 기 또는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 또는 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 이는 또한 하나 이상의 R^2 라디칼에 의해 치환될 수도 있다. 가장 바람직하게는, R^1 은 메틸기 또는 페닐기이다. 이 경우, R^1 라디칼은 함께 또한, 스피로 시스템에 이르는 고리 시스템을 형성할 수도 있다.

[0087] Y 또는 Y^1 이 CR_2 인 경우, 이 탄소 원자에 결합된 치환기 R 는 바람직하게는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 선형 알킬 기 또는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 또는 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 이는 또한 하나 이상의 R^1 라디칼에 의해 치환될 수도 있다. 가장 바람직하게, 이들 치환기 R 은 메틸기 또는 페닐기이다. 이 경우, R 라디칼은 함께 또한, 스피로 시스템에 이르는 고리 시스템을 형성할 수도 있다.

[0088] 본 발명의 하나의 실시 형태에서, 적어도 하나의 R 라디칼은 전자 풍부 헤테로방향족 고리 시스템이다. 이러한 전자 풍부 헤테로방향족 고리 시스템은 바람직하게는 위에 기술된 R-13 내지 R-42 기로부터 선택되며, 여기서, R-13 내지 R-16, R-18 내지 R-20, R-22 내지 R-24, R-27 내지 R-29, R-31 내지 R-33 및 R-35 내지 R-37 기에서, 적어도 하나의 A^1 기는 NR^1 이고 여기서 R^1 은 바람직하게는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 특히 방향족 고리 시스템이다. $m = 0$ 이고 $A^1 = NR^1$ 인 R-15 기가 특히 바람직하다.

[0089] 본 발명의 추가의 실시 형태에서, 적어도 하나의 R 라디칼은 전자 결핍 헤테로방향족 고리 시스템이다. 이러한 전자-결핍 헤테로방향족 고리 시스템은 바람직하게는 위에 기술된 R-47 내지 R-50, R-57, R-58 및 R-76 기로부터 선택된다.

[0090] 본 발명의 하나의 실시 형태에서, 적어도 하나의 Ar 라디칼은 전자 풍부 헤테로방향족 고리 시스템이다. 이러한 전자 풍부 헤테로방향족 고리 시스템은 바람직하게는 위에 묘사된 기 Ar-13 내지 Ar-42 로부터 선택되고, 여기서 기 Ar-13 내지 Ar-16, Ar-18 내지 Ar-20, Ar-22 내지 Ar-24, Ar-27 내지 Ar-29, Ar-31 내지 Ar-33 및 Ar-35 내지 Ar-37 에서, 바람직하게는 적어도 하나의 A^1 기는 NAr^2 이고, 여기서 Ar^2 는 바람직하게 방향족 고리 시스템이다.

[0091] 본 발명의 추가의 실시형태에서, 적어도 하나의 Ar 라디칼은 전자 결핍 헤테로방향족 고리 시스템이다. 이러한 전자 결핍 헤테로방향족 고리 시스템은 바람직하게는 위에 기술된 Ar-47 to Ar-50, Ar-57, Ar-58 및 Ar-76 기로부터 선택된다.

[0092] 본 발명의 추가의 바람직한 실시형태에서, R^1 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, CN, OR^2 , 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 기 또는 2 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 또는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (여기서 알킬 또는 알케닐 기는 각 경우에 하나 이상의 R^2 라디칼에 의해 치환될 수도 있고, 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 0 에 의해 대체될 수도 있음), 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의 R^2 라디칼에 의해 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 둘 이상의 R^1 라디칼은 함께 지방족 고리 시스템을 형성할 수도 있다. 본 발명의 특히 바람직한 실시형태에서, R^1 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, 1 내지 6

개의 탄소 원자를 갖는, 특히 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 기, 또는 3 내지 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (여기서 알킬 기는 하나 이상의 R^2 라디칼에 의해 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않음), 또는 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의 R^2 라디칼로 치환될 수도 있지만 바람직하게는 치환되지 않는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어지는 군으로부터 선택된다.

[0093] 본 발명의 추가의 바람직한 실시형태에서, R^2 는 각각의 경우 동일하거나 상이하하며, H, F, 1 내지 4 개의 탄소 원자를 갖는 알킬 기 또는 6 내지 10개의 탄소 원자를 갖는 아릴 기이고, 이는 1 내지 4개의 탄소 원자를 갖는 알킬 기로 치환될 수도 있지만 바람직하게는 치환되지 않는다.

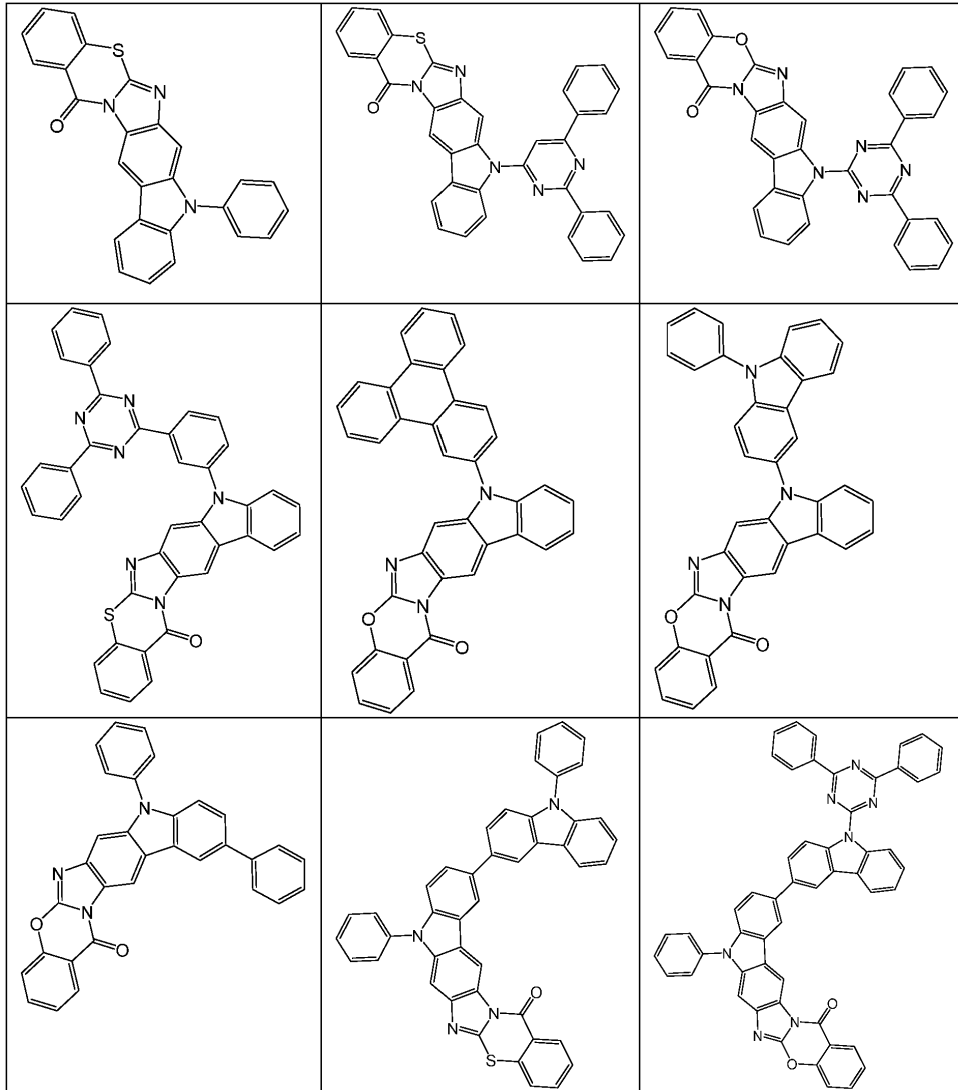
[0094] 동시에, 진공 증발에 의해 처리되는 본 발명의 화합물에서, 알킬 기는 바람직하게는 5 개 이하의 탄소 원자, 더욱 바람직하게는 4 개 이하의 탄소 원자, 가장 바람직하게는 1 개 이하의 탄소 원자를 갖는다. 용액으로부터 처리되는 화합물에 대해, 적합한 화합물은 또한 10 개 이하의 탄소 원자를 갖는, 알킬 기, 특히, 분지형 알킬 기에 의해 치환된 것들 또는 올리고아릴렌 기, 예를 들어 오르토-, 메타-, 파라-테르페닐 또는 분지형 테르페닐 또는 쿼터페닐 기에 의해 치환된 것들이다.

[0095] 식 (1) 의 화합물 또는 바람직한 실시형태의 화합물이 인광 방출체를 위한 매트릭스 재료로서 또는 인광 층에 바로 인접한 층에서 사용될 때, 또한 그 화합물은 2개보다 많은 6원 고리들이 서로 직접 융합되는 융합된 아릴 또는 헤테로아릴 기들을 함유하는 않는 경우가 바람직하다. Ar, R, R^1 및 R^2 라디칼이 2 개 이상의 6-원 고리들이 서로 직접 융합되는 융합된 아릴 또는 헤테로아릴 기들을 함유하지 않는 경우가 특히 바람직하다. 이에 대한 예외는 페난트렌, 트리페닐렌 및 퀴나졸린에 의해 형성되는데, 이들은, 그들의 높은 삼중항 에너지로 인하여, 융합된 방향족 6원 고리들의 존재에도 불구하고 바람직할 수도 있다.

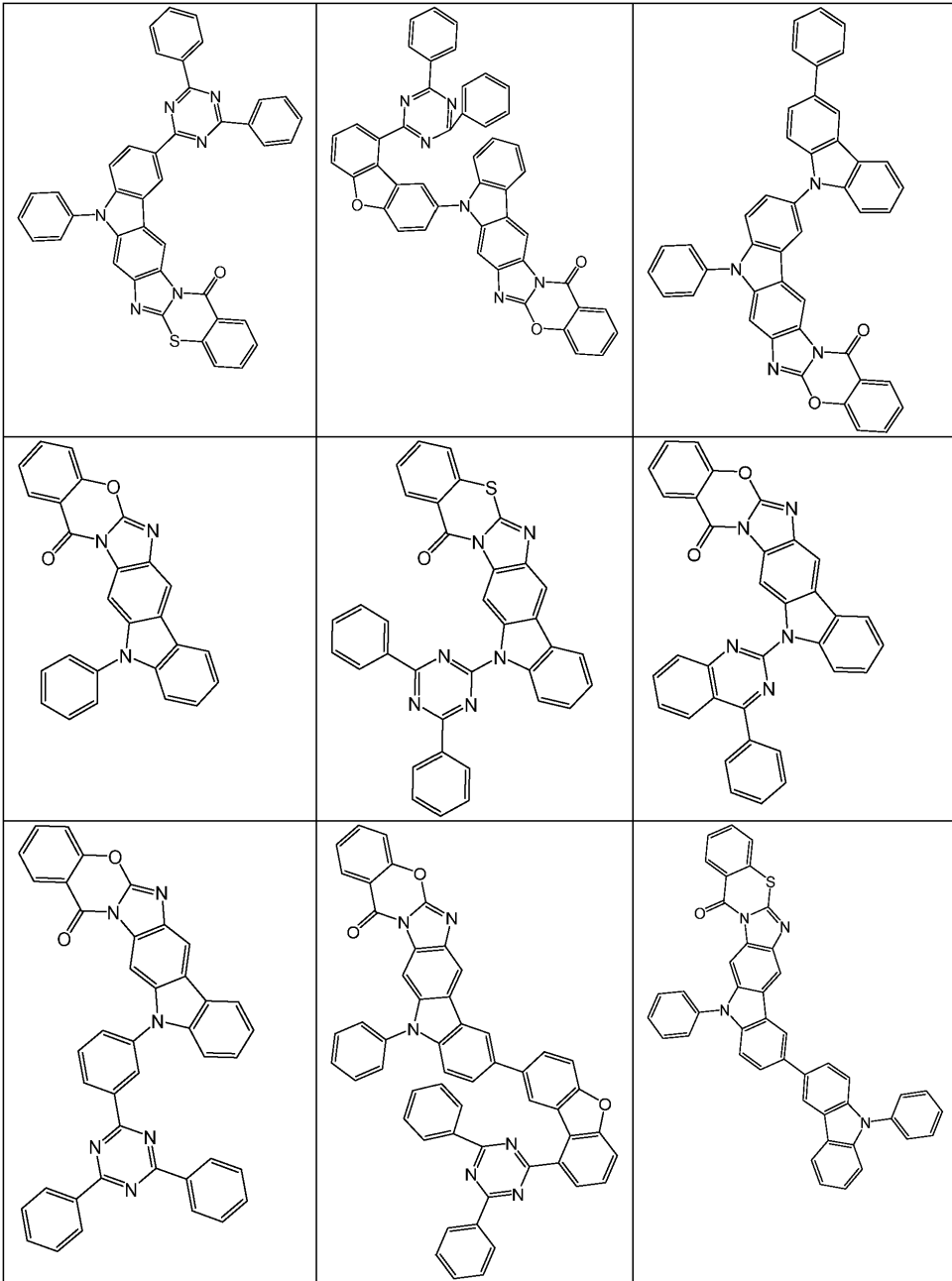
[0096] 위에 언급된 바람직한 실시형태들은 청구항 1에 정의된 제한들 내에서 원하는 대로 서로 조합될 수도 있다. 본 발명의 특히 바람직한 실시형태에서, 위에 언급된 바람직한 것들은 동시에 발생한다.

[0097]

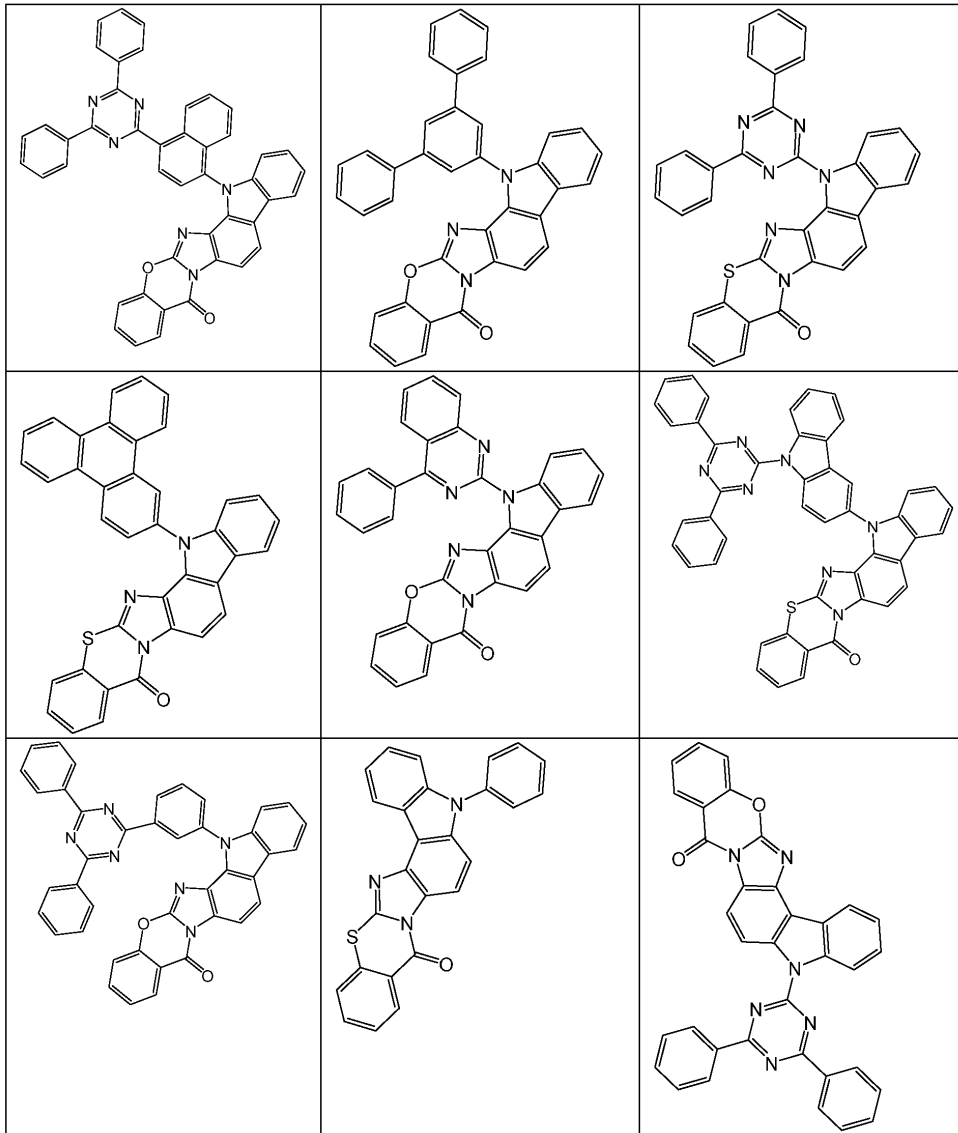
위에 상세히 나타낸 실시형태에 따른 바람직한 화합물의 예는 아래 표에 상세히 나타낸 화합물이다:



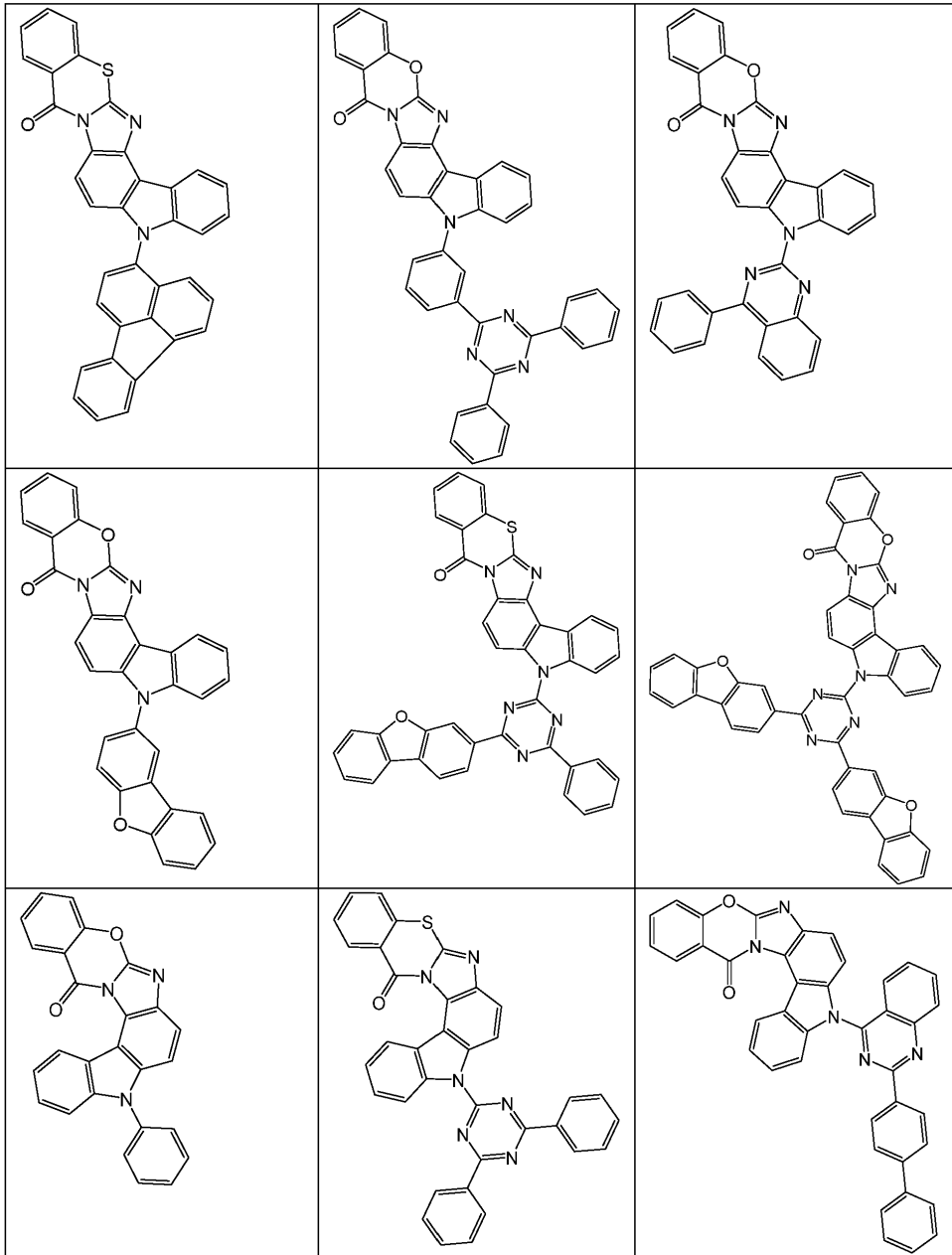
[0098]



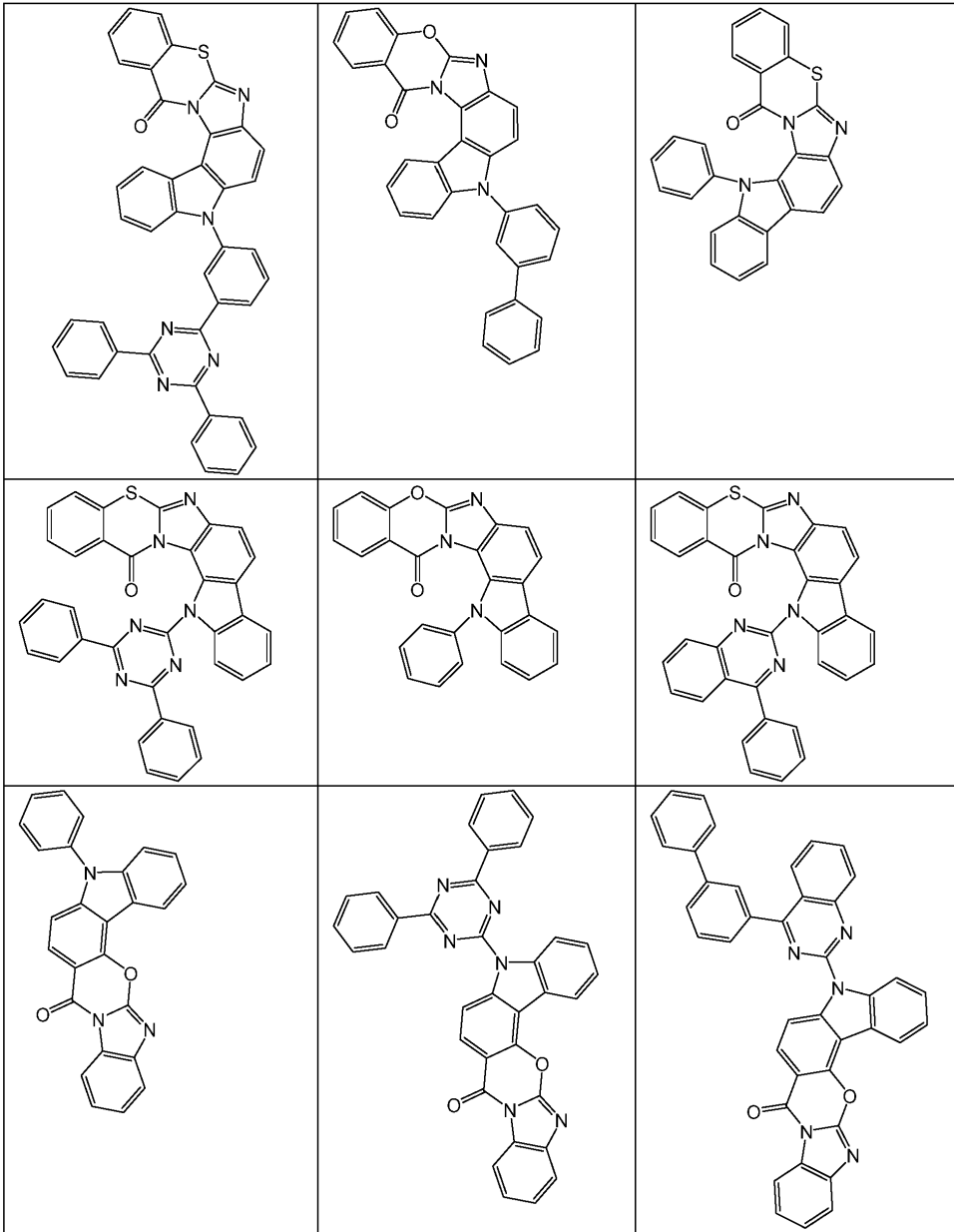
[0099]



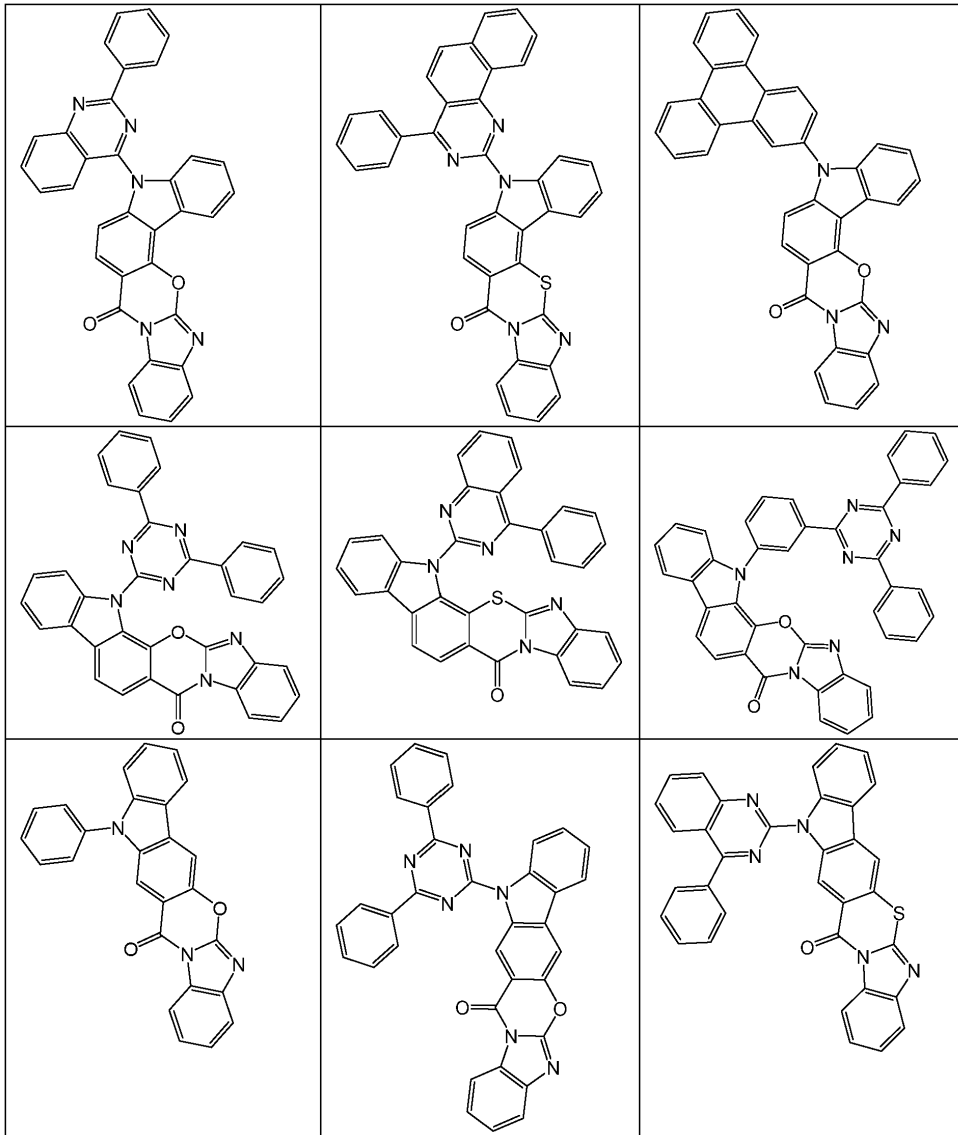
[0100]



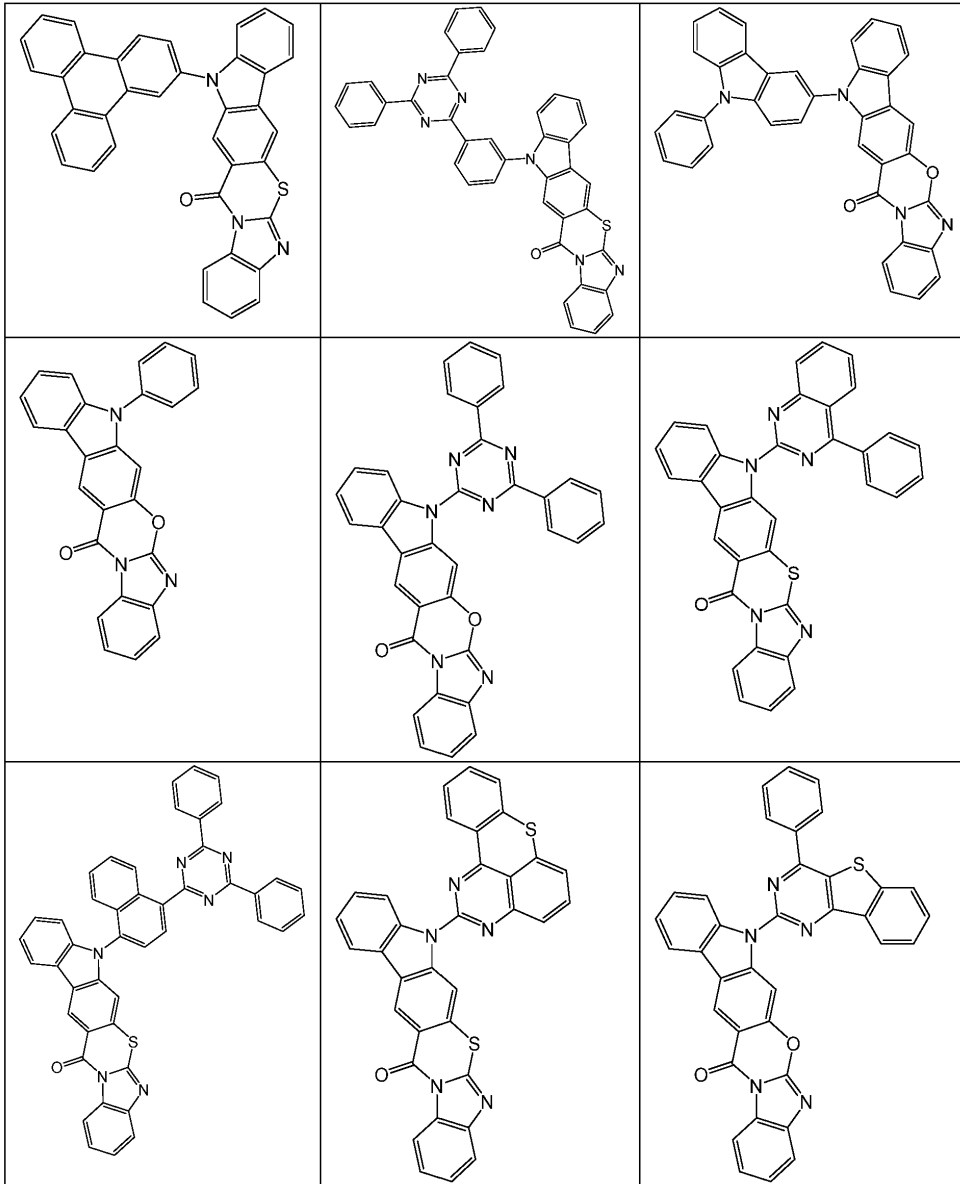
[0101]



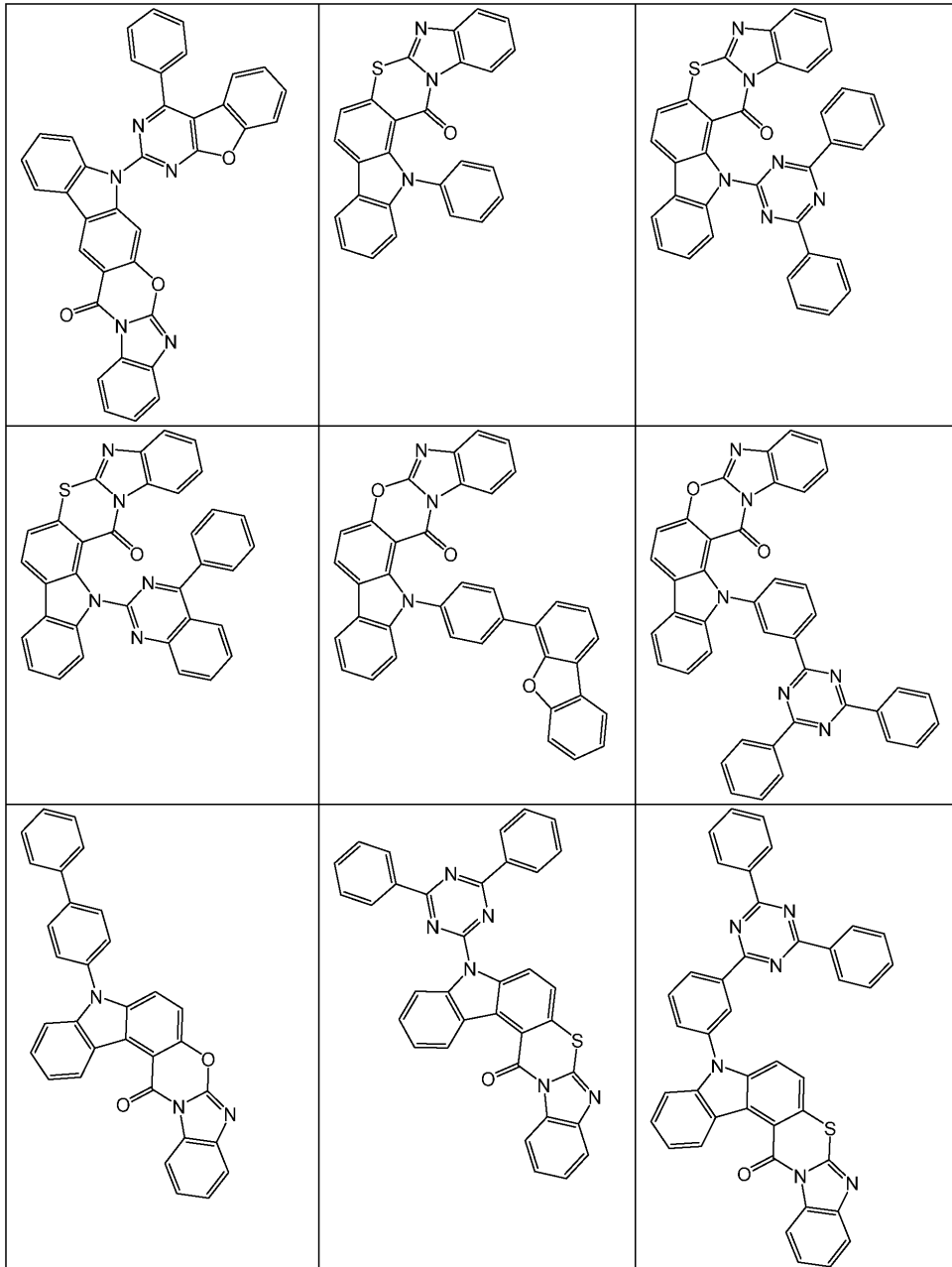
[0102]



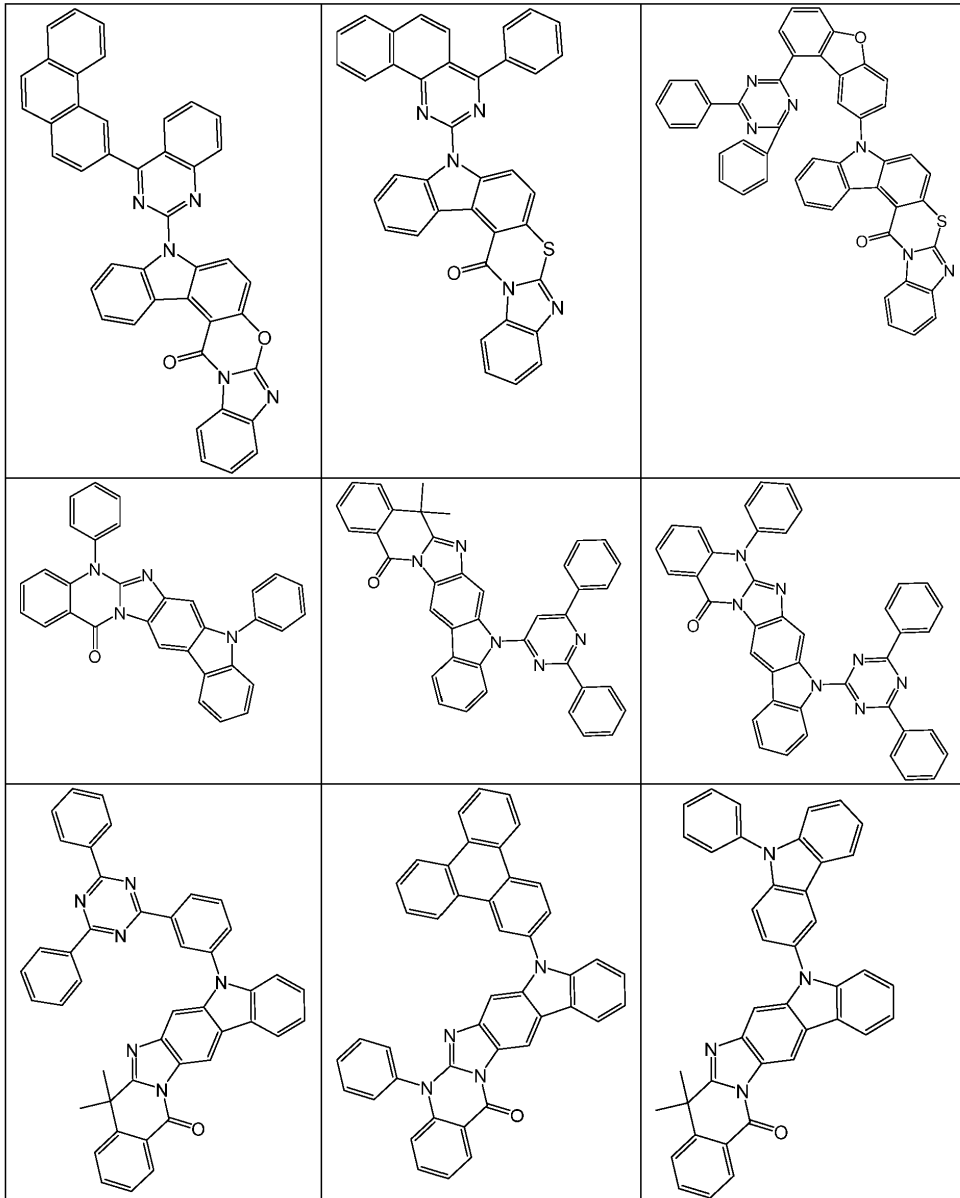
[0103]



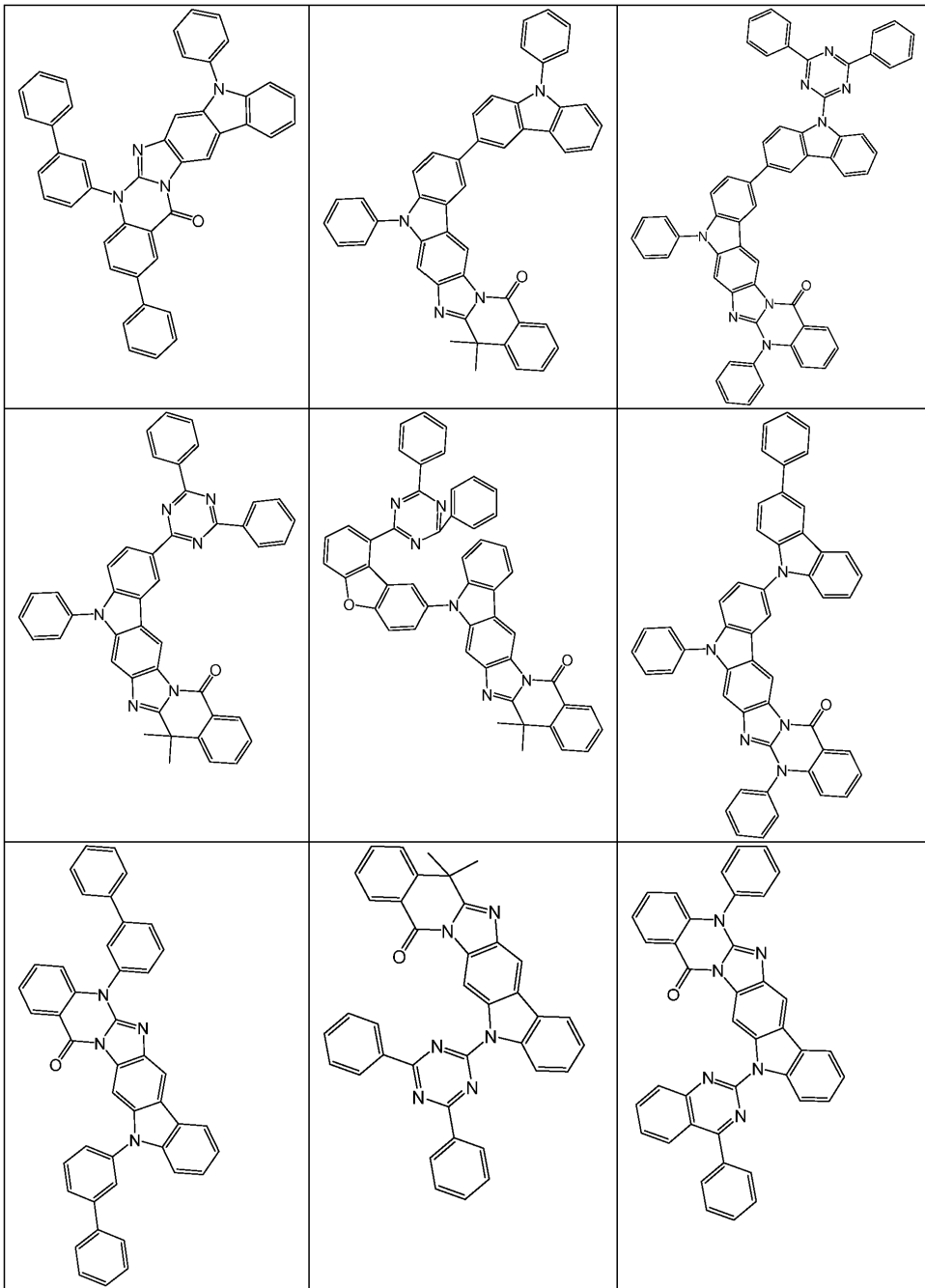
[0104]



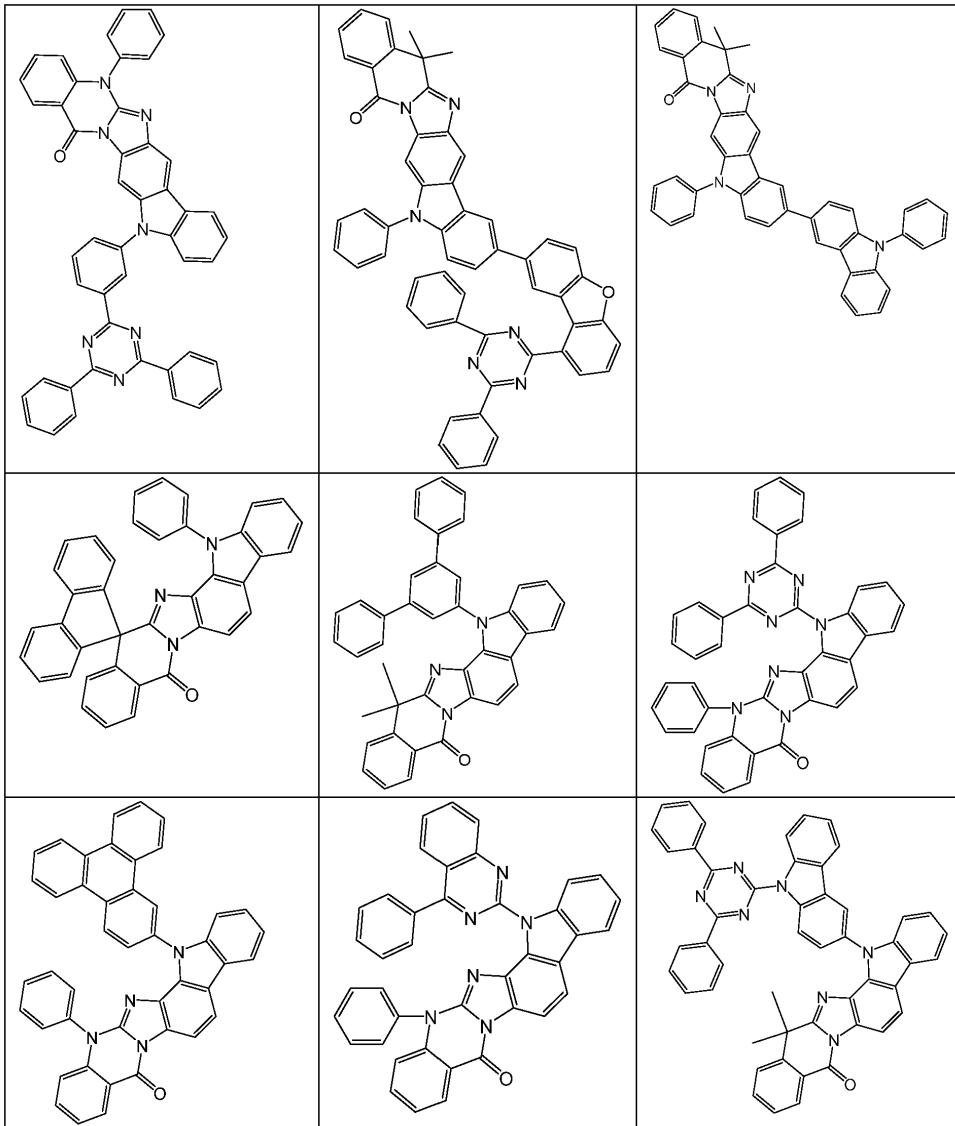
[0105]



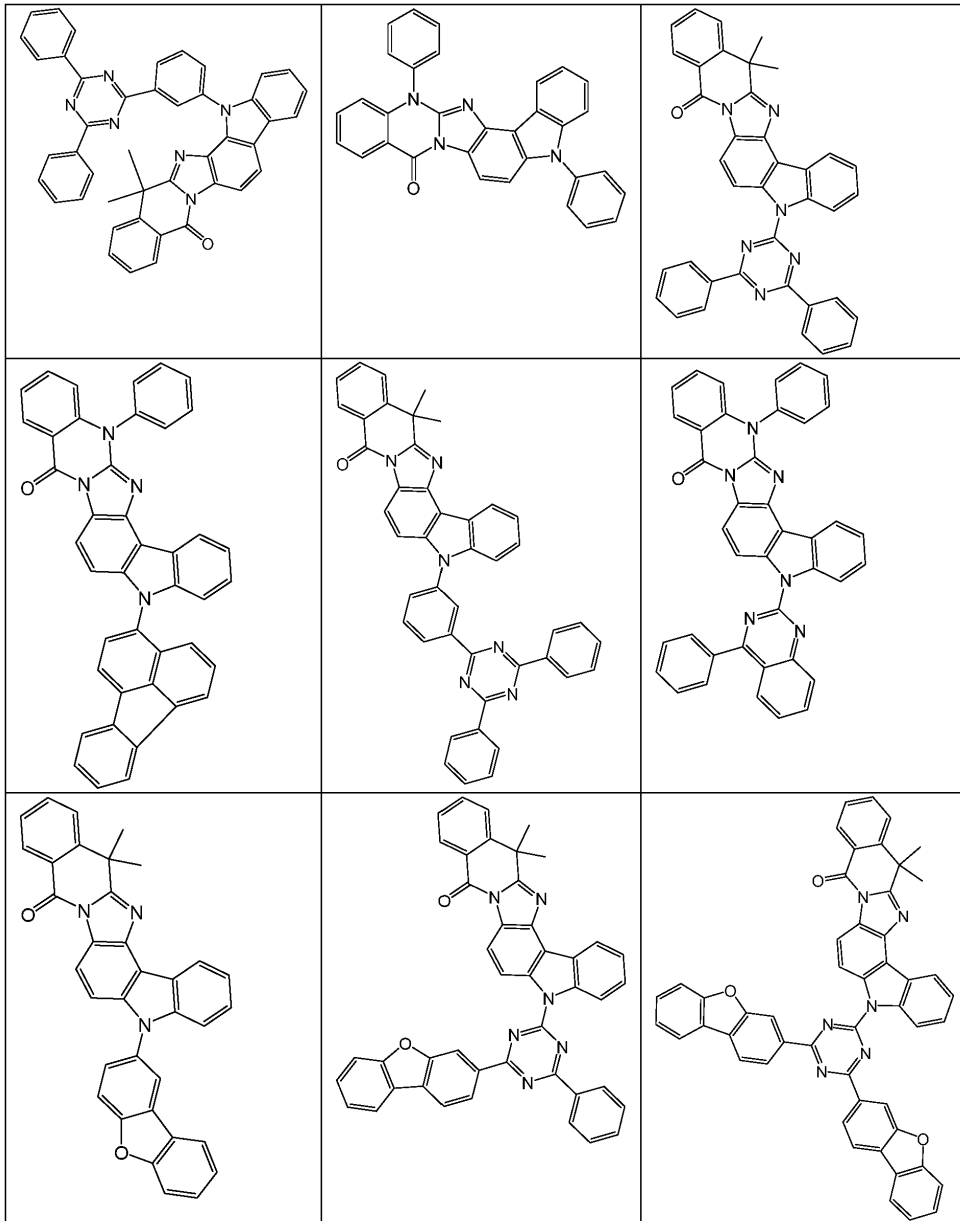
[0106]



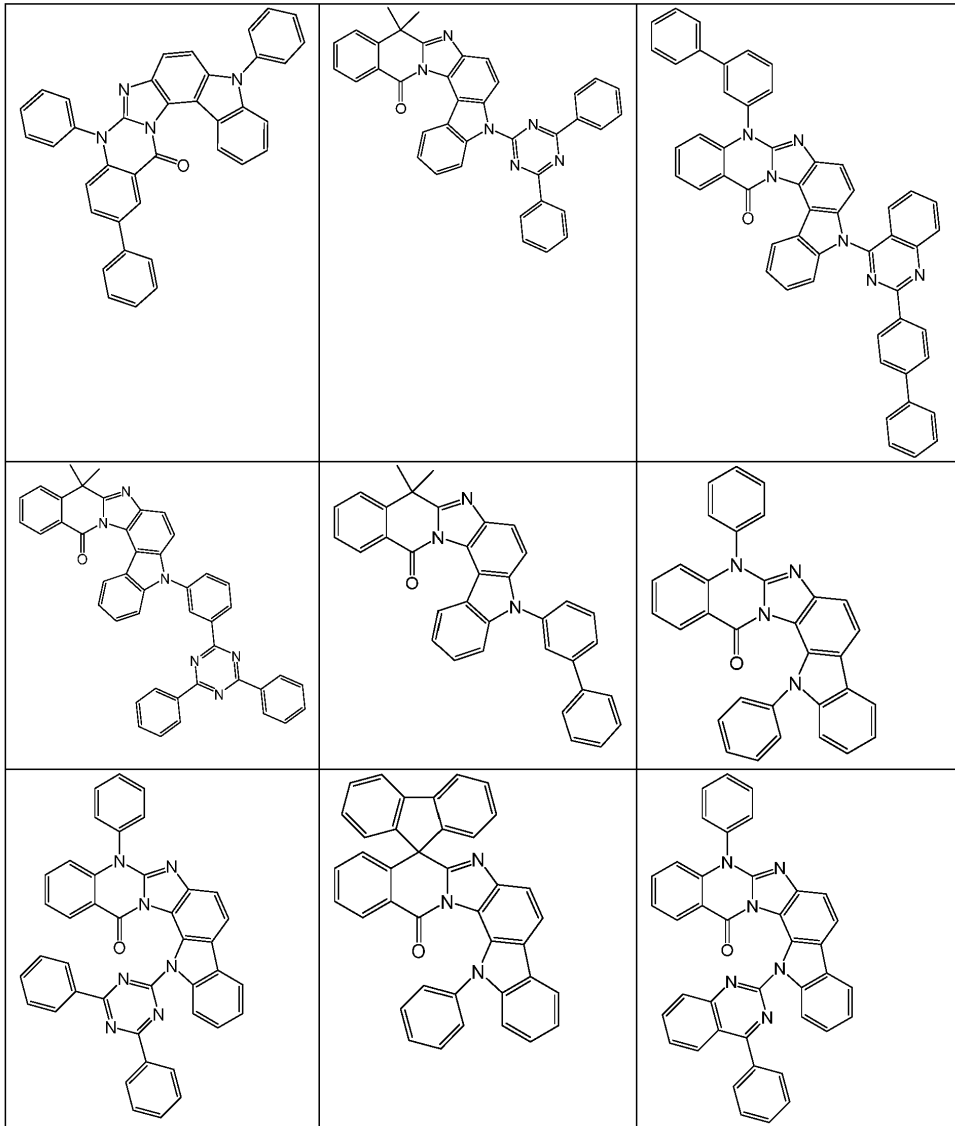
[0107]



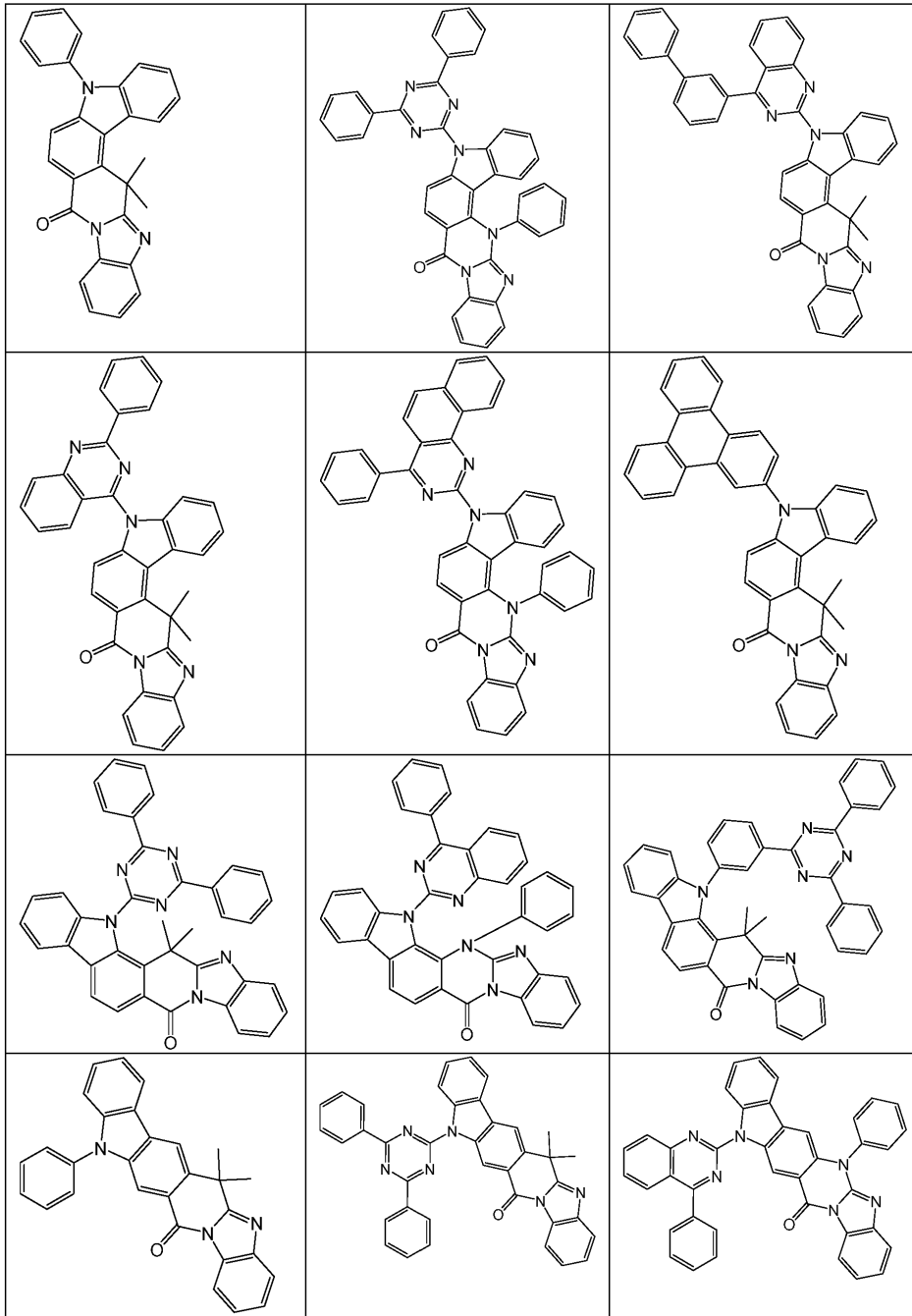
[0108]



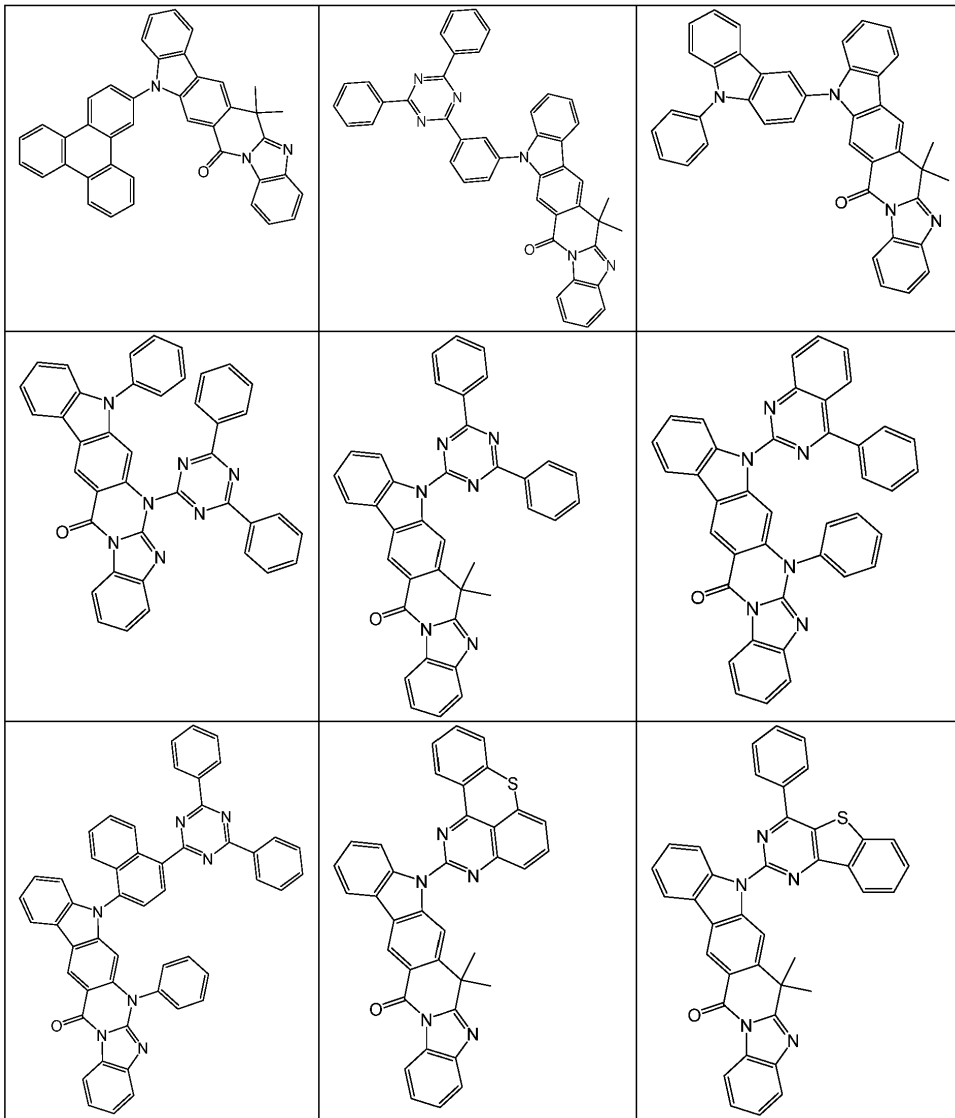
[0109]



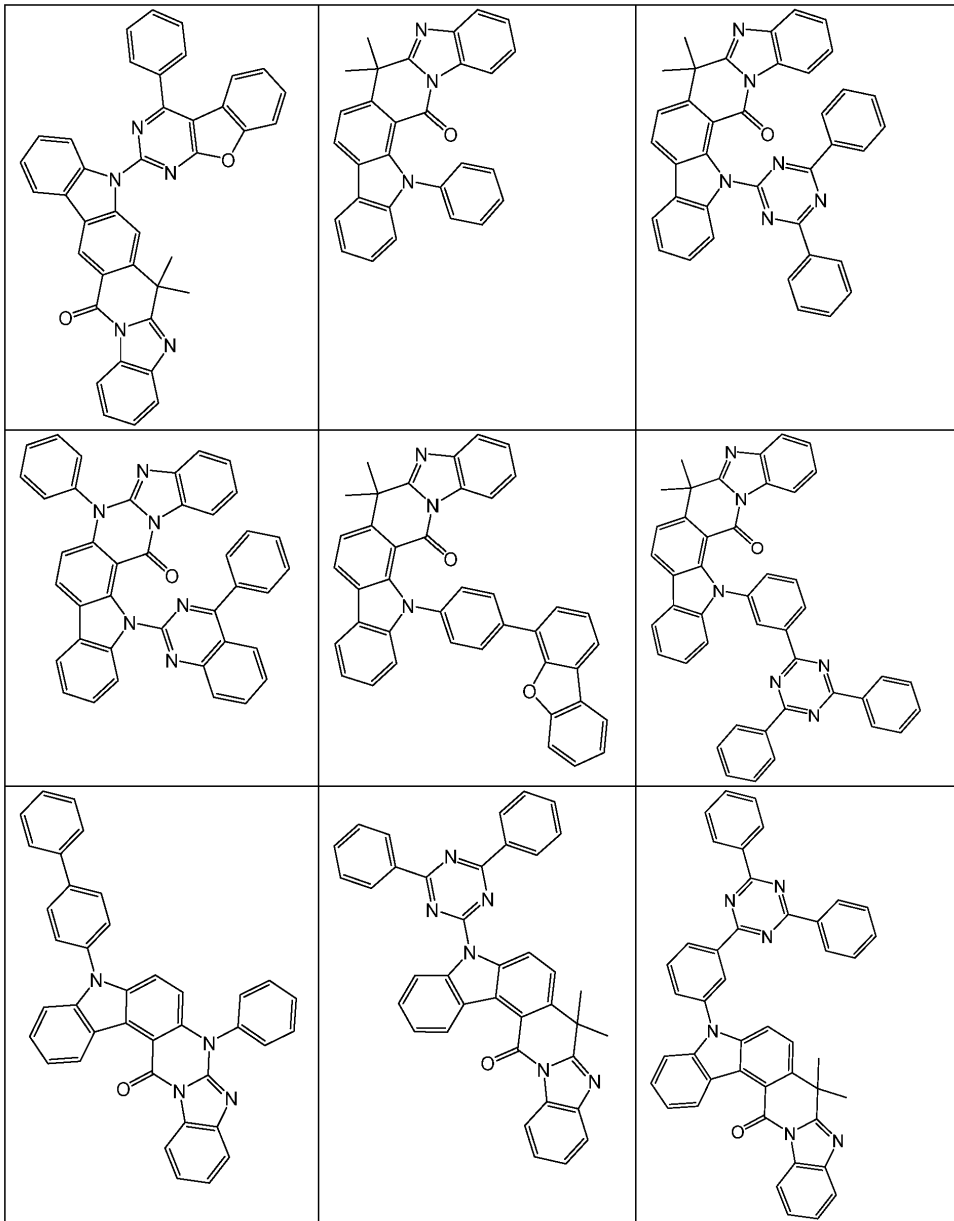
[0110]



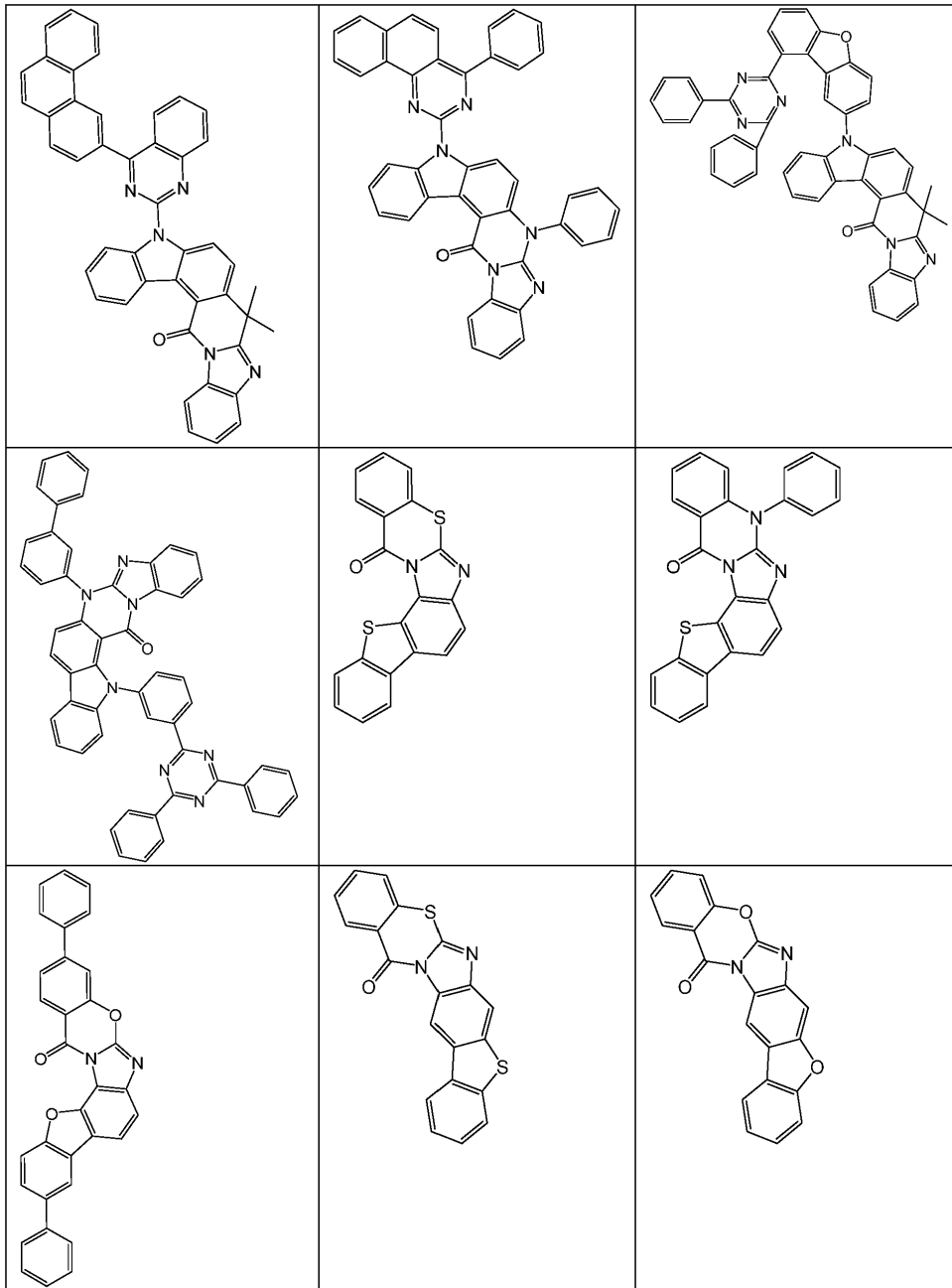
[0111]



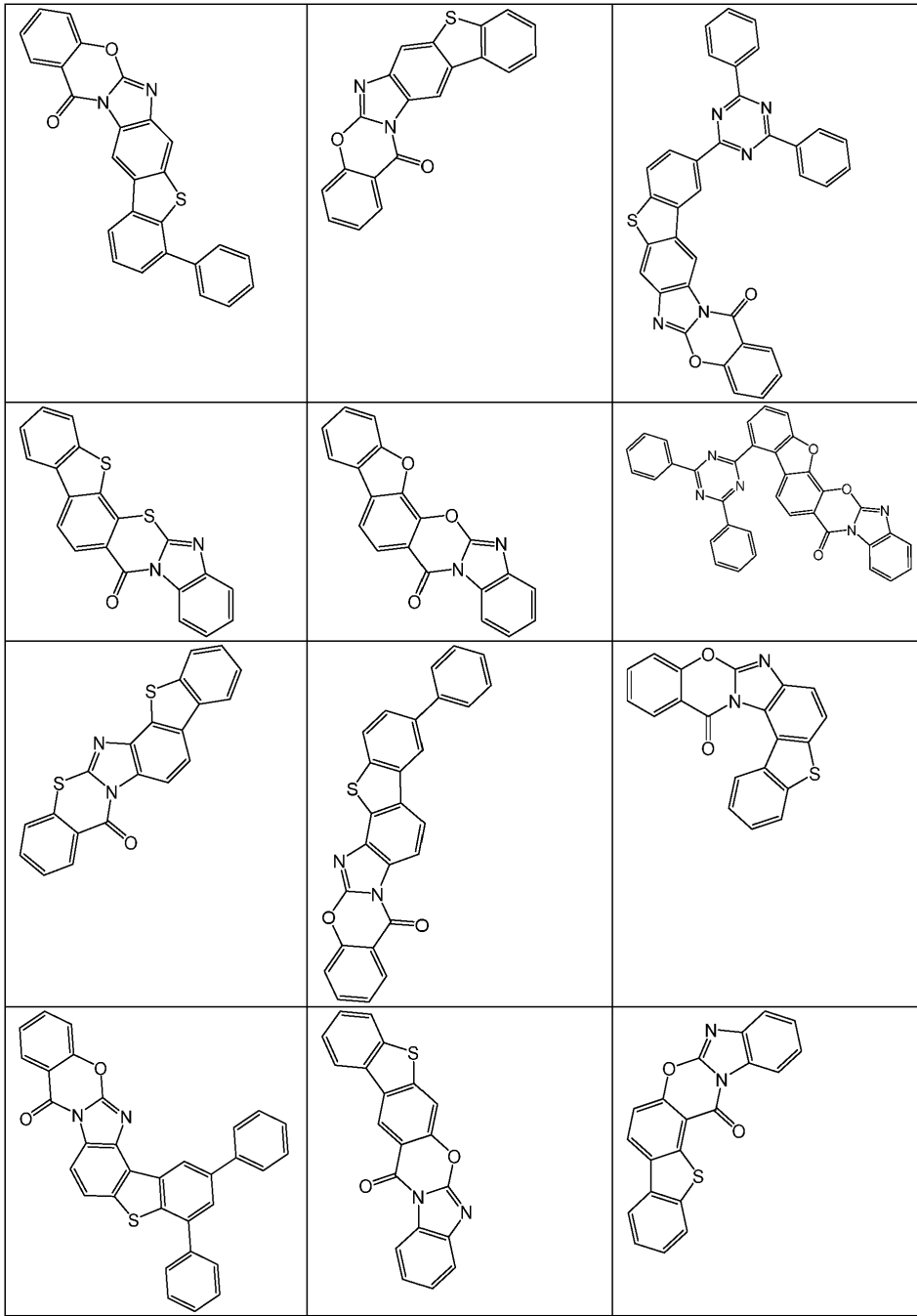
[0112]



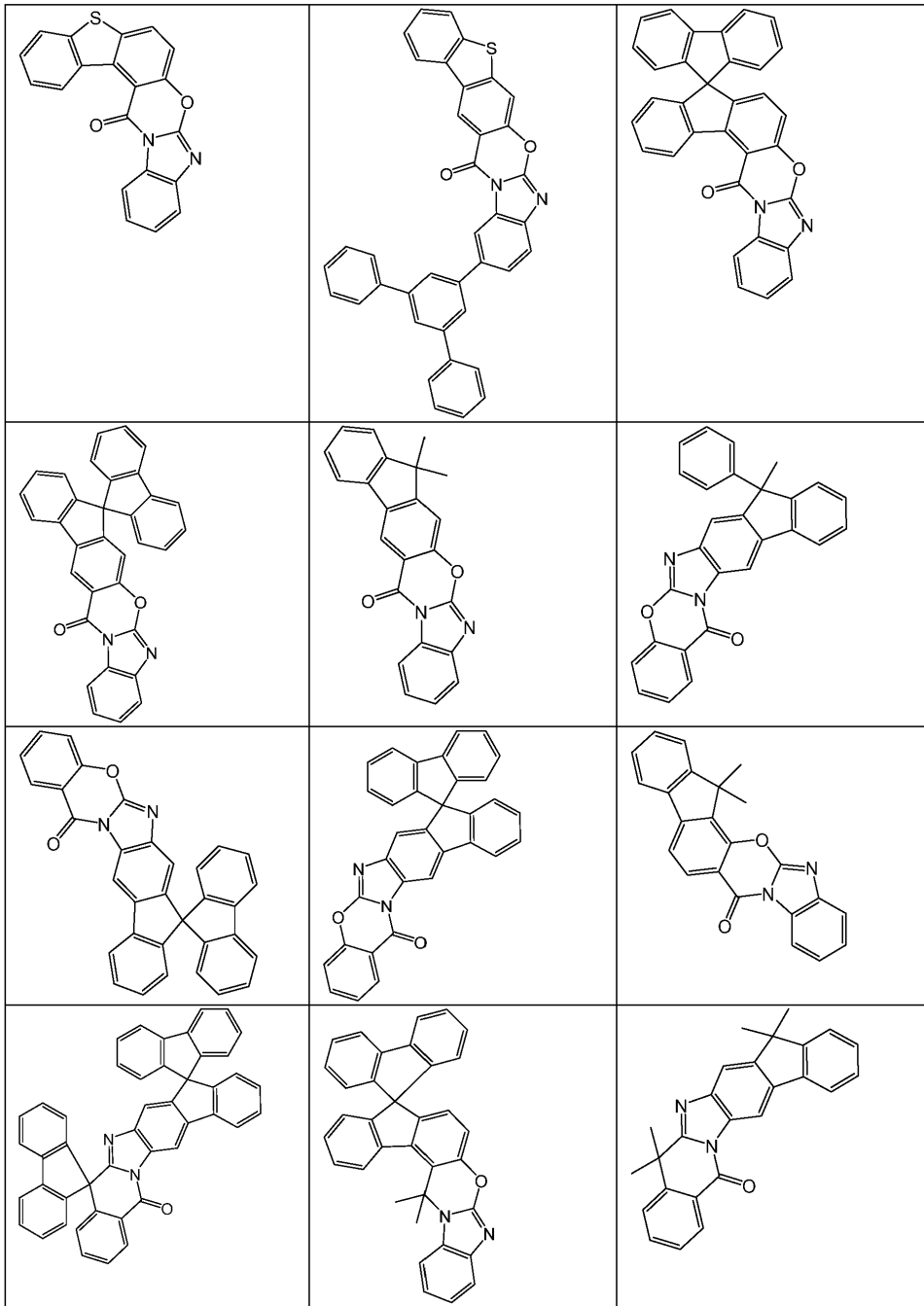
[0113]



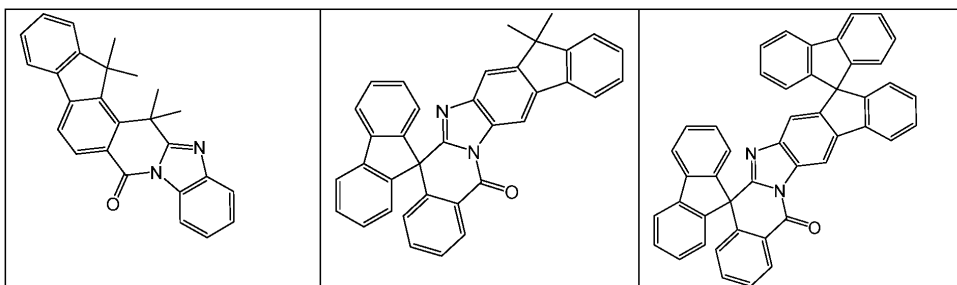
[0114]



[0115]



[0116]



[0117]

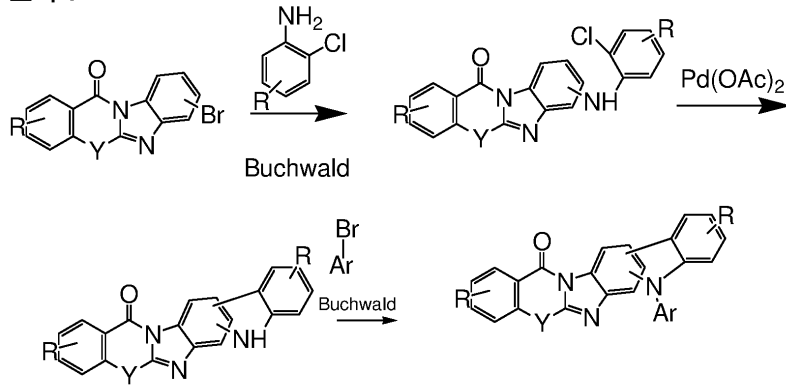
[0118]

본 발명의 화합물의 베이스 구조는 도식 1 내지 6 에 개략된 루트에 의해 제조될 수 있다. 도식 1 및 2는 2 개의 대안의 루트에 의한 $Y^1 = \text{NAr}$ 인 화합물의 합성을 나타낸다. 도식 3은 $Y^1 = \text{S}$ 인 화합물의 합성을 나타낸다. 도식 4 및 5는 2개의 대안의 루트에 의한 $Y^1 = \text{O}$ 인 화합물의 합성을 나타낸다. 도식 6은 $Y^1 = \text{CR}_2$ 인 합성을 나타낸다.

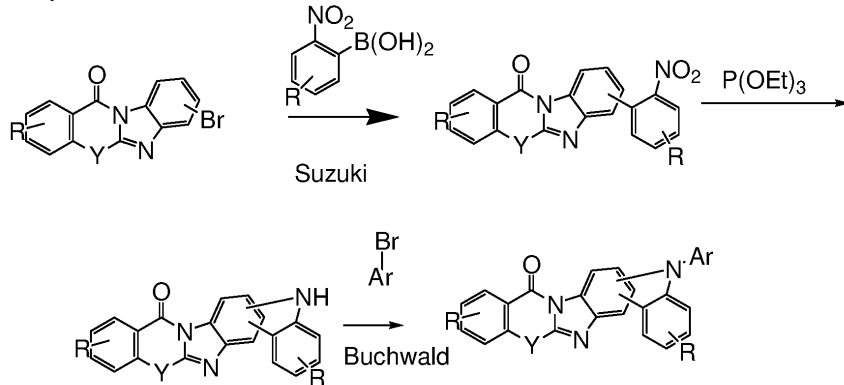
[0119]

이것은 여전히 식 (2)의 기를 갖지 않는 식 (1)의 베이스 구조를 먼저 구성하는 것을 포함한다. 베이스 골격의 합성은 문헌에 알려져 있다. 그 다음, 식 (2)의 기의 전구체는 먼저 제 1 커플링 반응, 예를 들어 Suzuki 또는 Hartwig-Buchwald 커플링을 수행함으로써 2단계로 도입될 수 있다. 그 후에, 식 (2)의 기는 고리화에 의해 도입된다: 이들 반응은 모두 커플링 반응일 수도 있지만 치환 반응일 수도 있다. 베이스 구조가 반응성 이탈기, 예를 들어 염소 또는 브롬으로 치환되는 경우, 이것은 추가 반응에서 다른 치환기로, 예를 들어 스킵키 커플링 반응에서 방향족 또는 헤테로방향족 치환기 R로 대체될 수도 있다.

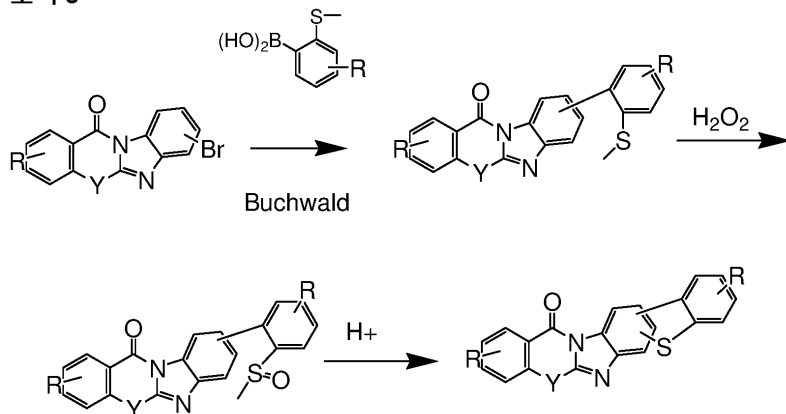
도식 1



도식 2

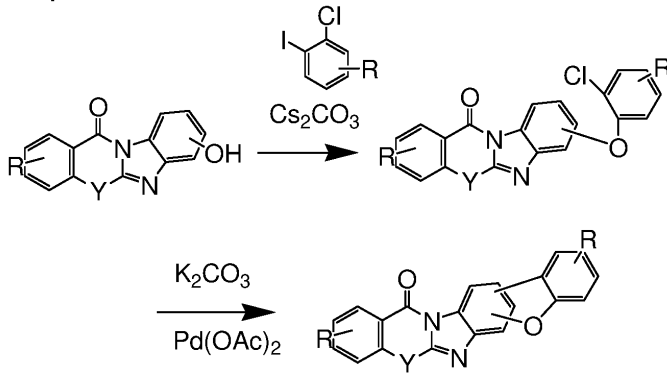


도식 3

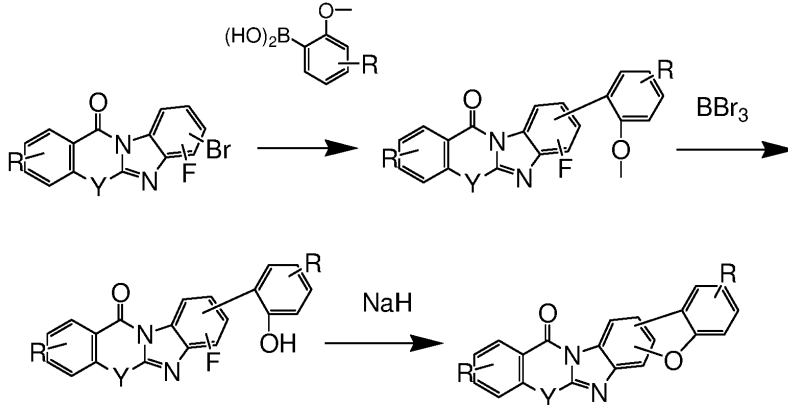


[0120]

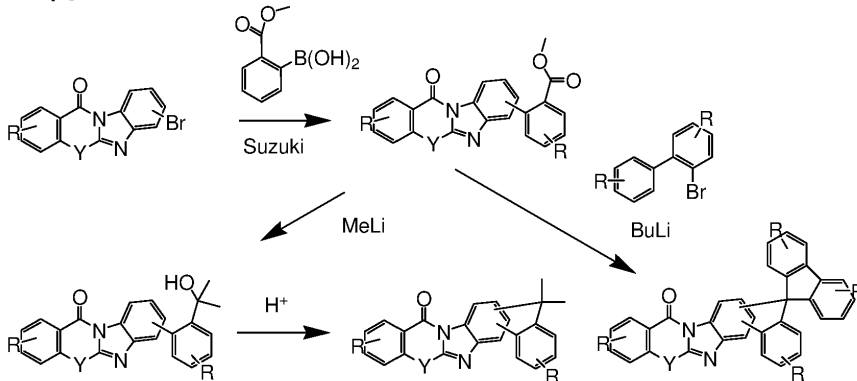
도식 4



도식 5



도식 6



[0121]

[0122]

따라서 본 발명은 또한, 하기 단계를 특징으로 하는 본 발명의 화합물의 제조 방법을 제공한다:

[0123]

(A) 아직 식 (2) 의 기를 갖지 않는 식 (1) 의 베이스 골격을 합성하는 단계; 및

[0124]

(B) 적어도 하나의 커플링 반응에 의해 식 (2) 의 기를 도입하는 단계.

[0125]

예를 들어 스펀-코팅 또는 인쇄 방법에 의해 액체 상으로부터 본 발명의 화합물의 처리를 위해, 본 발명의 화합물의 포몰레이션이 필요하다. 이들 포몰레이션은 예를 들어, 용액, 분산액 또는 유화액일 수도 있다. 이러한 목적을 위해, 둘 이상의 용매의 혼합물을 사용하는 것이 바람직할 수 있다. 적합하고 바람직한 용매는 예를 들어, 톨루엔, 아니솔, *o*-, *m*- 또는 *p*-자일렌, 메틸 벤조에이트, 메시틸렌, 테트라린, 베라트롤, THF, 메틸-THF, THP, 클로로벤젠, 디옥산, 페녹시톨루엔, 특히 3-페녹시톨루엔, (-)-펜톤, 1,2,3,5-테트라메틸벤젠, 1,2,4,5-테트라메틸벤젠, 1-메틸나프탈렌, 2-메틸벤조티아졸, 2-페녹시에탄올, 2-피롤리딘, 3-메틸아니솔, 4-메틸아니솔, 3,4-디메틸아니솔, 3,5-디메틸아니솔, 아세트페논, α -테르피네올, 벤조티아졸, 부틸 벤조에이트, 큐멘, 시클로헥산올, 시클로헥사논, 시클로헥실벤젠, 데칼린, 도데실벤젠, 에틸 벤조에이트, 인단, NMP, *p*-시멘, 페넨톨, 1,4-디이소프로필벤젠, 디벤질 에테르, 디에틸렌 글리콜 부틸 메틸 에테르, 트리에틸렌 글리콜 부틸 메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디부틸 에테르, 트리에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르, 트리프로필렌 글리콜 디메틸 에테르, 테트라에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 2-이소프로필나프탈렌,

펜틸벤젠, 헥실벤젠, 헵틸벤젠, 옥틸벤젠, 1,1-비스(3,4-디메틸페닐)에탄, 2-메틸바이페닐, 3-메틸바이페닐, 1-메틸나프탈렌, 1-에틸나프탈렌, 에틸 옥타노에이트, 디에틸 세바케이트, 옥틸 옥타노에이트, 헵틸벤젠, 멘틸 이소발레레이트, 시클로헥실 헥사노에이트 또는 이들 용매의 혼합물이다.

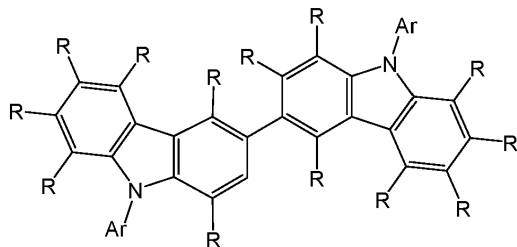
- [0126] 따라서, 본 발명은 또한 본 발명의 적어도 하나의 화합물 및 적어도 하나의 추가 화합물을 포함하는 포블레이션 을 제공한다. 추가 화합물은 예를 들어, 용매, 특히 상기 언급된 용매 중 하나 또는 이들 용매의 혼합물일 수 있다. 추가 화합물은 대안적으로, 마찬가지로 전자 디바이스에서 사용되는 적어도 하나의 추가의 유기 또는 무기 화합물, 예를 들어 방출 화합물 및/또는 추가 매트릭스 재료일 수도 있다. 적합한 방출 화합물 및 추가 매트릭스 재료는 유기 전계 발광 디바이스와 관련하여 뒤에 열거된다. 이 추가 화합물은 또한 중합 체성일 수도 있다.
- [0127] 본 발명의 화합물은 전자 디바이스, 특히 유기 전계 발광 디바이스에서의 사용에 적합하다.
- [0128] 따라서 본 발명은 또한, 전자 디바이스, 특히 유기 전계 발광 디바이스에서의 본 발명의 화합물의 용도를 제공한다.
- [0129] 본 발명은 여전히 또한 적어도 하나의 본 발명의 화합물을 포함하는 전자 디바이스를 제공한다.
- [0130] 전자 디바이스는 본 발명의 맥락에서 적어도 하나의 유기 화합물을 포함하는 적어도 하나의 층을 포함하는 디바이스이다. 이 컴포넌트는 또한 무기 재료 또는 그렇지 않으면 무기 재료로부터 전체적으로 형성된 층을 포함할 수도 있다.
- [0131] 전자 디바이스는 바람직하게는 유기 전계발광 디바이스 (OLED), 유기 집적회로 (O-IC), 유기 전계효과 트랜지스터 (O-FET), 유기 박막 트랜지스터 (O-TFT), 유기 발광 트랜지스터 (O-LET), 유기 태양전지 (O-SC), 염료-감응형 유기 태양전지 (DSSC), 유기 광검출기, 유기 광수용체, 유기 전계-켄치 디바이스 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 유기 플라즈몬 방출 디바이스로 이루어지는 군, 바람직하게는 유기 전계발광 디바이스 (OLED), 더 바람직하게는 인광 OLED 로부터 선택된다.
- [0132] 유기 전계 발광 디바이스는 캐소드, 애노드 및 적어도 하나의 방출층을 포함한다. 이들 층 외에도, 이것은 또한, 추가 층, 예를 들어 각 경우에 하나 이상의 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 차단 층, 전자 수송층, 전자 주입층, 여기자 차단 층, 전자 차단 층 및/또는 전하 생성 층을 포함할 수도 있다. 마찬가지로 여기자 차단 기능을 갖는 중간층이, 예를 들어, 2 개의 방출 층 사이에 도입되는 것이 가능하다. 그러나, 이러한 층들 중 모든 것이 반드시 존재할 필요는 없다는 것이 언급되어야 한다. 이 경우에, 유기 전계 발광 디바이스는 하나의 방출층을 포함할 수 있거나, 또는 복수의 방출층을 포함할 수 있다. 복수의 방출 층들이 존재하는 경우, 이들은, 전체 결과가 백색 방출이 되도록 전체적으로 380 nm와 750 nm 사이의 여러 방출 최대치들을 갖는 것이 바람직하며; 환언하면, 형광 또는 인광을 나타낼 수도 있는 다양한 방출 화합물들이 방출 층들에 사용된다. 3개의 방출 층을 갖는 시스템이 특히 바람직하며, 여기서 3개의 층은 청색, 녹색 및 오렌지색 또는 적색 방출을 나타낸다. 본 발명의 유기 전계 발광 디바이스는 또한, 특히 백색-방출 OLED 를 위한, 탠덤 OLED 일 수도 있다.
- [0133] 위에 상세히 나타낸 실시형태들에 따른 본 발명의 화합물은 정확한 구조에 따라, 상이한 층에서 사용될 수도 있다. 인광 방출체를 위한 또는 TADF (thermally activated delayed fluorescence) 를 나타내는 방출체를 위한, 특히 인광 방출체를 위한, 매트릭스 재료로서 방출 층에서 식 (1) 의 화합물 또는 위에 언급된 바람직한 실시형태들의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 디바이스가 바람직하다. 이 경우, 유기 전계 발광 디바이스는 하나의 방출층을 함유할 수도 있거나, 또는 이것은 복수의 방출층을 함유할 수도 있으며, 여기서 적어도 하나의 방출 층은 매트릭스 재료로서 본 발명의 적어도 하나의 화합물을 함유한다. 또한, 본 발명의 화합물은 또한 전자 수송층에서 및/또는 정공 차단층에서 및/또는 정공 수송층에서 및/또는 여기자 차단 층에서 사용될 수 있다.
- [0134] 본 발명의 화합물이 방출 층에서 인광 화합물을 위한 매트릭스 재료로서 사용되는 경우, 바람직하게는 하나 이상의 인광 재료 (삼중항 방출체) 와 조합하여 사용된다. 인광은 본 발명의 맥락에서 더 높은 스핀 다중도를 갖는 여기된 상태, 즉, 스핀 상태 > 1, 특히 여기된 삼중항 상태로부터의 루미네선스를 의미하는 것으로 이해된다. 본 출원의 맥락에서, 전이 금속 또는 란타나이드와의 모든 발광 착물, 특히 모든 이리듐, 백금 및 구리 착물은 인광 화합물로서 간주되어야 할 것이다.
- [0135] 본 발명의 화합물 및 방출 화합물의 혼합물은 방출체 및 매트릭스 재료의 총 혼합물을 기준으로, 99 부피% 내지 1 부피%, 바람직하게는 98 부피% 내지 10 부피%, 더욱 바람직하게는 97 부피% 내지 60 부피%, 그리고 특히 95

부피% 내지 80 부피% 로 본 발명의 화합물을 함유한다. 대응하여, 혼합물은 방출체 및 매트릭스 재료의 총 혼합물을 기준으로, 1 부피% 내지 99 부피%, 바람직하게는 2 부피% 내지 90 부피%, 더욱 바람직하게는 3 부피% 내지 40 부피%, 그리고 특히 5 부피% 내지 20 부피% 의 방출체를 함유한다.

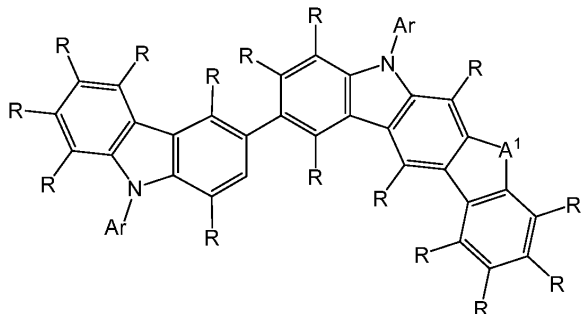
[0136] 본 발명의 추가의 바람직한 실시형태는 추가의 매트릭스 재료와 조합으로 인광 방출체를 위한 매트릭스 재료로서의 본 발명의 화합물의 용도이다. 본 발명의 화합물과 조합으로 사용될 수 있는 적합한 매트릭스 재료는, 예를 들어 WO 2004/013080, WO 2004/093207, WO 2006/005627 또는 WO 2010/006680 에 따른 방향족 케톤, 방향족 포스핀 산화물 또는 방향족 술폰사이드 또는 술폰, 트리아릴아민, 카르바졸 유도체, 예를 들어 CBP (N,N-비스카르바졸릴바이페닐) 또는 WO 2005/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527, WO 2008/086851 또는 WO 2013/041176, 예를 들어 WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따른 인돌로카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 2010/136109, WO 2011/000455, WO 2013/041176 또는 WO 2013/056776 에 따른 인데노카르바졸 유도체, 예를 들어 EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160 에 따른 아자카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 2007/137725 에 따른 바이폴라 매트릭스 재료, 예를 들어 WO 2005/111172 에 따른 실란, 예를 들어 WO 2006/117052 에 따른 아자보롤 또는 보로닉 에스테르, 예를 들어 WO 2007/063754, WO 2008/056746, WO 2010/015306, WO 2011/057706, WO 2011/060859 또는 WO 2011/060877 에 따른 트리아진 유도체, 예를 들어 EP 652273 또는 WO 2009/062578 에 따른 아연 착물, 예를 들어 WO 2010/054729 에 따른 디아자실롤 또는 테트라아자실롤 유도체, 예를 들어 WO 2010/054730 에 따른 디아자포스폴 유도체, 예를 들어 WO 2011/042107, WO 2011/060867, WO 2011/088877 및 WO 2012/143080 에 따른 브릿지된 카르바졸 유도체, 예를 들어, WO 2012/048781에 따른 트리페닐렌 유도체, 또는 예를 들어 WO 2015/169412, WO 2016/015810, WO 2016/023608, WO 2017/148564 또는 WO 2017/148565 에 따른 디벤조푸란 유도체이다. 마찬가지로 실제 방출체보다 더 짧은 파장 방출을 갖는 추가의 인광 방출체가 혼합물 중의 코-호스트, 또는 예를 들어, WO 2010/108579 에 기재된 바와 같이, 있다손 치더라도, 현저한 정도로 전하 수송에 관여하지 않는 화합물로서 존재하는 것이 가능하다.

[0137] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, 재료는 추가 매트릭스 재료와 조합하여 사용된다. 특히 본 발명의 화합물이 전자 결핍 헤테로방향족 고리 시스템에 의해 치환되는 경우 바람직한 코-매트릭스 재료는, 비스카르바졸, 브릿지된 카르바졸, 트리아릴아민, 디벤조푸라닐-카르바졸 유도체 또는 디벤조푸라닐-아민 유도체 및 카바졸아민의 군으로부터 선택된다.

[0138] 바람직한 비스카르바졸은 하기 식 (19) 및 (20) 의 구조이다:



식 (19)

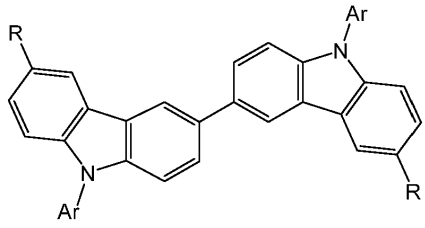


식 (20)

[0139]

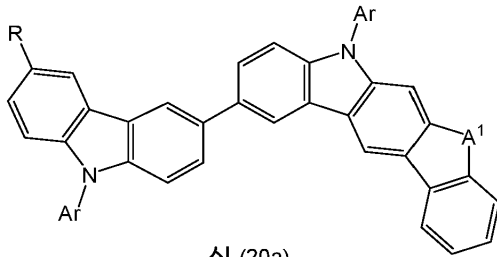
[0140] 식 중 Ar 및 A¹ 은 Ar 의 경우에 위에 주어진 정의를 갖고 R은 위에 주어진 정의를 갖는다. 본 발명의 바람직한 실시형태에서, A¹ 은 CR₂ 이다.

[0141] 식 (19) 및 (20) 의 화합물의 바람직한 실시형태는 하기 식 (19a) 및 (20a) 의 화합물이고:



식 (19a)

[0142]



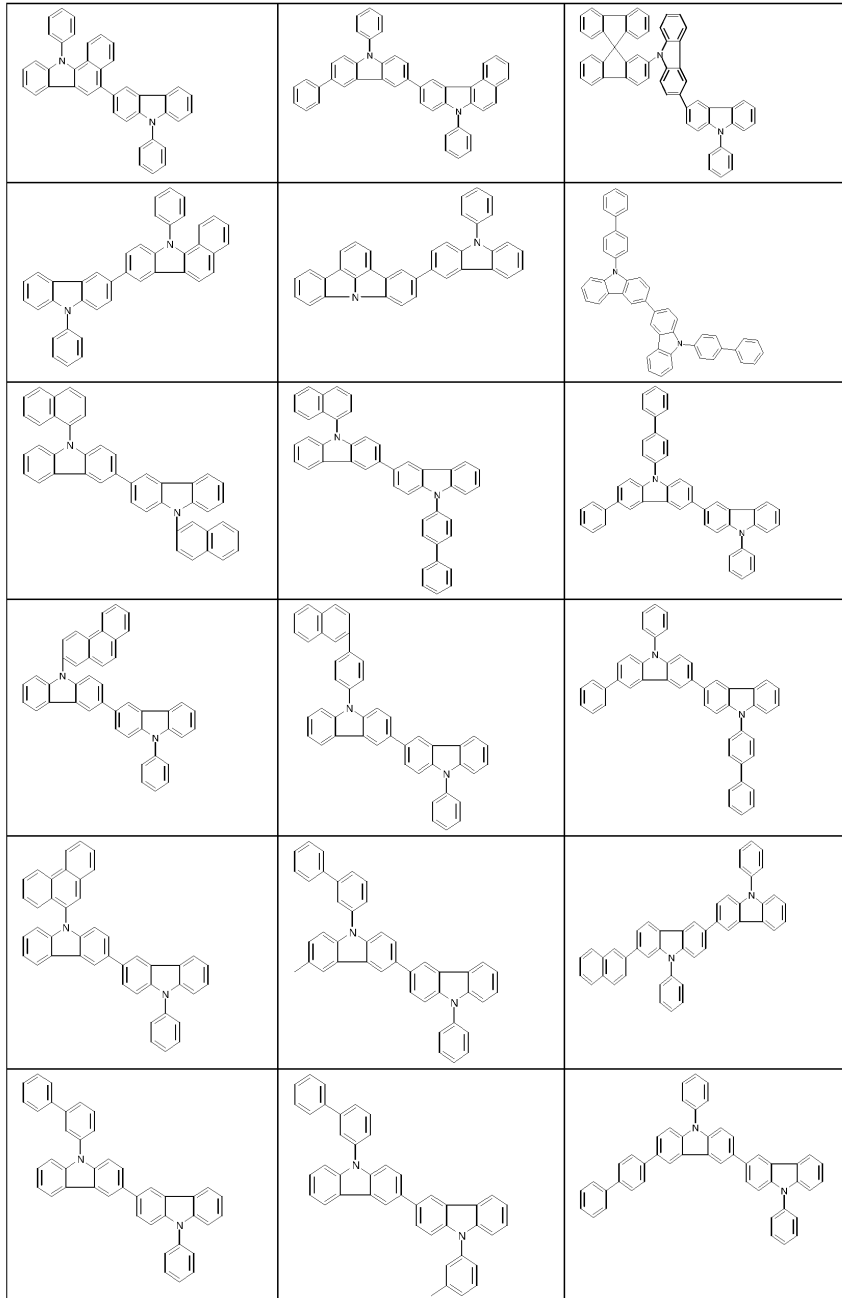
식 (20a)

[0143]

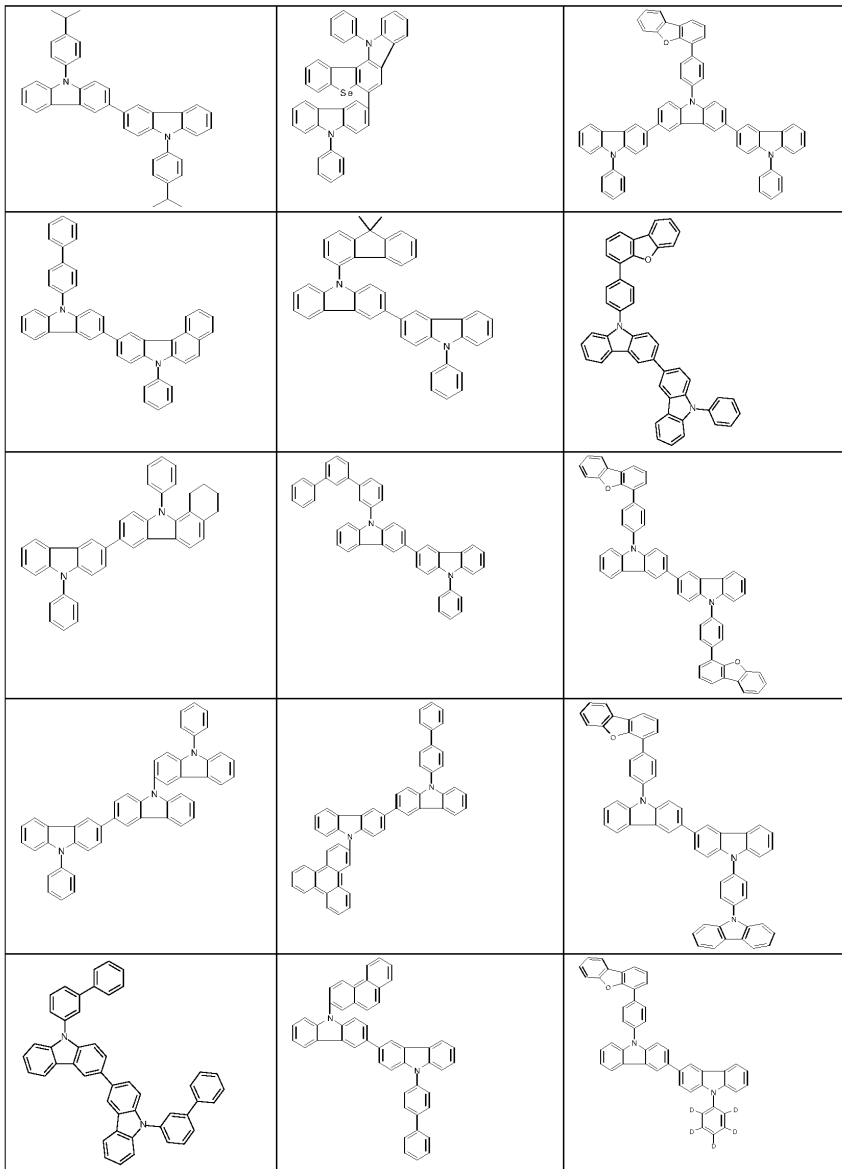
[0144] 식 중 사용된 기호는 위에 주어진 정의를 갖는다.

[0145] 식 (19) 및 (20) 의 적합한 화합물의 예는 아래에 도시된 화합물이다:

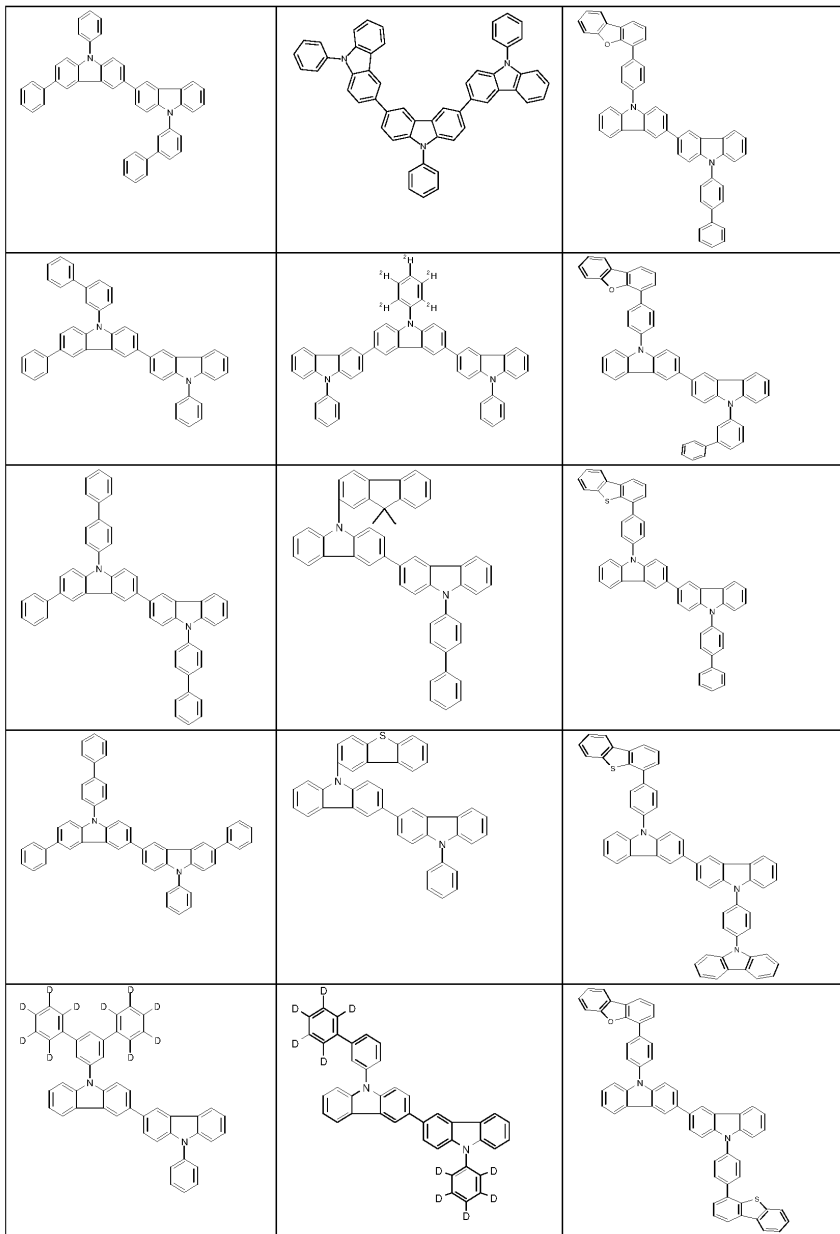
[0146]



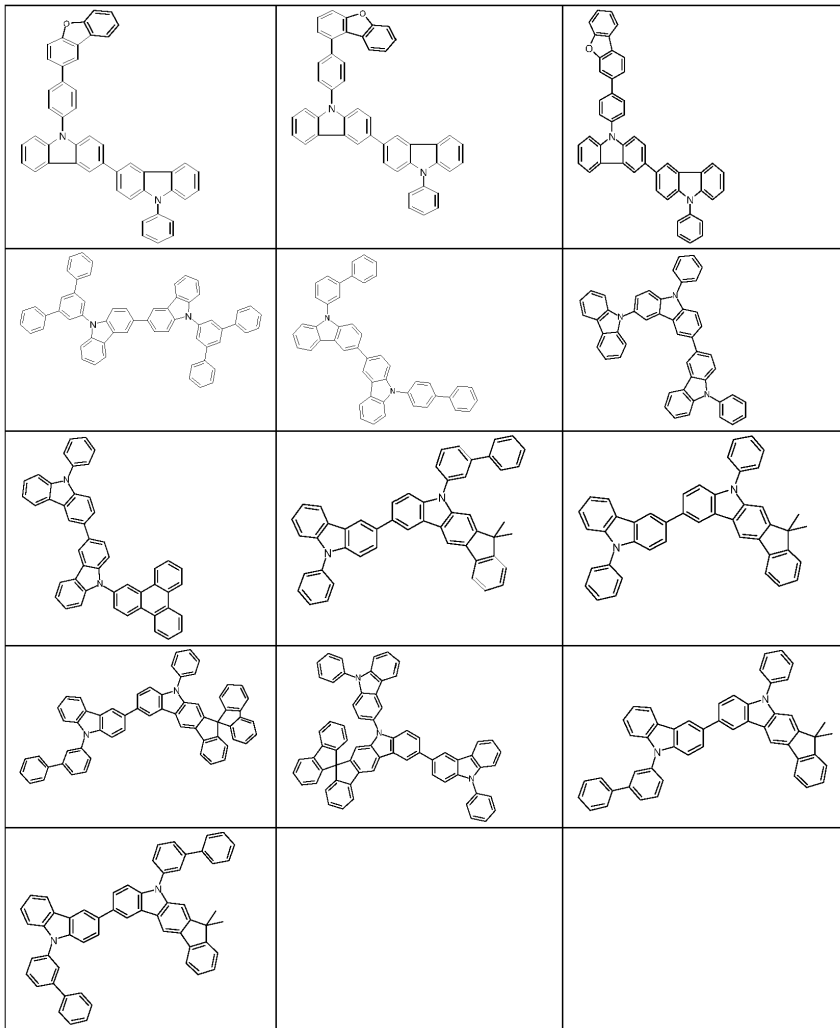
[0147]



[0148]



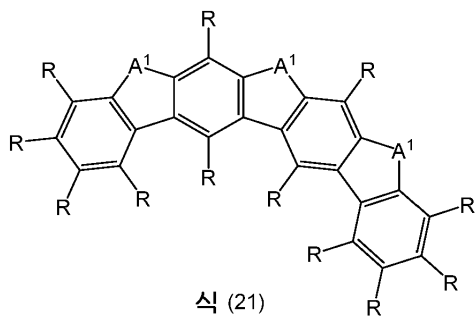
[0149]



[0150]

[0151]

바람직한 브릿지된 카르바졸은 하기 식 (21)의 구조이다:

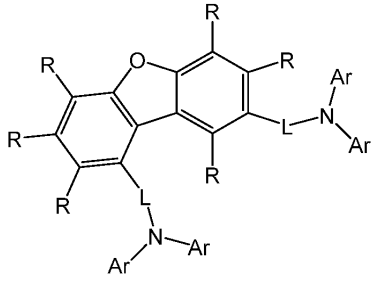


[0152]

[0153]

식중 A¹ 및 R 은 위에 주어진 정의를 갖고 A¹ 은 바람직하게는 각각의 경우 동일하거나 상이하며 NAr 및 CR₂ 로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0154] 바람직한 디벤조푸란 유도체는 하기 식 (22) 의 화합물이고:



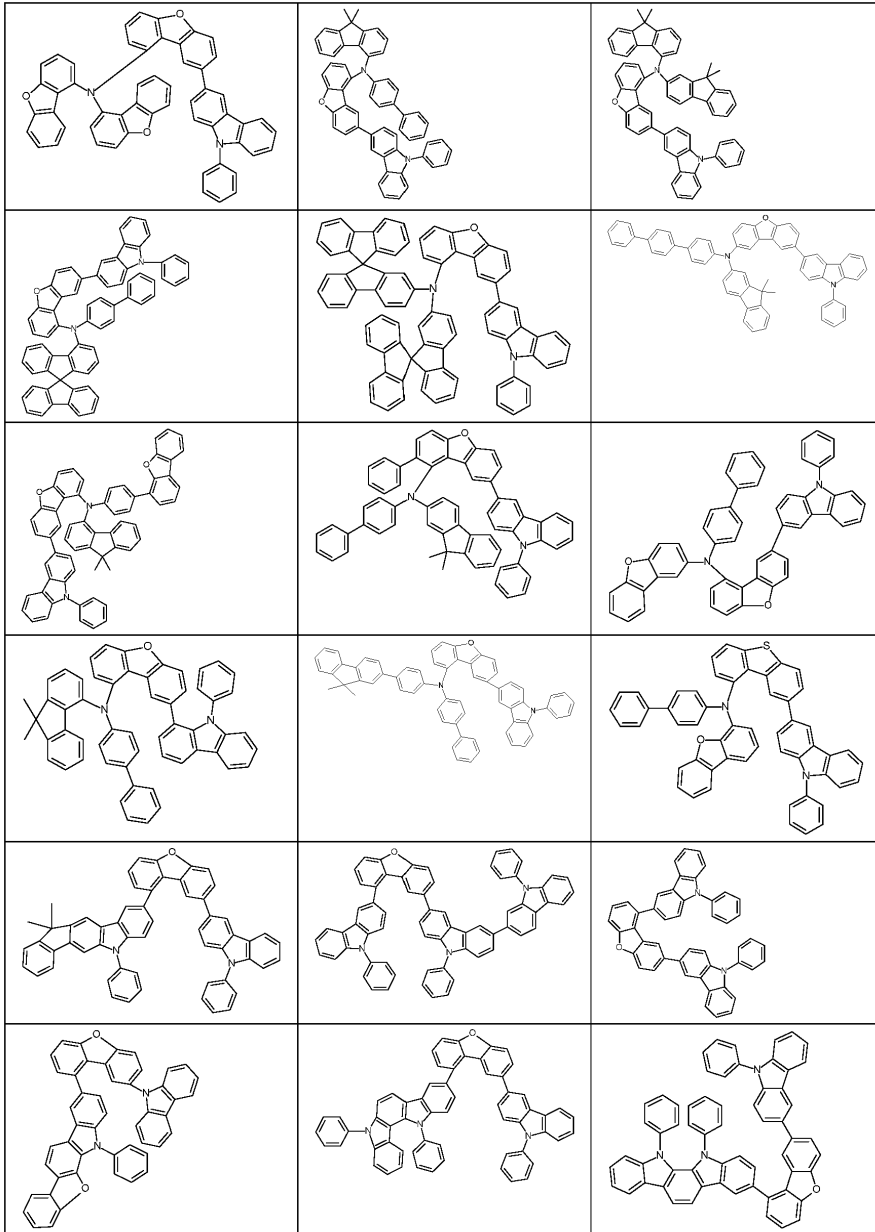
식 (22)

[0155]

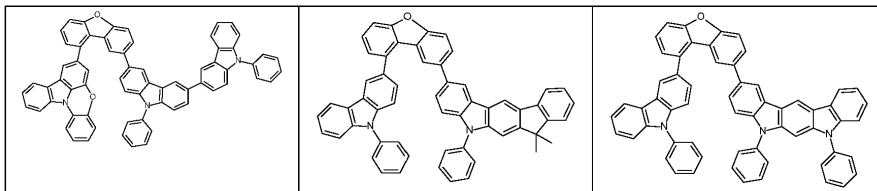
[0156]

식 중 산소는 또한 디벤조티오펜을 형성하기 위해 황으로 대체될 수 있으며, L 은 단일 결합 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 또한 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, R 및 Ar 은 위에 주어진 정의를 갖는다. 여기서 동일한 질소 원자에 결합하는 두 개의 Ar 기, 또는 동일한 질소 원자에 결합하는 하나의 Ar 기와 하나의 L 기가 서로 결합하여 예를 들어 카르바졸을 생성하는 것도 가능하다.

[0157] 적합한 디벤조푸란 유도체의 예는 아래 도시된 화합물이다.

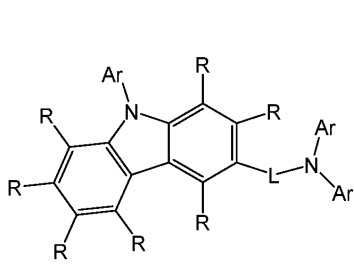


[0158]

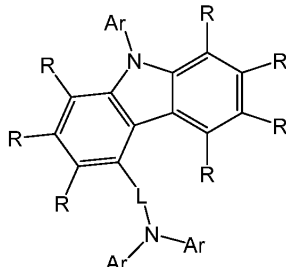


[0159]

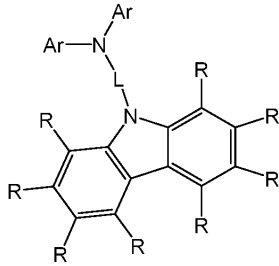
[0160] 바람직한 카르바졸아민은 하기 식 (23), (24) 및 (25) 의 구조이고:



식 (23)



식 (24)

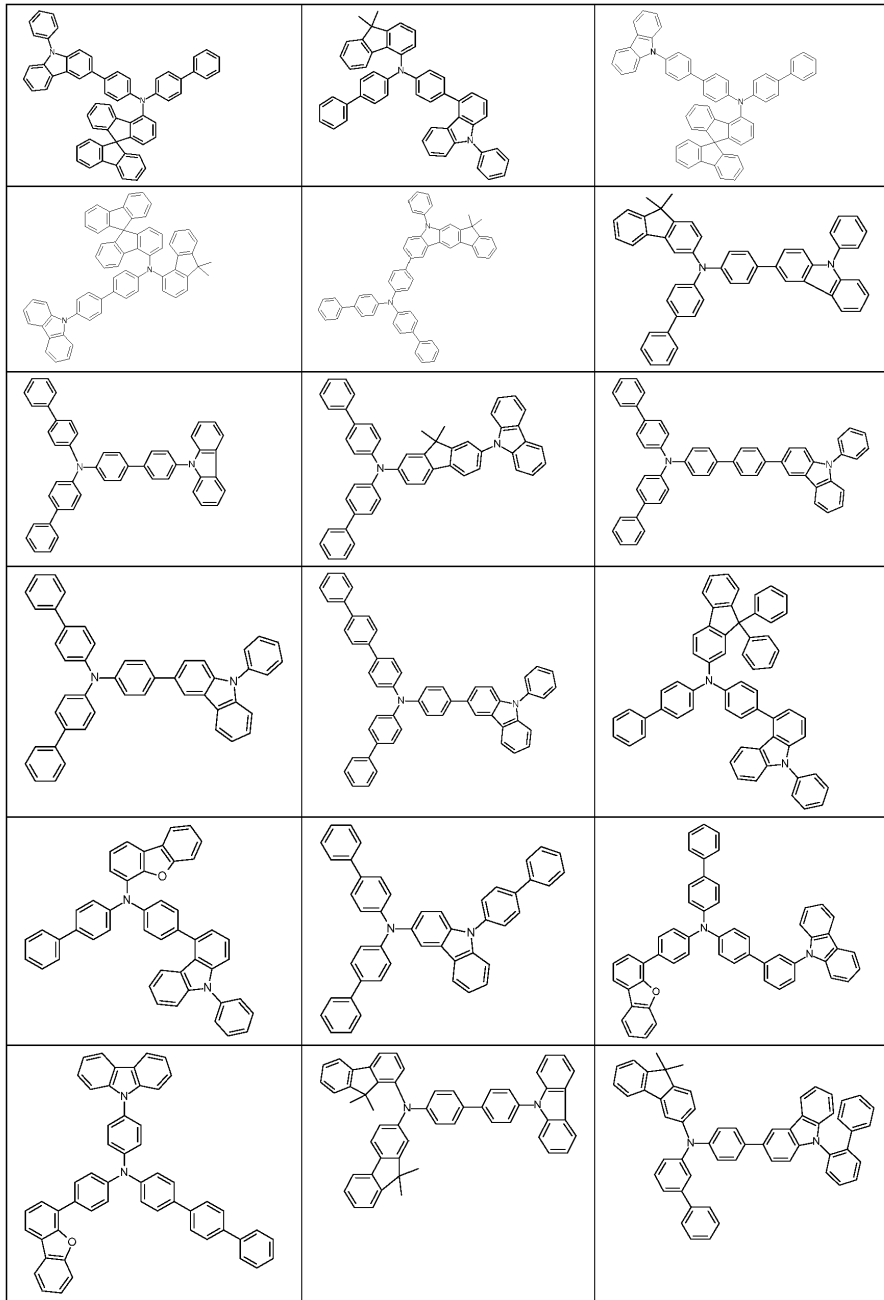


식 (25)

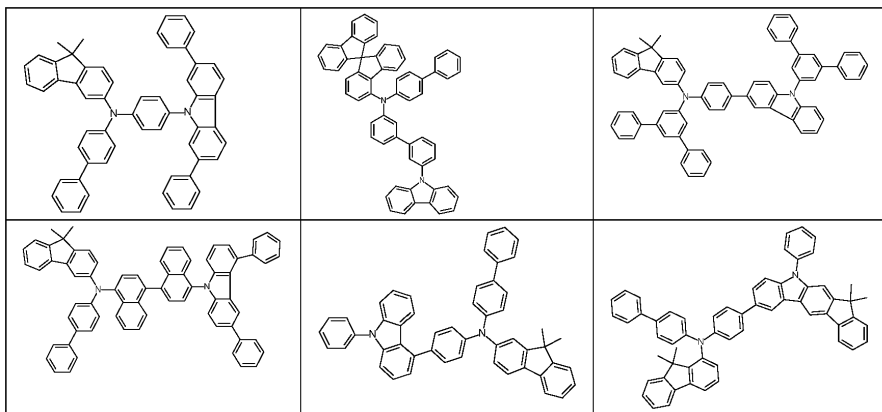
[0161]

[0162] 식중 L 은 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, R 및 Ar 은 위에 주어진 정의를 가진다.

[0163] 적합한 카르바졸아민 유도체의 예는 하기 도시된 화합물이다.



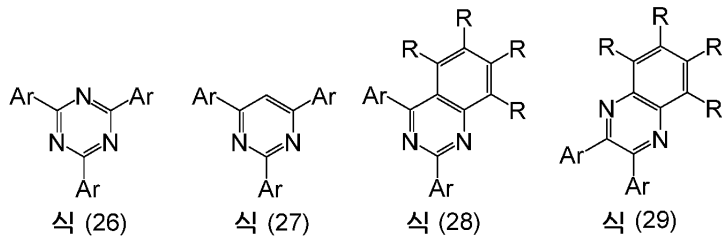
[0164]



[0165]

[0166] 특히 본 발명의 화합물이 전자 풍부 헤테로방향족 고리 시스템, 예를 들어 카르바졸기에 의해 치환되는 경우,

바람직한 코-매트릭스 재료는 또한 트리아진 유도체, 피리미딘 유도체, 퀴나졸린 유도체 및 퀴녹살린 유도체로 이루어진 군으로부터 선택된다. 본 발명의 화합물과 함께 혼합물로 사용될 수 있는 바람직한 트리아진, 퀴나졸린, 퀴녹살린 또는 피리미딘 유도체는 하기 식 (26), (27), (28) 및 (29)의 화합물이다:



[0167]

[0168]

식 중 Ar 및 R 은 위에 주어진 정의를 갖는다.

[0169]

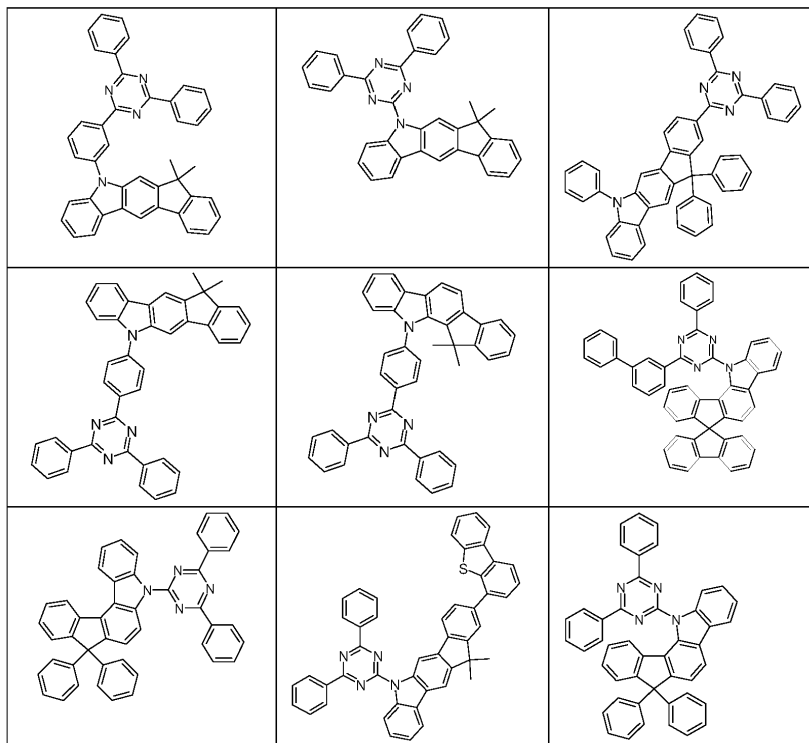
식 (26)의 트리아진 유도체 및 식 (29)의 퀴녹살린 유도체, 특별히 식 (26)의 트리아진 유도체가 특히 바람직하다.

[0170]

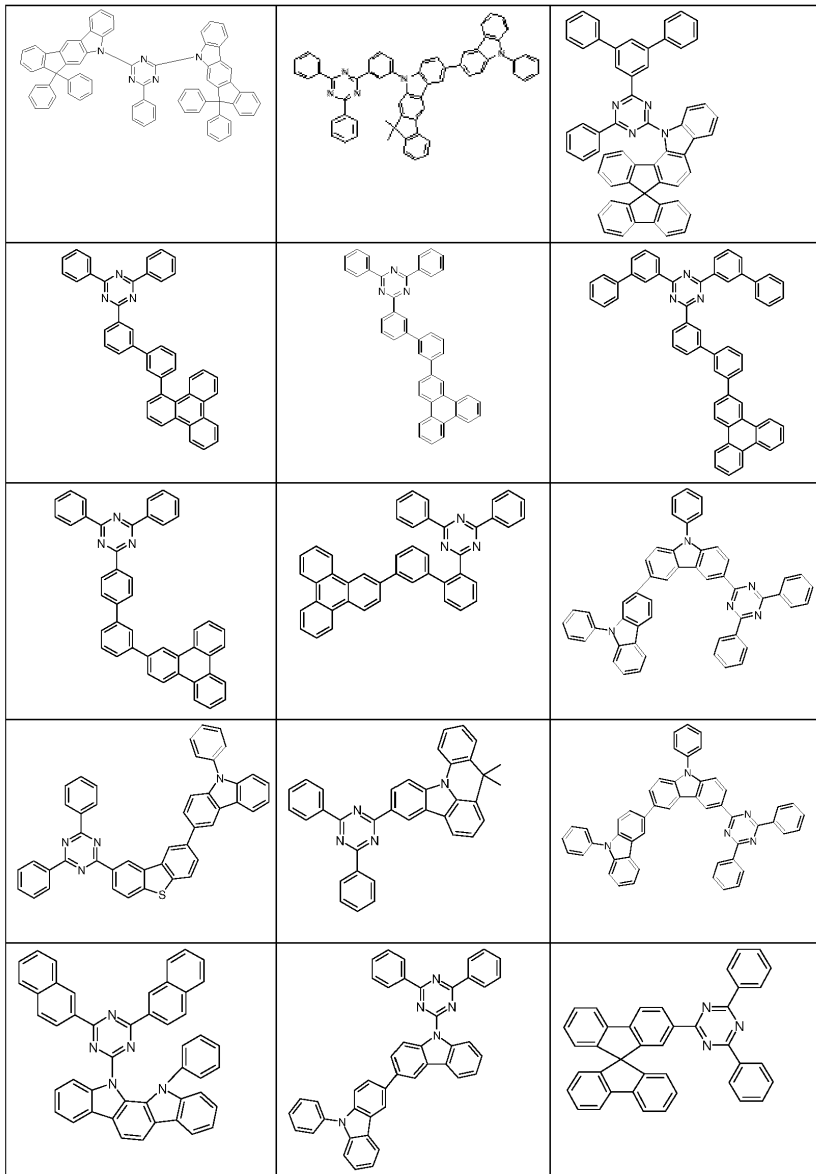
본 발명의 바람직한 실시형태에서, 식 (26), (27), (28) 및 (29)에서 Ar 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 6 내지 30개의 방향족 고리 원자, 특히 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이다. 적합한 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 Ar 은 여기서 Ar 에 대한 실시 형태, 특히 구조 Ar-1 내지 Ar-76 로서 위에 제시한 것과 동일하다.

[0171]

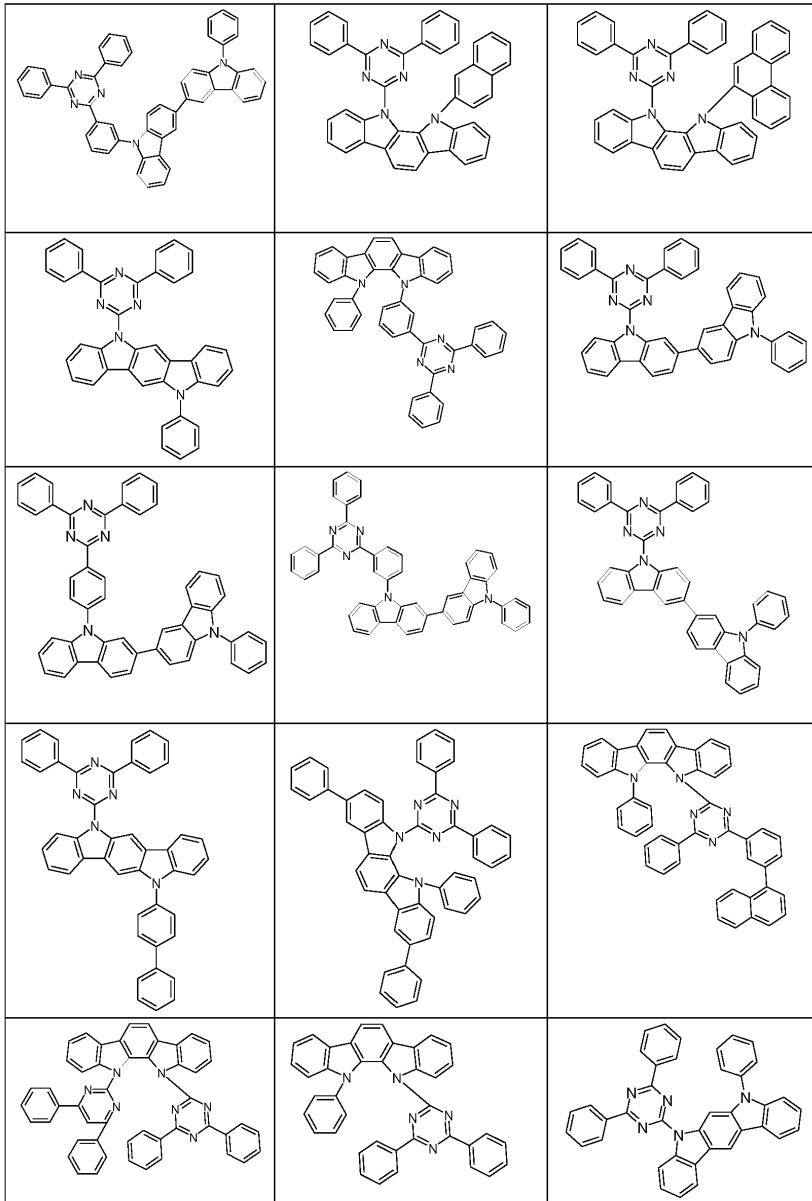
본 발명의 화합물과 함께 매트릭스 재료로 사용될 수 있는 적합한 트리아진 화합물들의 예는 다음 표에 도시된 화합물이다:



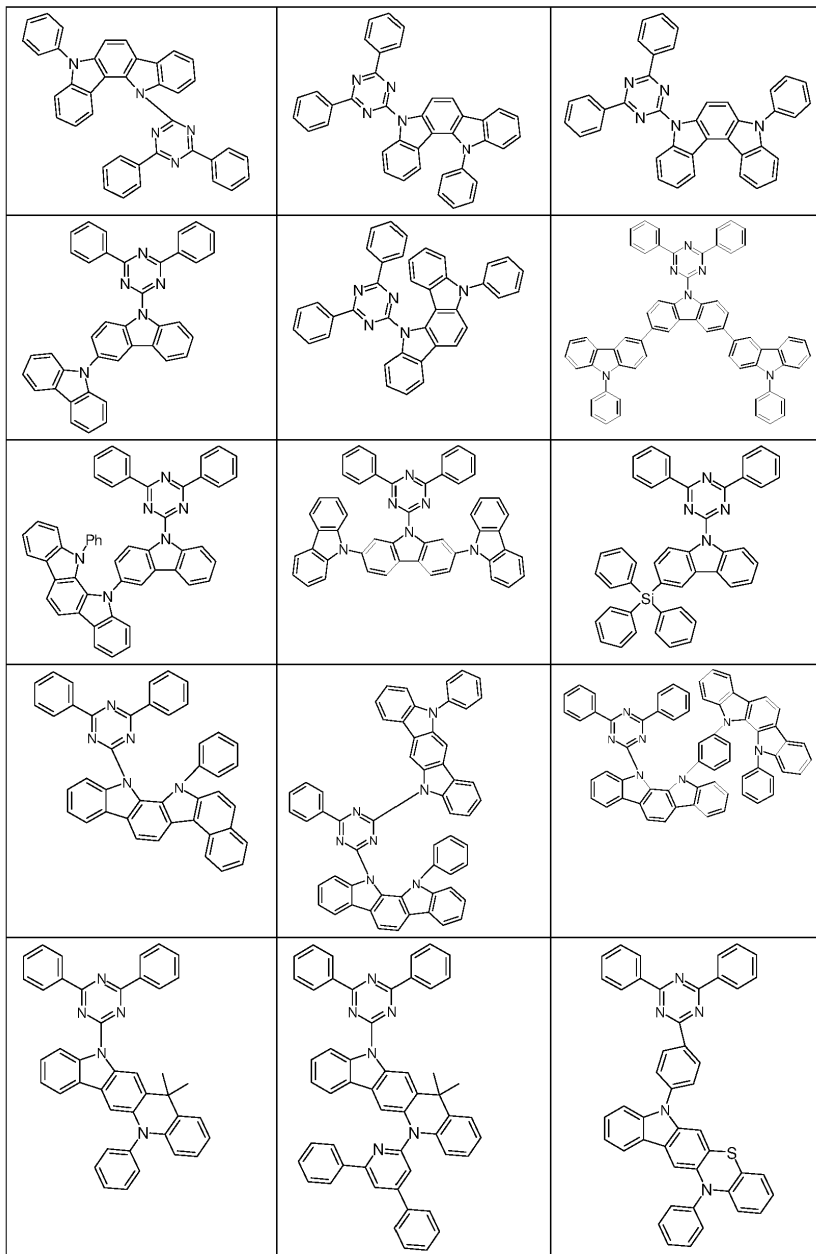
[0172]



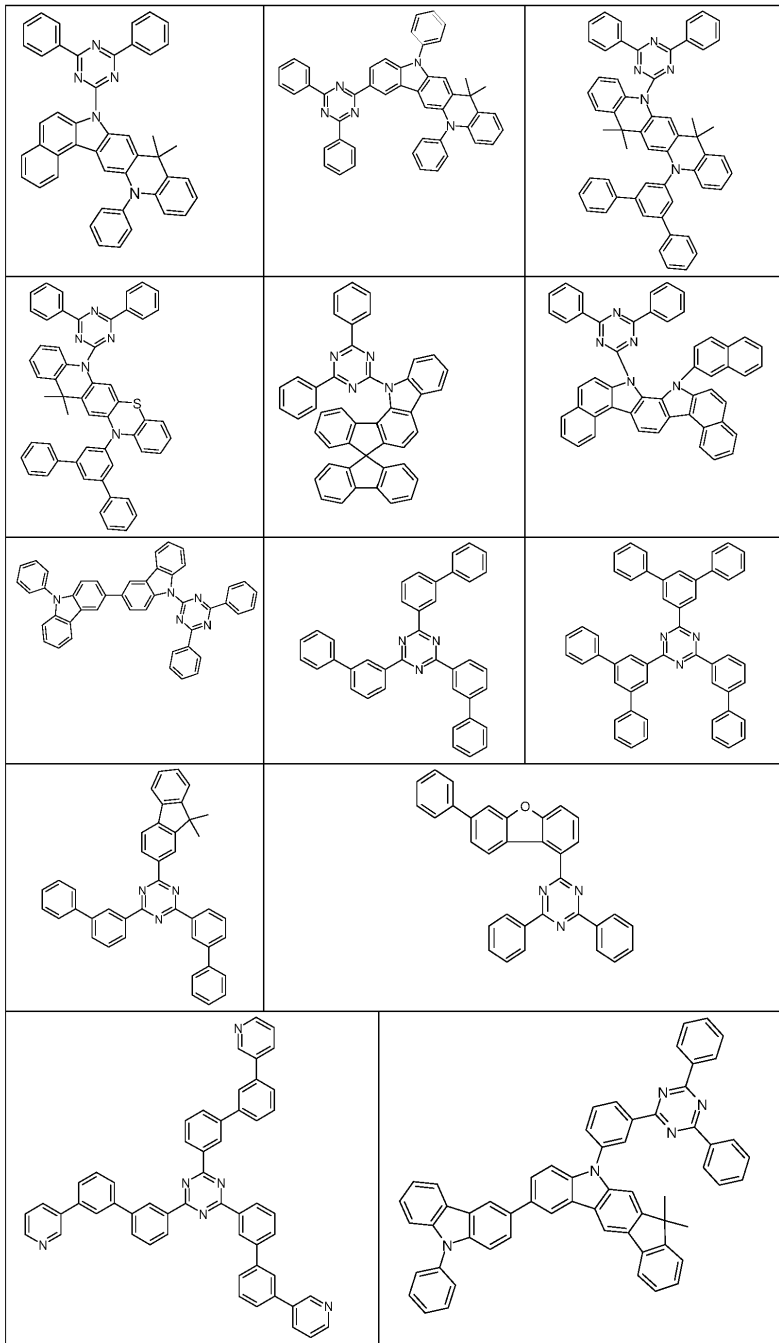
[0173]



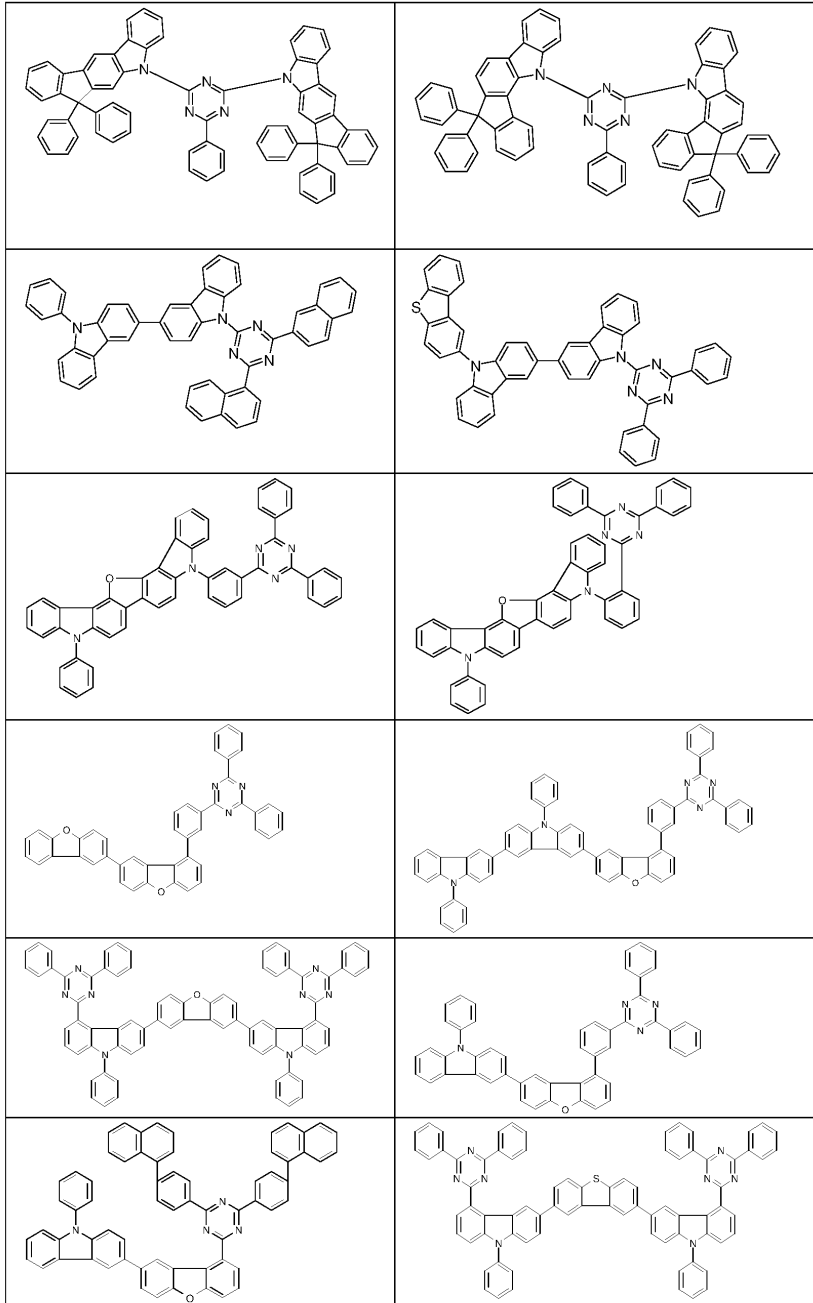
[0174]



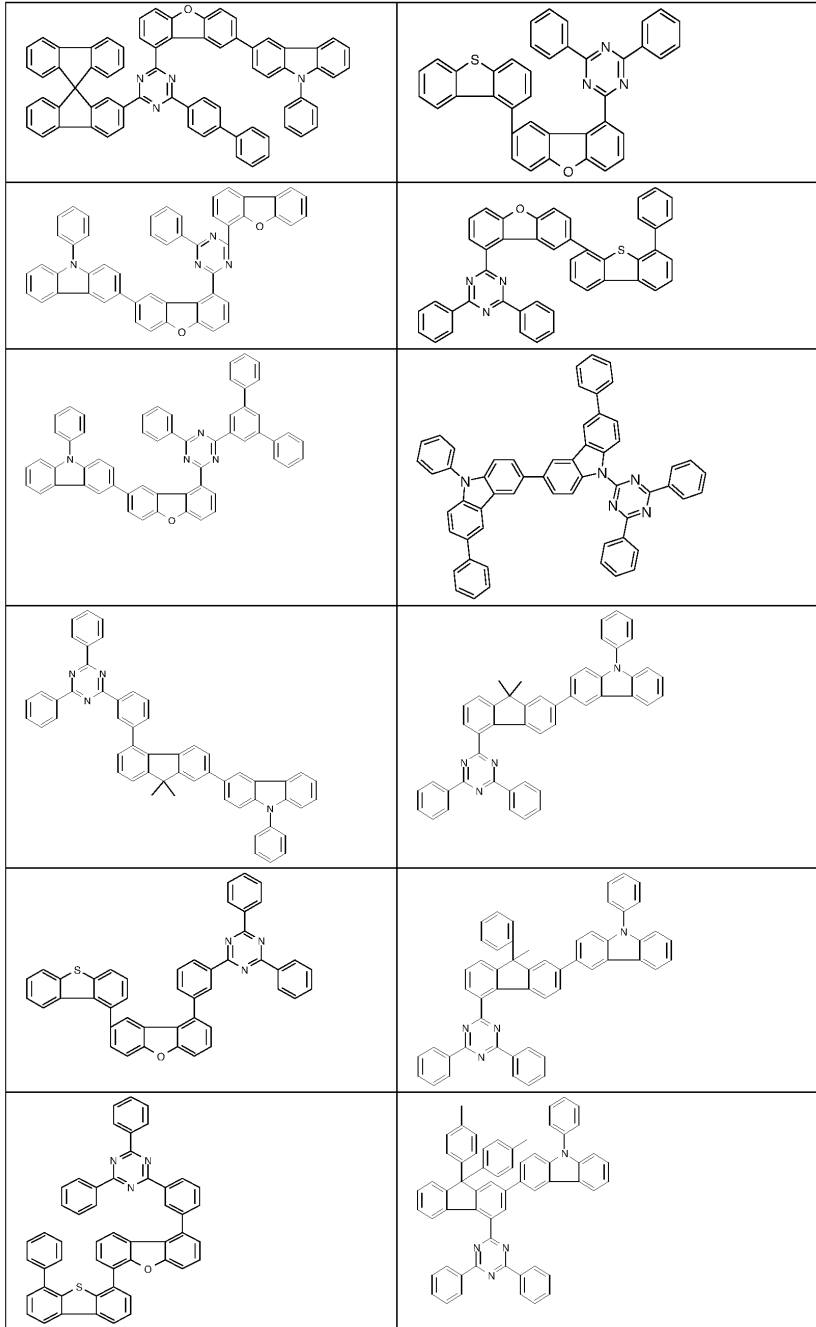
[0175]



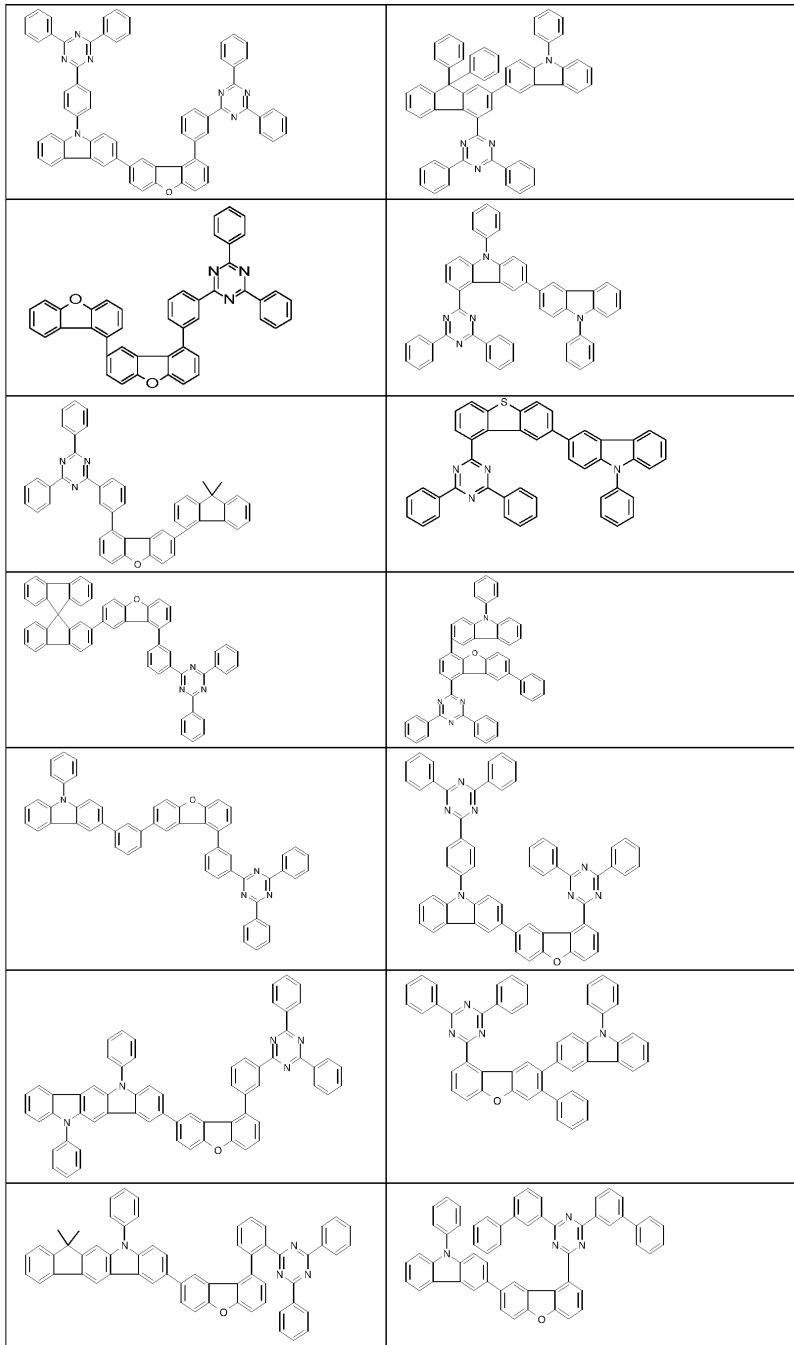
[0176]



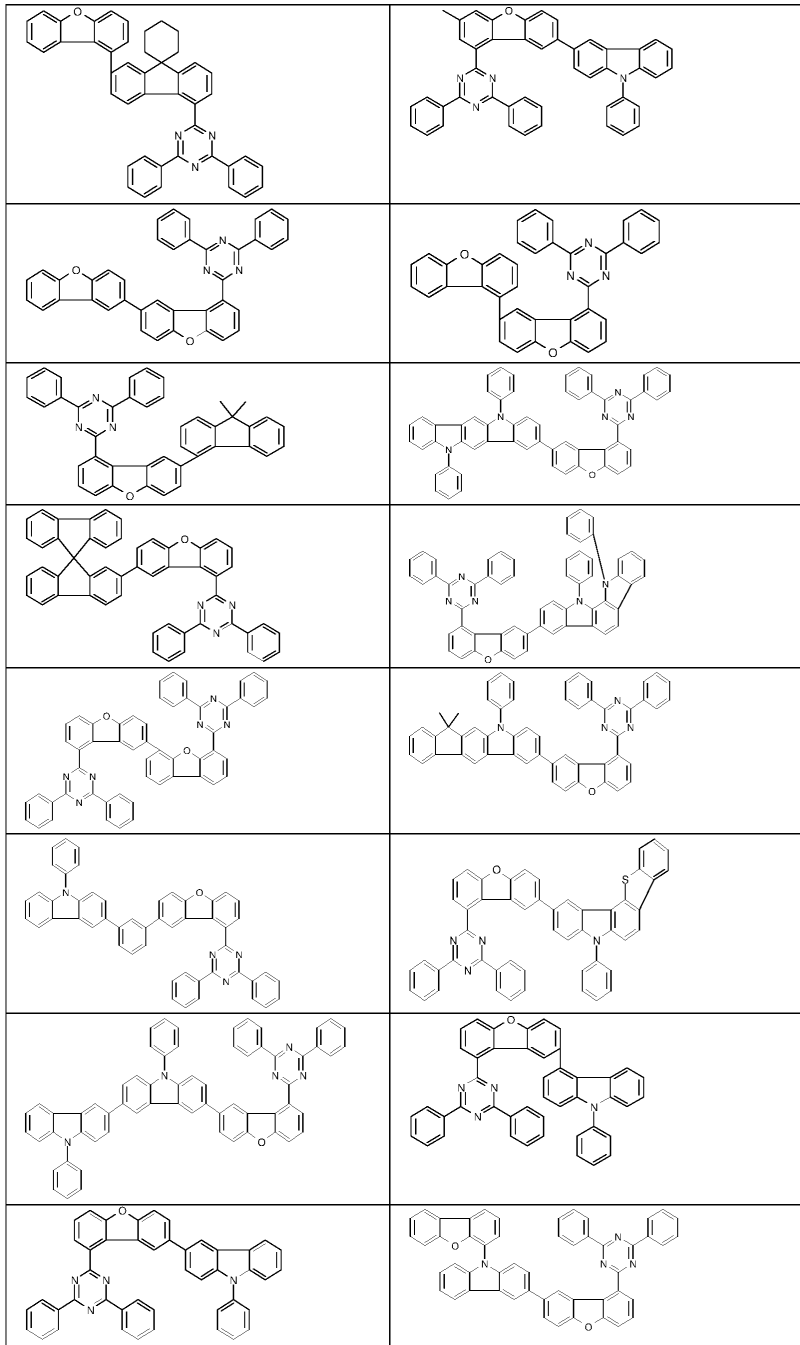
[0177]



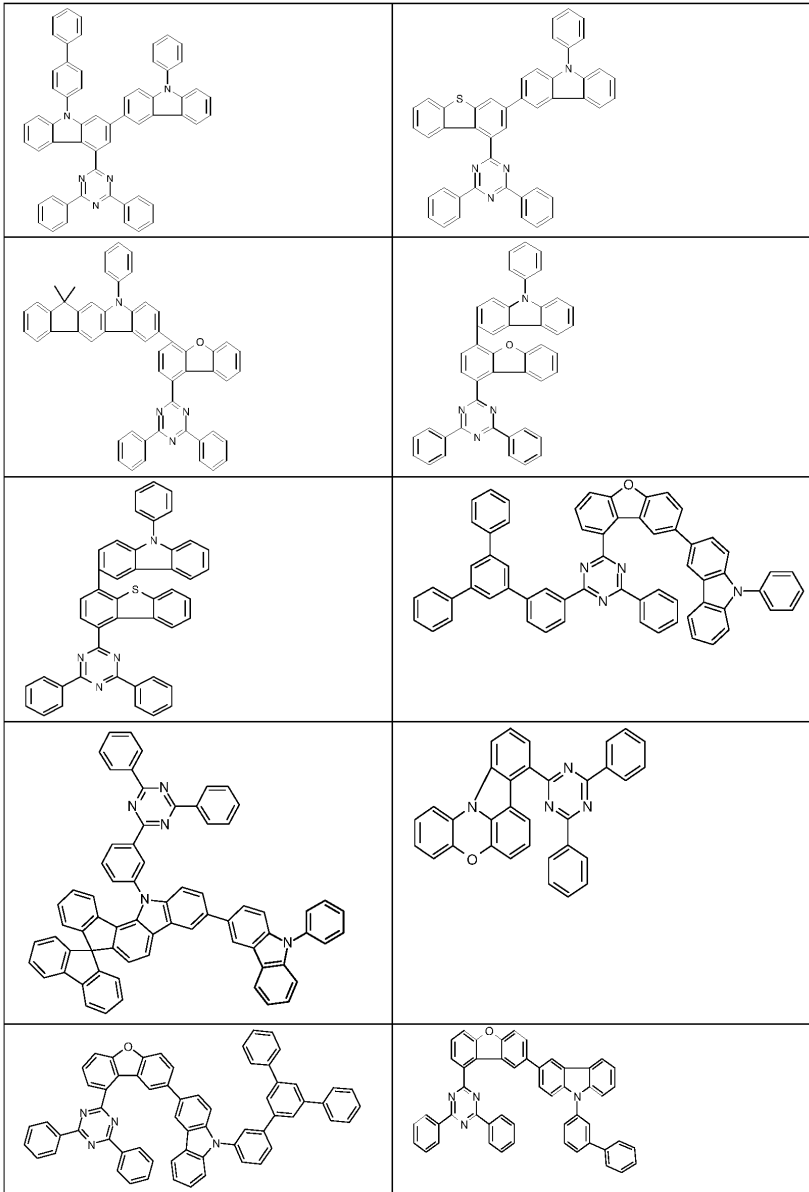
[0178]



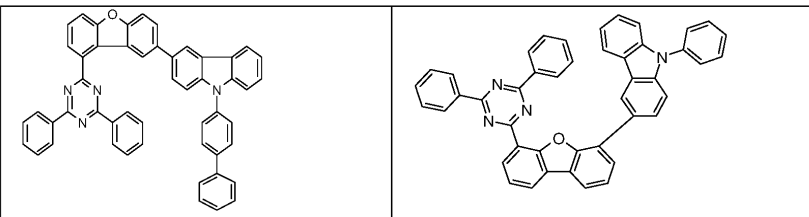
[0179]



[0180]

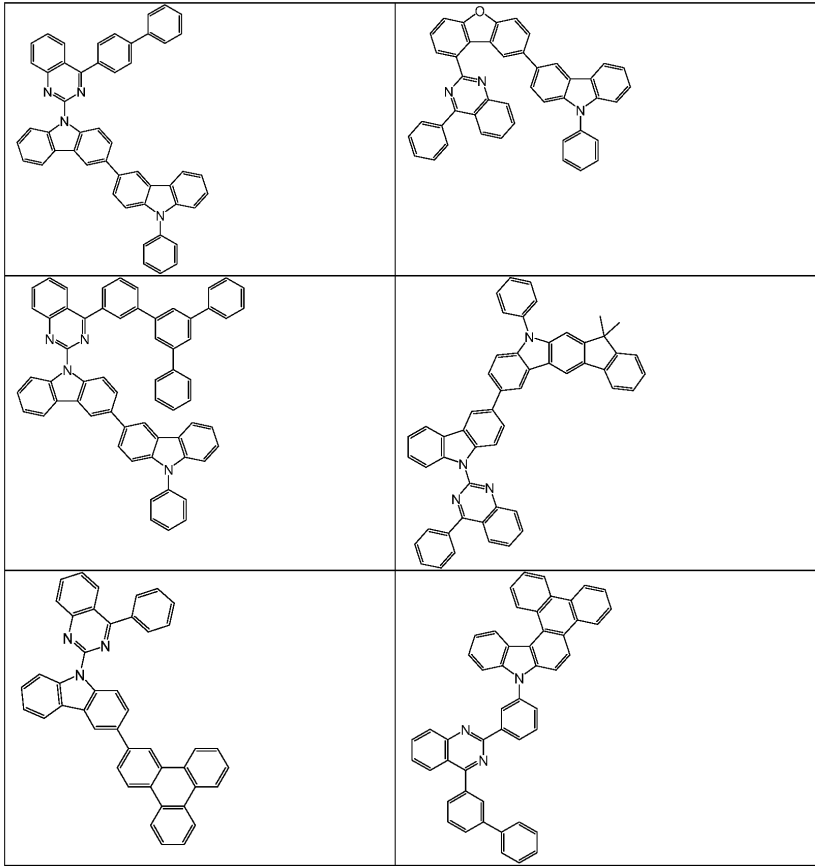


[0181]

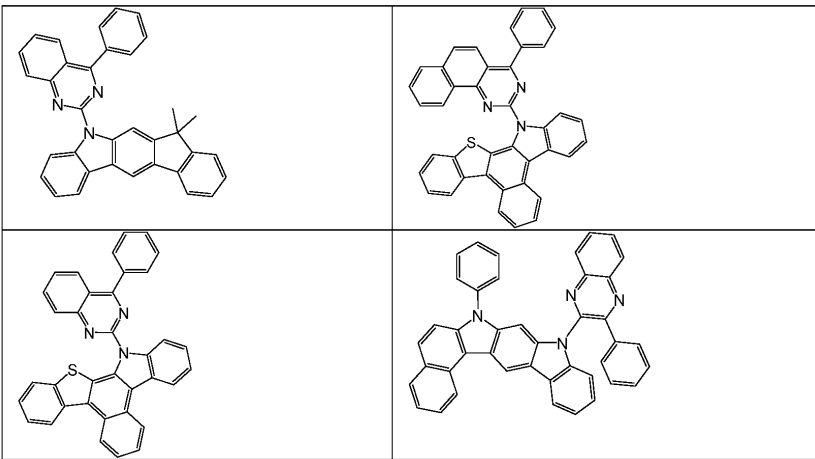


[0182]

[0183] 적합한 퀴나졸린 화합물의 예는 다음 표에 도시된 화합물이다:



[0184]



[0185]

[0186]

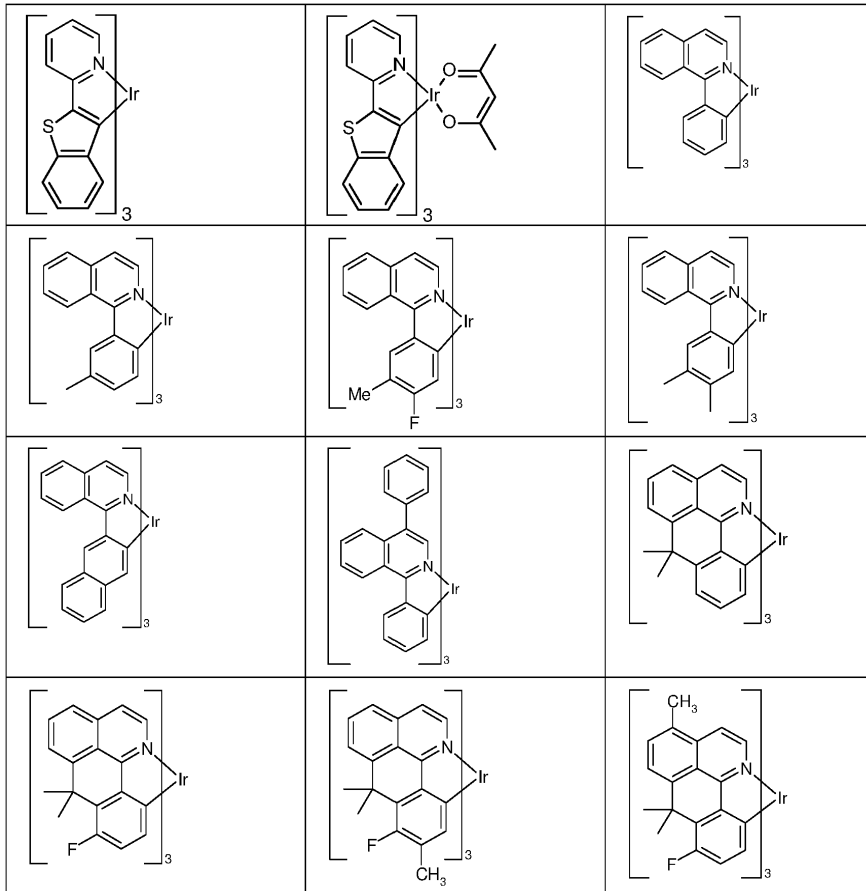
적합한 인광 화합물 (= 삼중항 방출체) 는 특히, 적합하게 여기될 때, 바람직하게는 가시 영역에서 발광하며 또한 20 초과, 바람직하게는 38 초과 및 84 미만, 보다 바람직하게는 56 초과 및 80 미만의 원자 번호의 적어도 하나의 원자, 특히 이러한 원자 번호를 갖는 금속을 함유하는 화합물이다. 사용되는 바람직한 인광 방출체 들은 구리, 몰리브덴, 텅스텐, 레늄, 루테튬, 오스뮴, 로듐, 이리듐, 팔라듐, 백금, 은, 금 또는 यू로퓼을 함유 하는 화합물들, 특히 이리듐 또는 백금을 함유하는 화합물들이다.

[0187]

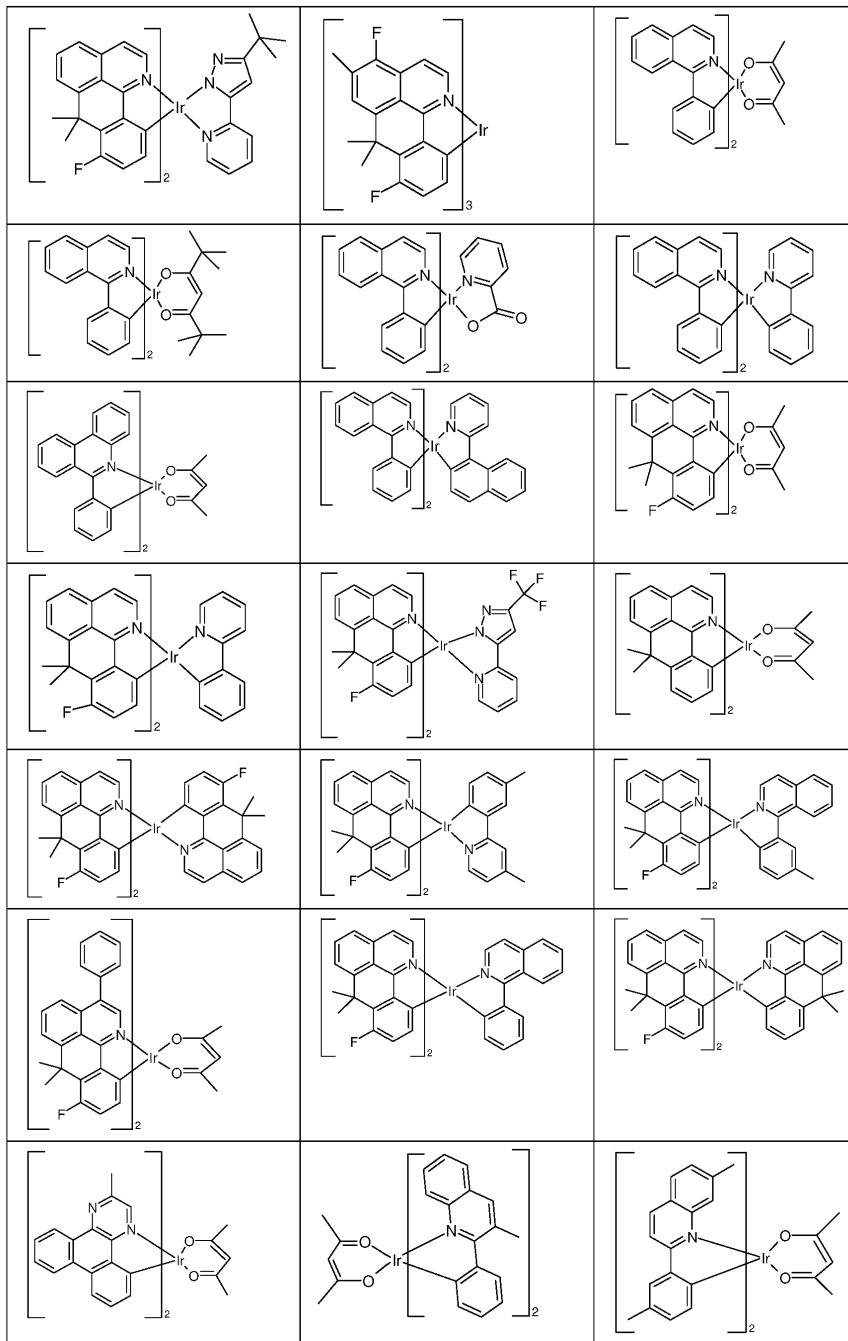
위에 기재된 방출체들의 예들은 출원 WO 00/70655, WO 2001/41512, WO 2002/02714, WO 2002/15645, EP 1191613, EP 1191612, EP 1191614, WO 05/033244, WO 05/019373, US 2005/0258742, WO 2009/146770, WO 2010/015307, WO 2010/031485, WO 2010/054731, WO 2010/054728, WO 2010/086089, WO 2010/099852, WO 2010/102709, WO 2011/032626, WO 2011/066898, WO 2011/157339, WO 2012/007086, WO 2014/008982, WO 2014/023377, WO 2014/094961, WO 2014/094960, WO 2015/036074, WO 2015/104045, WO 2015/117718, WO 2016/015815, WO 2016/124304, WO 2017/032439, WO 2018/011186, WO 2018/041769, WO 2019/020538, WO

2018/178001, WO 2019/115423 및 WO 2019/158453 에서 찾아볼 수 있다. 일반적으로, 종래 기술에 따라 인광 OLED 에 사용된 바와 같은 그리고 유기 전계 발광의 분야의 당업자에게 알려진 바와 같은 모든 인광 착물들이 적합하고, 당업자는 진보적 능력을 발휘하지 않고서 추가의 인광 착물을 사용 가능할 것이다.

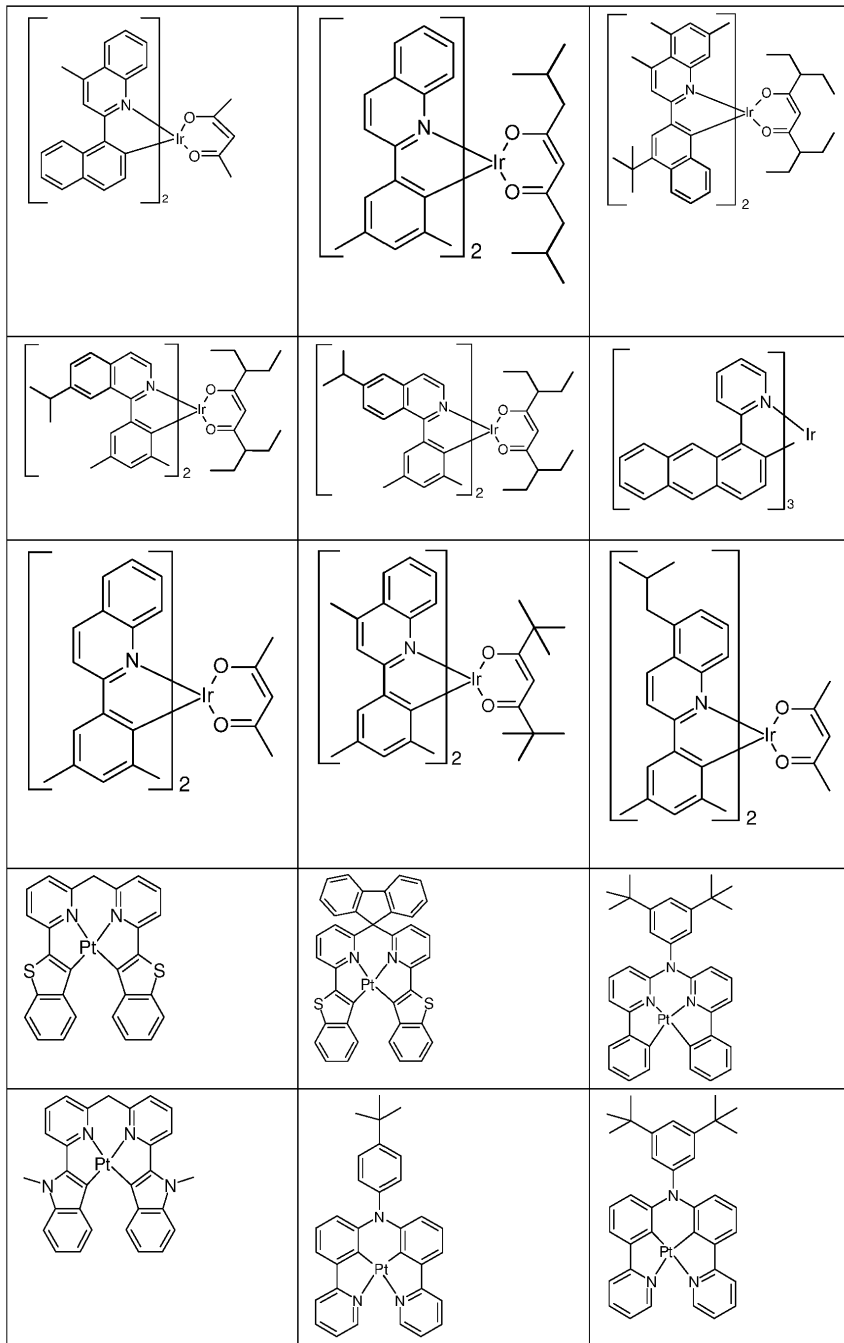
[0188] 인광 도펀트의 예가 아래에 제시되어 있다.



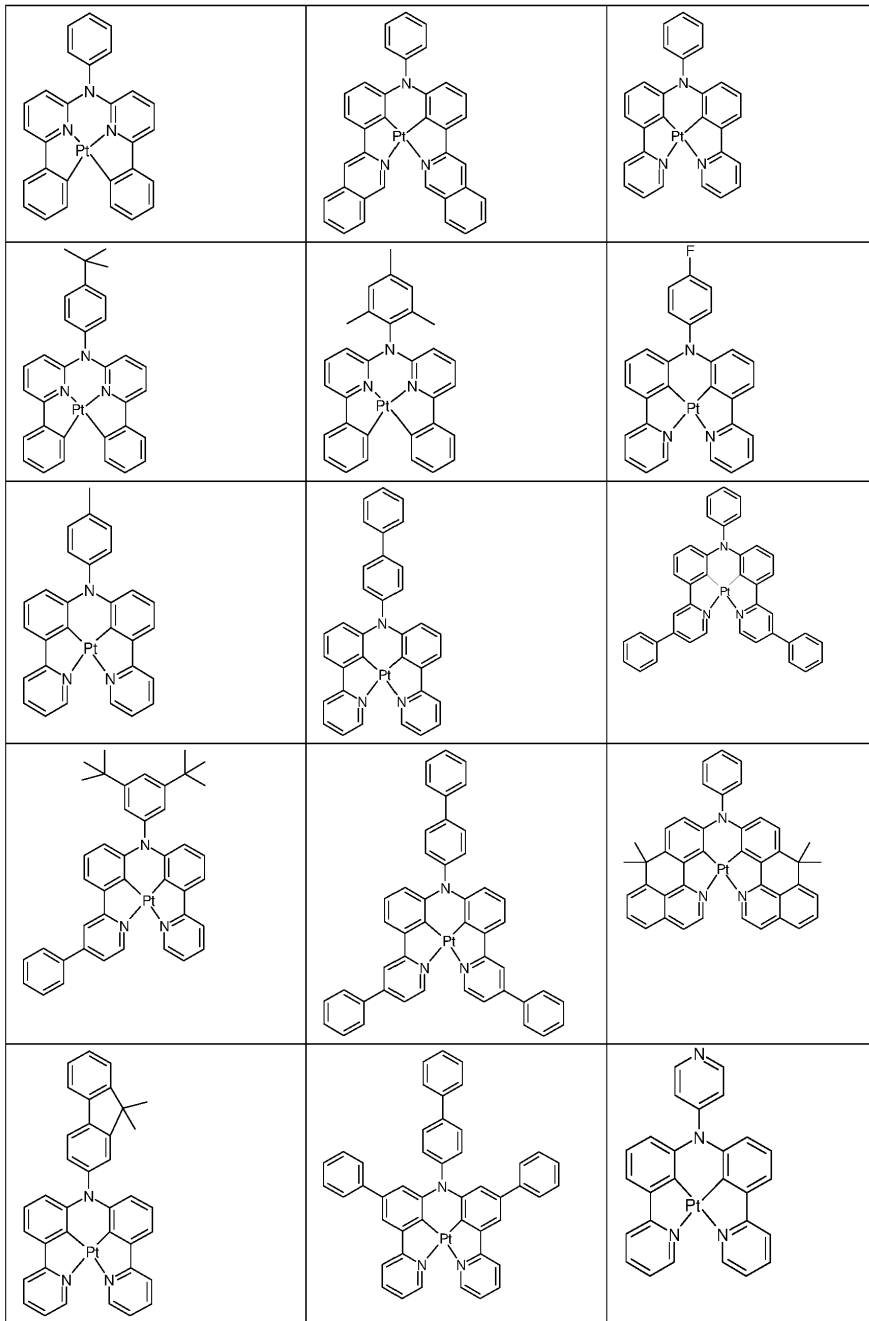
[0189]



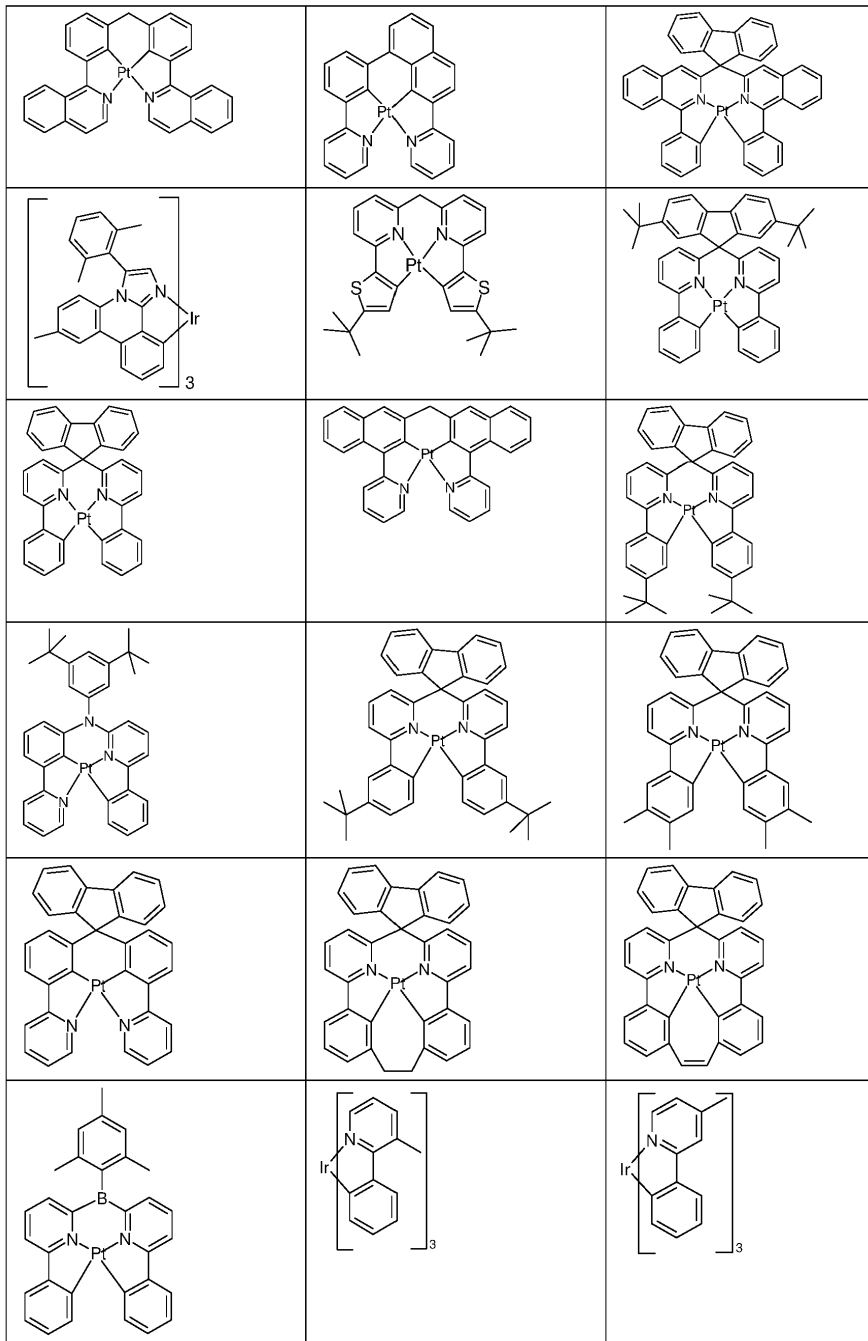
[0190]



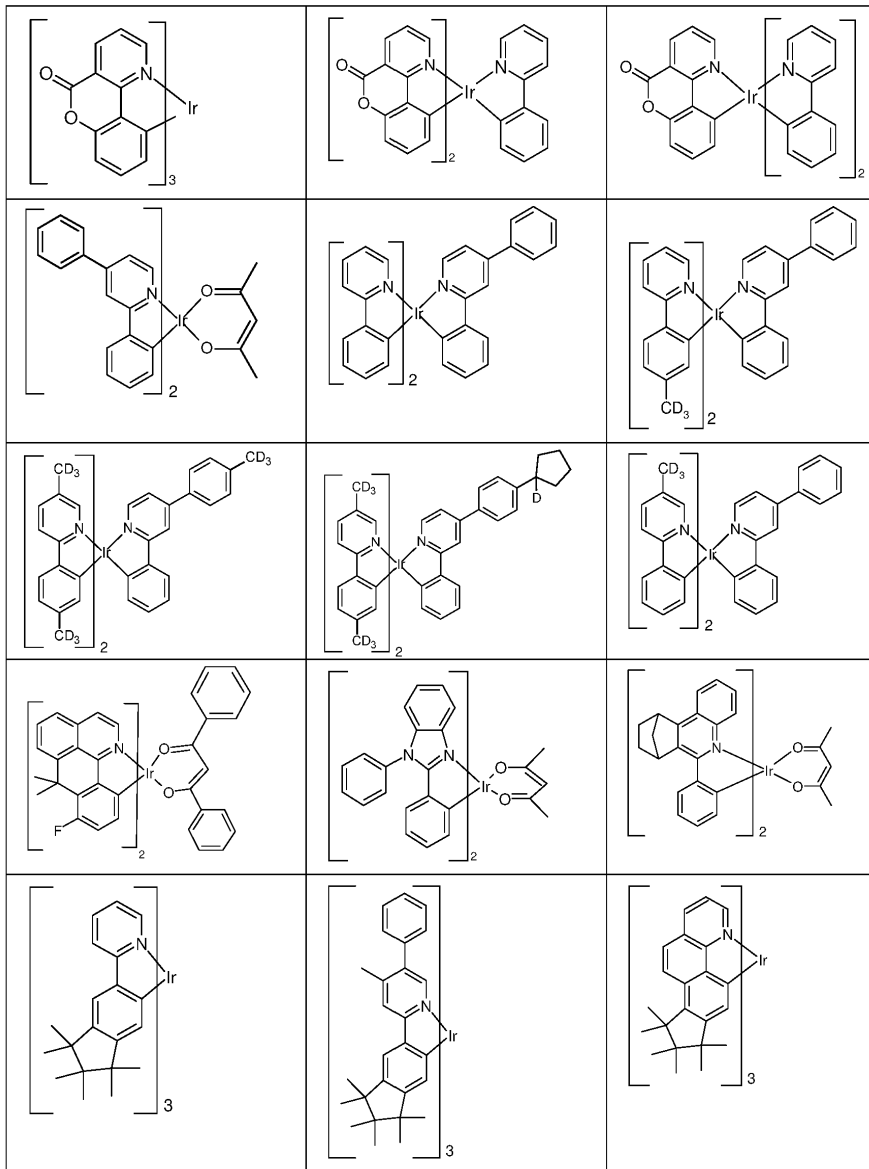
[0191]



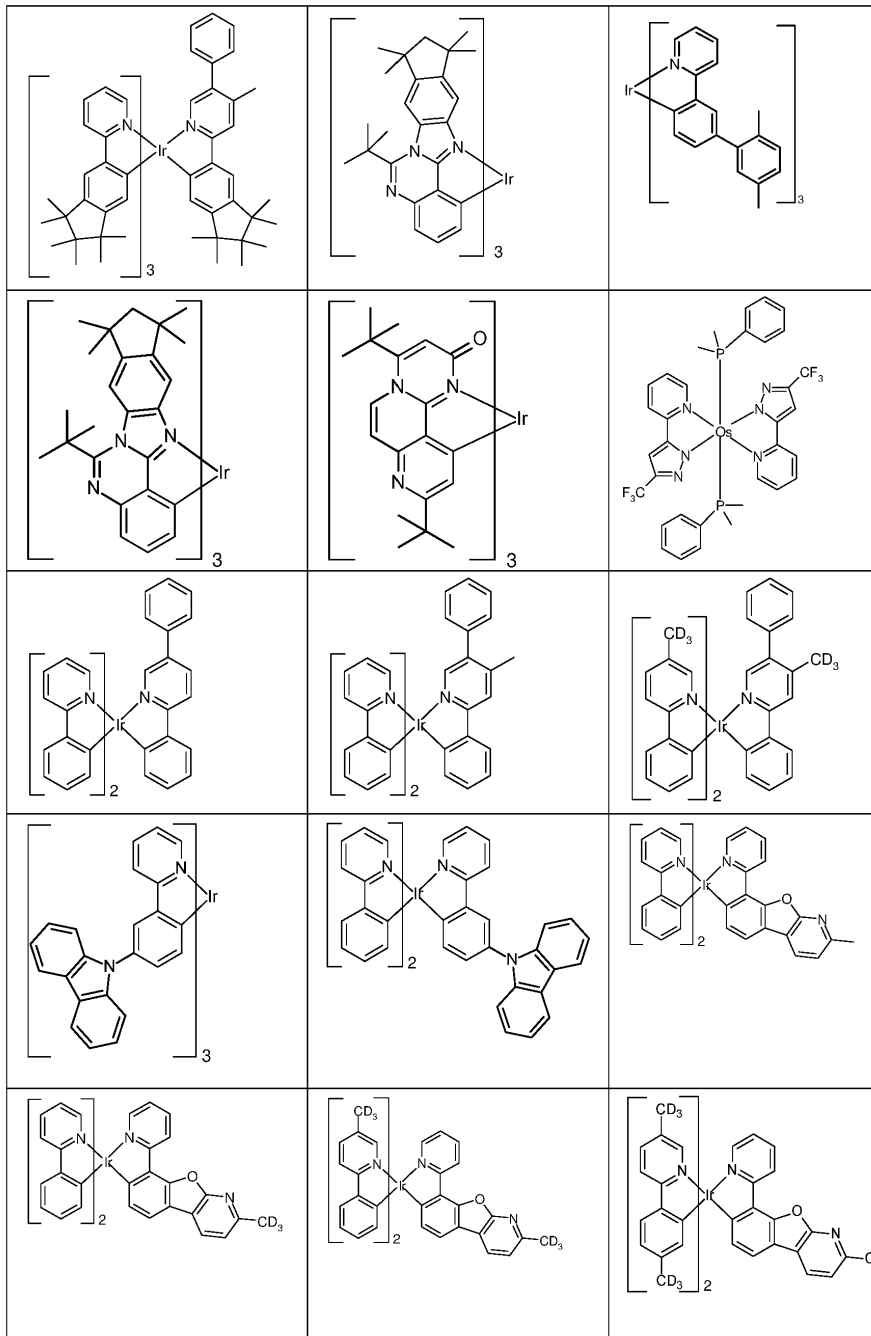
[0192]



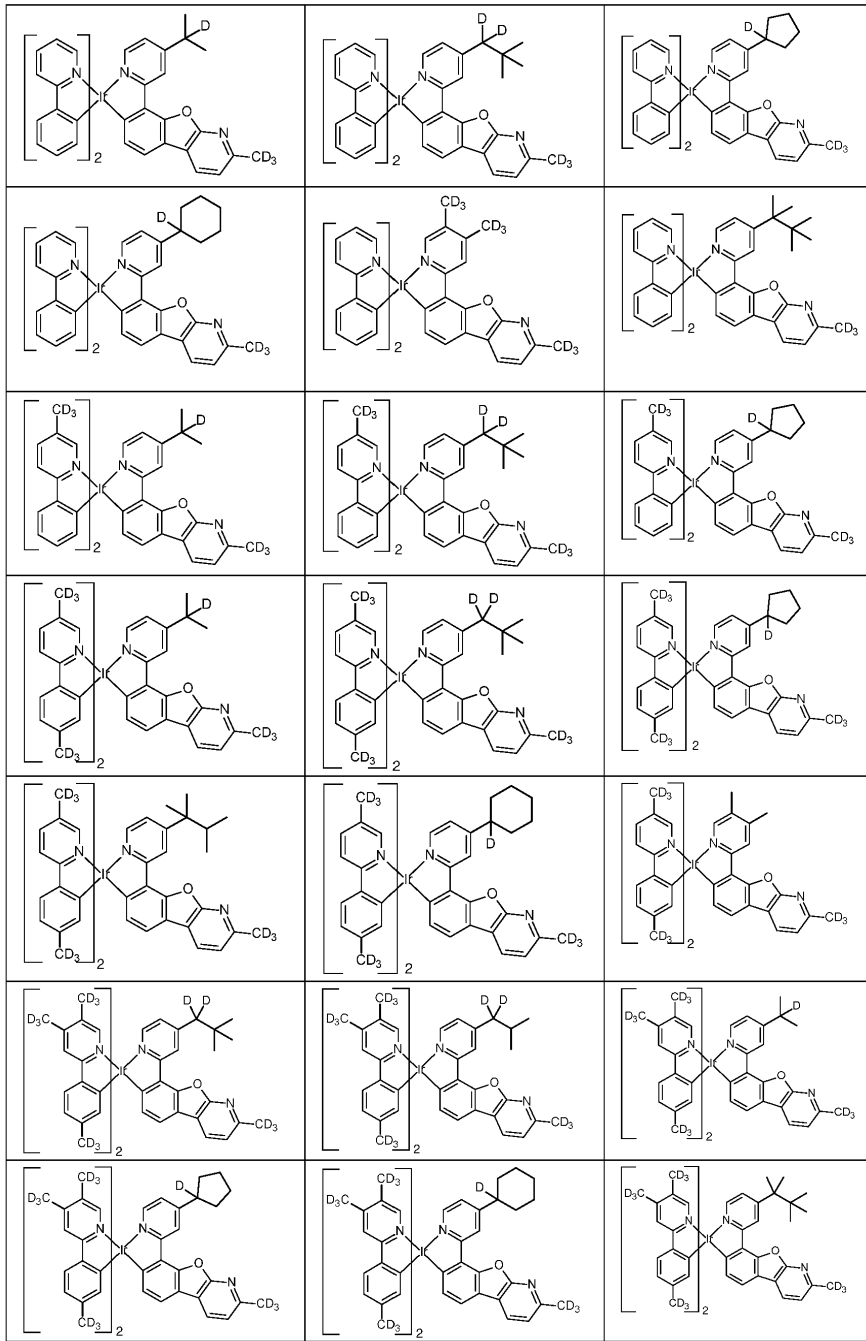
[0193]



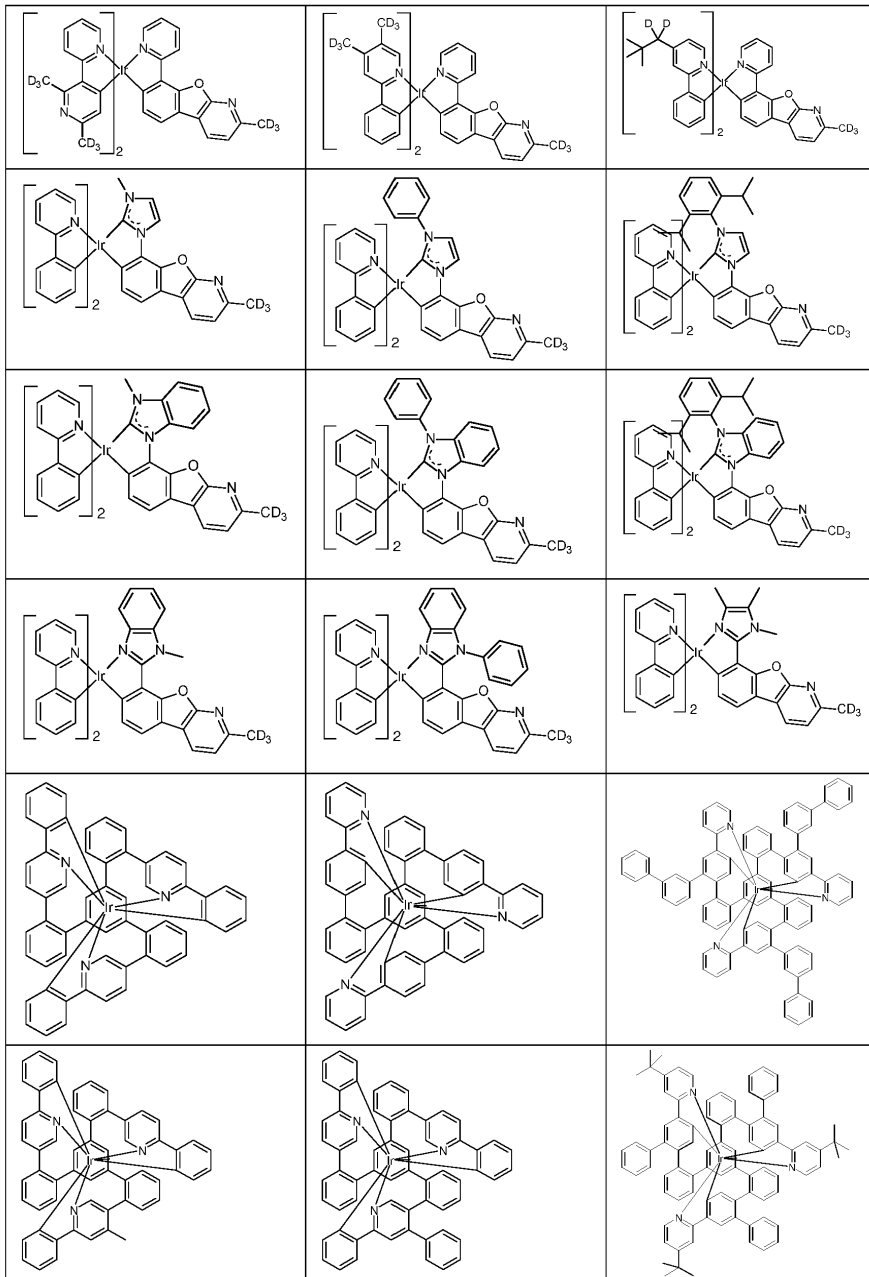
[0194]



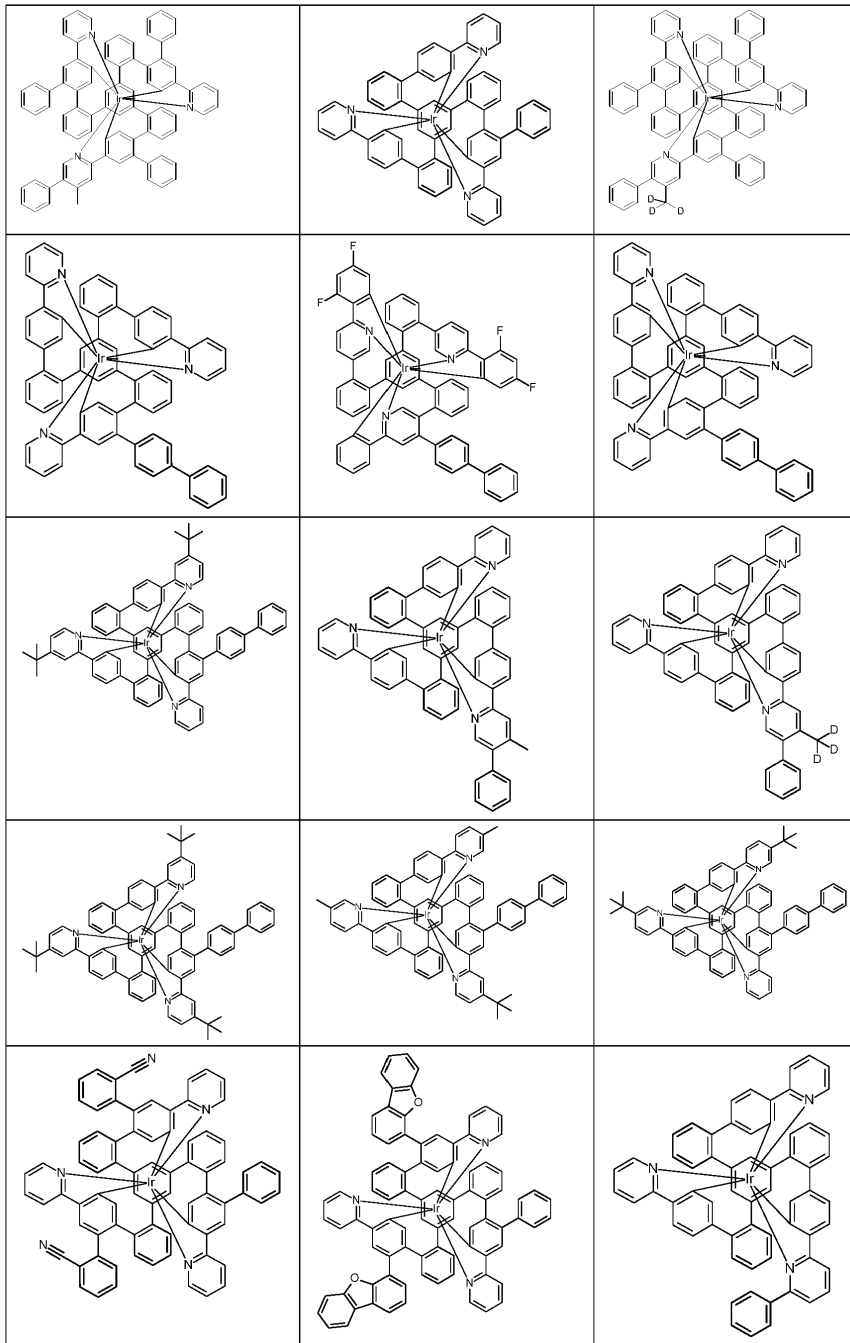
[0195]



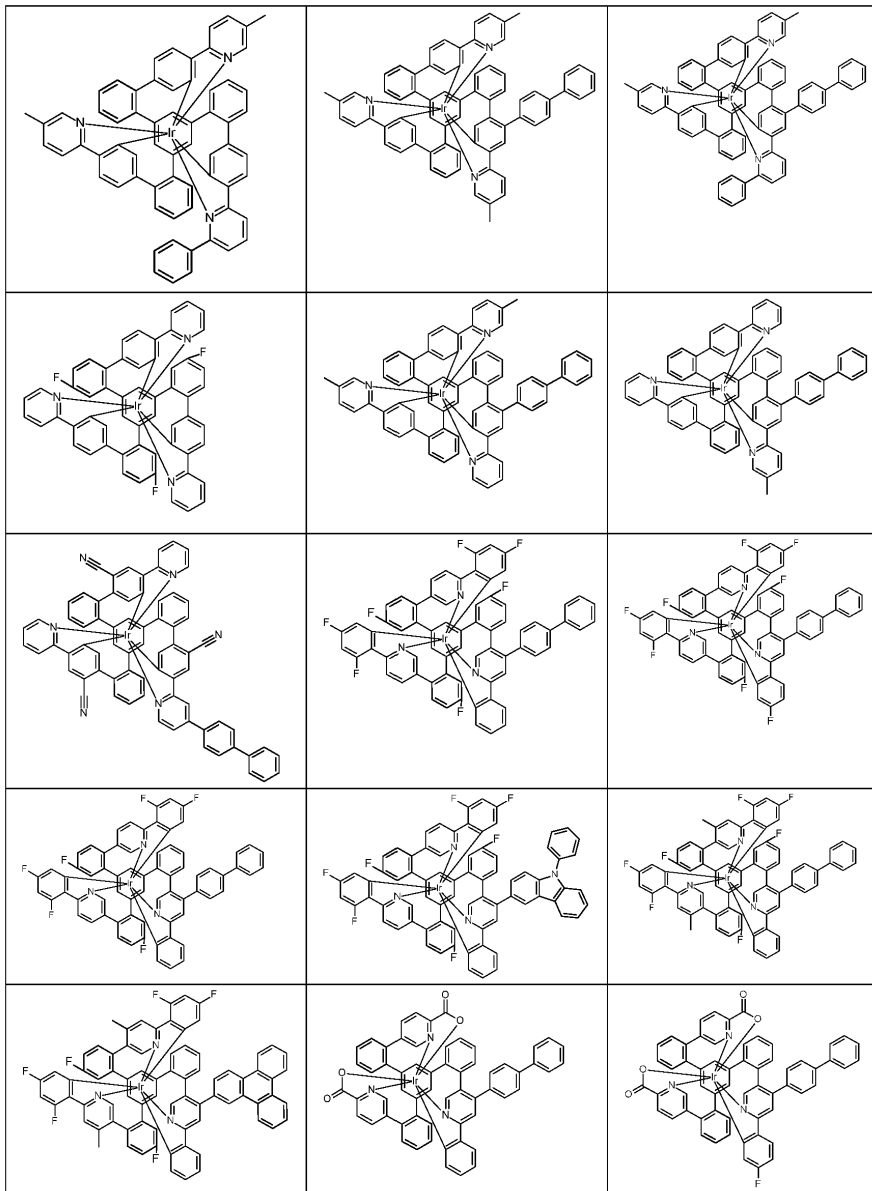
[0196]



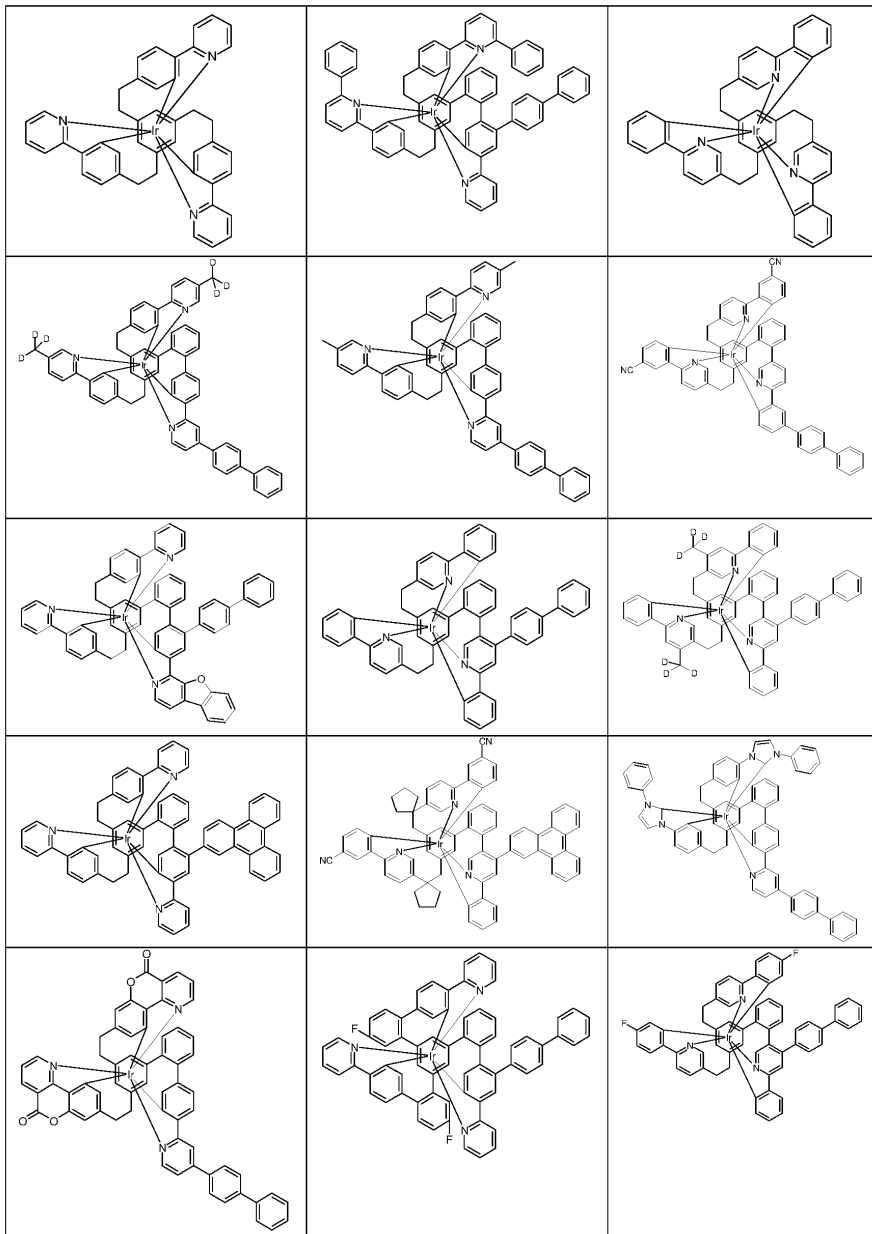
[0197]



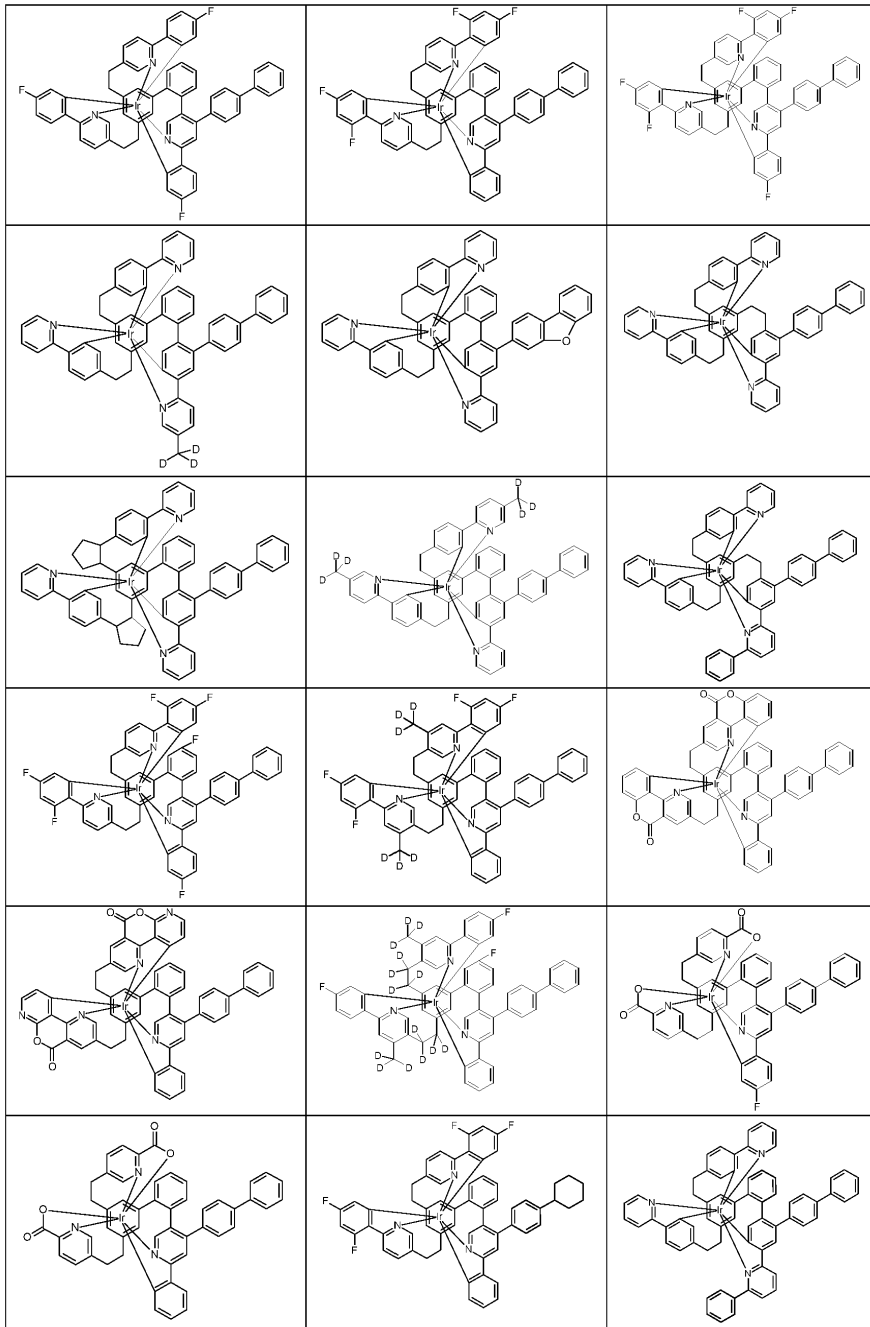
[0198]



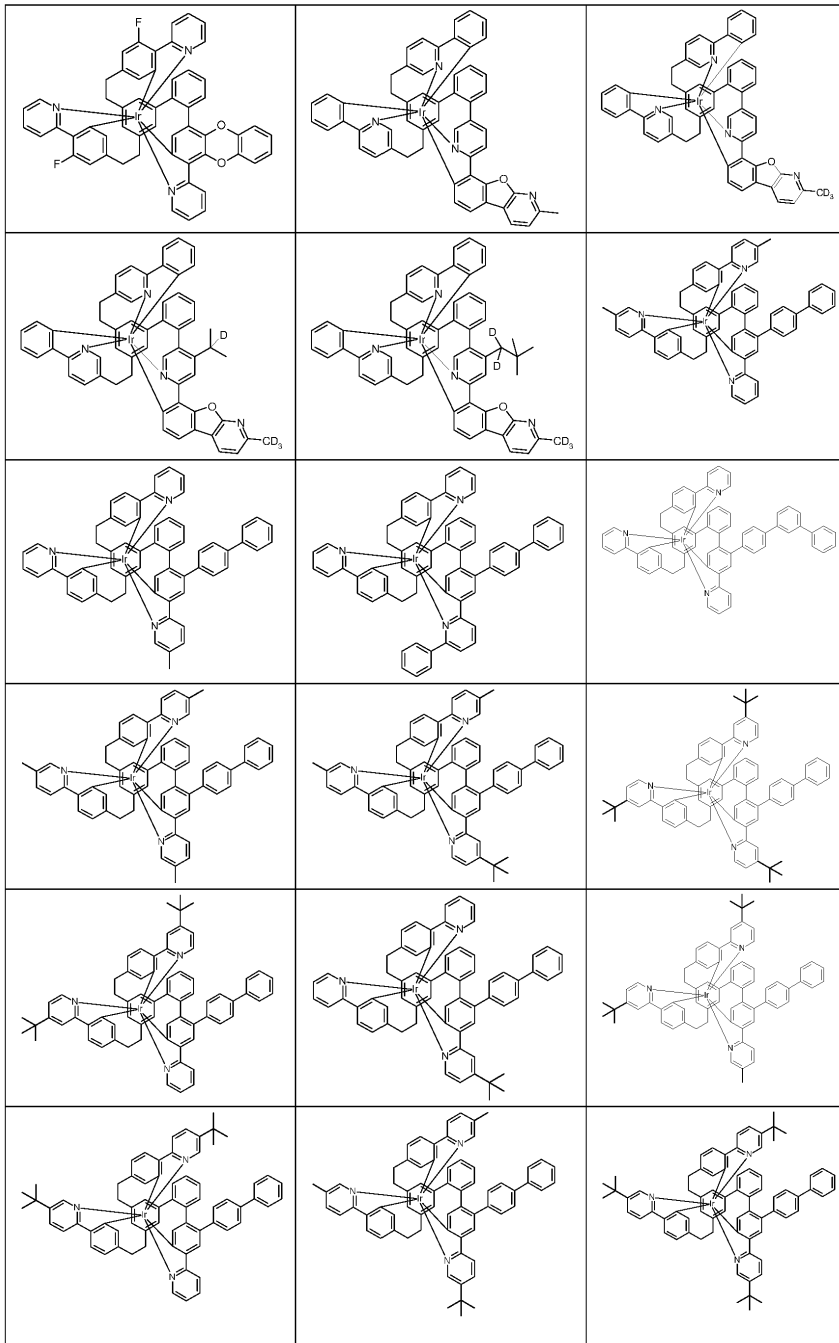
[0199]



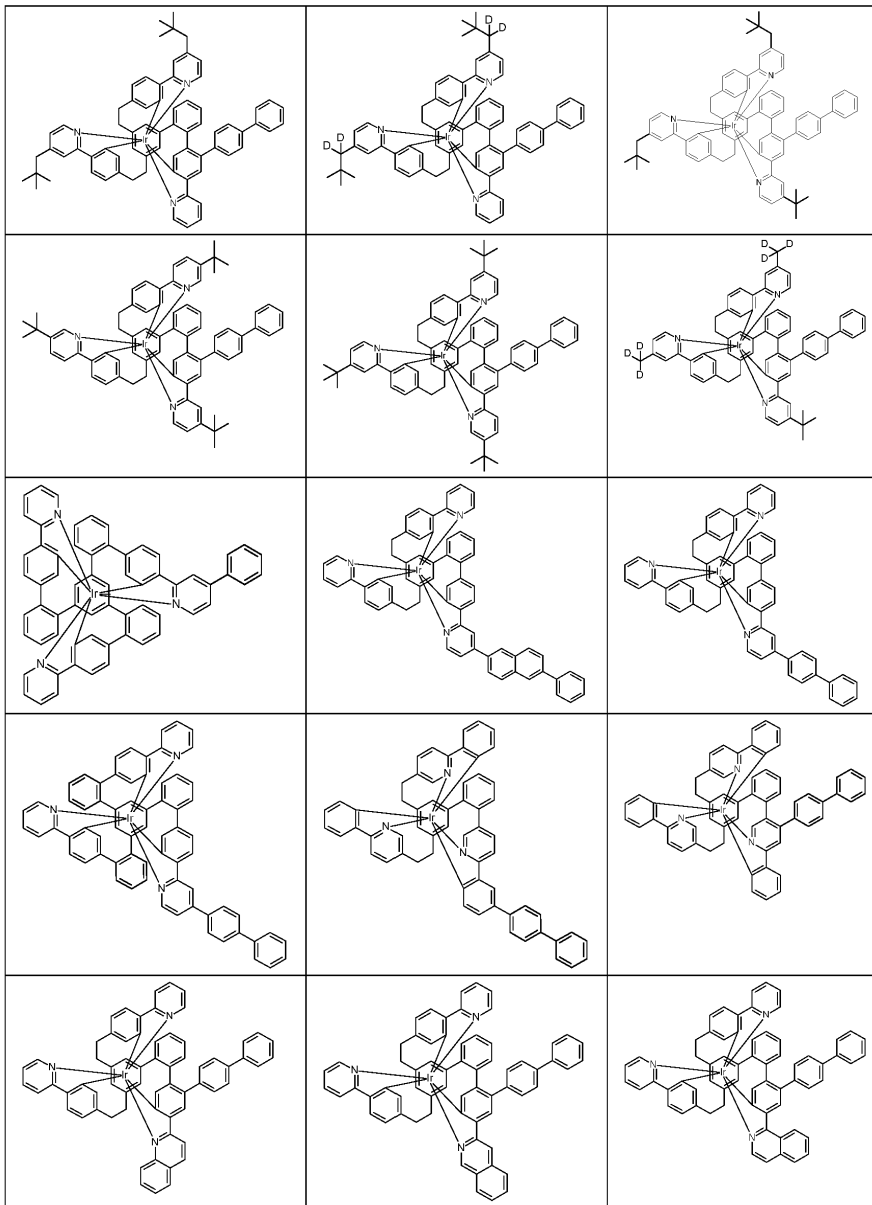
[0200]



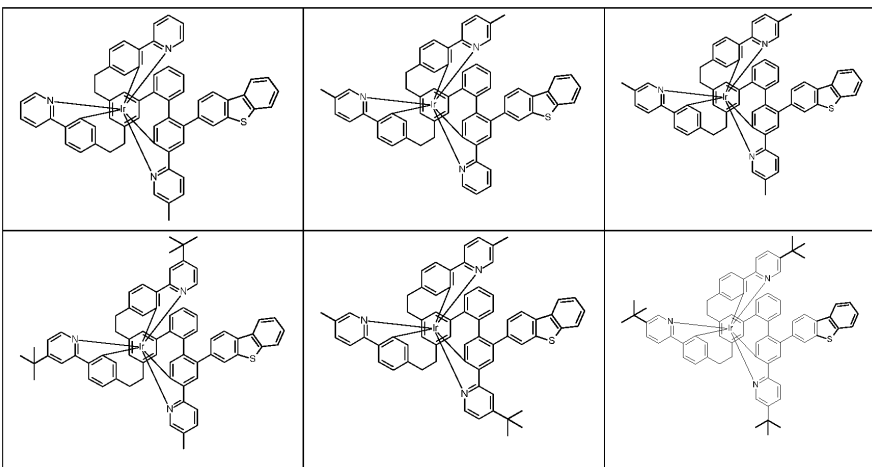
[0201]



[0202]



[0203]



[0204]

[0205]

본 발명의 유기 전계 발광 디바이스의 추가 층에서, 전형적으로 선행기술에 따라 사용된 임의의 재료를 사용할 수 있다. 따라서 당업자는 진보적 능력을 발휘하지 않고서도, 식 (1) 또는 위에 언급된 바람직한 실시형태들의 본 발명의 화합물과 조합하여 유기 전계 발광 디바이스를 위해 알려진 임의의 재료를 사용하는 것이 가능할 것이다.

[0206] 하나 이상의 층이 승화 방법에 의해 코팅되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 디바이스가 추가로 바람직하다. 이 경우, 재료는 10^{-5} mbar 미만, 바람직하게는 10^{-6} mbar 미만의 초기 압력에서 진공 승화 시스템에서 증착에 의해 적용된다. 하지만, 또한, 초기 압력은 훨씬 더 낮은, 예를 들어 10^{-7} mbar 미만일 수 있다.

[0207] 마찬가지로, 하나 이상의 층이 OVPD (organic vapor phase deposition) 방법에 의해 또는 캐리어 기체 승화의 도움으로 코팅되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 디바이스가 바람직하다. 이러한 경우, 재료들은 10^{-5} mbar 내지 1 bar 의 압력에서 적용된다. 이 방법의 특수한 경우는, 재료들이 노즐에 의해 직접 적용되어 구조화되는 OVJP (organic vapor jet printing) 방법이다.

[0208] 추가적으로, 하나 이상의 층이, 용액으로부터, 예를 들어 스핀 코팅에 의해, 또는 임의의 인쇄 방법, 예를 들어 스크린 인쇄, 플렉소그래픽 인쇄, 오프셋 인쇄, LITI (light-induced thermal imaging, thermal transfer printing), 잉크젯 인쇄 또는 노즐 인쇄에 의해 제조되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 디바이스가 바람직하다. 이 목적을 위해, 예를 들어 적합한 치환을 통해 얻어지는 가용성 (soluble) 화합물이 필요하다.

[0209] 또한, 예를 들어 하나 이상의 층이 용액으로부터 적용되고 하나 이상의 추가 층이 증착에 의해 적용되는 혼성 방법이 가능하다.

[0210] 당업자는 일반적으로 이들 방법을 알고 있으며, 본 발명의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 디바이스에 진보적 능력을 발휘하지 않고도 이를 적용할 수 있다.

[0211] 본 발명의 화합물 및 본 발명의 유기 전계 발광 디바이스는 아래의 놀라운 특성 중 하나 이상에 대해 주목할 만하다:

- [0212] 1. 인광 방출체를 위한 매트릭스 재료로서 사용되는, 본 발명의 화합물은 장 수명에 이른다.
- [0213] 2. 본 발명의 화합물은 고효율, 특히 고 EQE에 이른다. 이는 특히 화합물이 인광 방출체용 매트릭스 재료로서 사용될 때 그러하다.
- [0214] 3. 본 발명의 화합물은 낮은 작동 전압에 이른다. 이는 특히 화합물이 인광 방출체용 매트릭스 재료로서 사용될 때 그러하다.

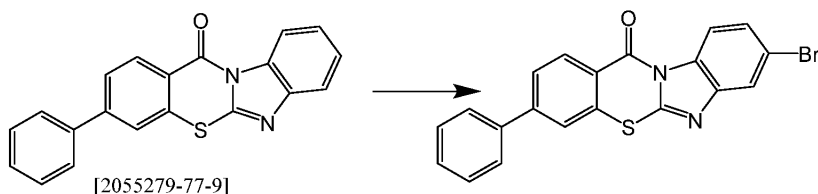
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0215] 본 발명은 하기의 실시예에 의해 더 상세히 예시되며, 이에 의해 본 발명을 제한하고자 하는 것은 아니다. 당업자는 주어진 정보를 사용하여 본 발명을 개시된 전체 범위에 걸쳐 실시하고, 본 발명의 추가의 화합물을 진보적 능력을 발휘하지 않고서도 제조하고, 이들을 전자 디바이스에서 사용하거나 본 발명의 방법을 사용하는 것이 가능할 것이다.

[0216] 실시예

[0217] 다르게 언급되지 않는 한, 하기 합성은 건조 용매 중 보호 기체 분위기 하에서 수행된다. 용매 및 시약은 예를 들어 Sigma-ALDRICH 또는 ABCR 로부터 구입할 수 있다. 문헌으로부터 공지된 화합물의 경우, 대응하는 CAS 번호가 각 경우에 또한 보고된다.

[0218] 실시예 a) 8-브로모-3-페닐벤조이미다졸로[2,1-b][1,3]벤조티아진-12-온

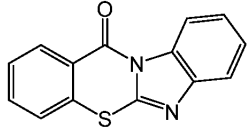
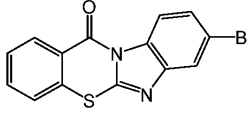
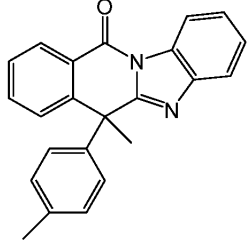
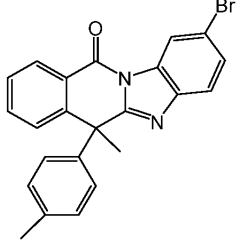


[0219]

[0220] 7.6 g (23 mmol) 의 3-페닐벤조이미다졸로[2,1-b][1,3]벤조티아진-12-온을 초기에 150 ml 의 DMF 에 투입한다. 이어서, 100 ml 의 DMF 중 4 g (22.5 mmol) 의 NBS 의 용액을 실온의 암 상태에서 적가하고, 혼합물을 실온이 되게 하고 이 온도에서 4 시간 동안 계속 교반한다. 이어서, 물 150 ml 이 혼합물에 첨가되고 CH_2Cl_2 로 추출된다. 유기 상을 $MgSO_4$ 위에서 건조시키고, 용매를 감압하에 제거하였다. 생성물을 고온

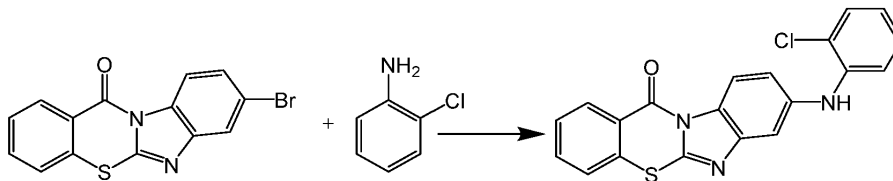
헥산으로 추출 교반하고, 흡인 여과한다. 수율 : 7.9 g (19 mmol), 이론치의 85%, ¹H NMR 에 의한 순도 약 98%.

[0221] 하기 화합물이 유사한 방식으로 수득된다:

Ex.	반응물	생성물	수율
1a	 [63586-54-9]		69%
2a	 [2089317-48-4]		60%

[0222]

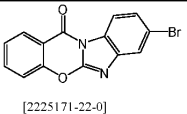
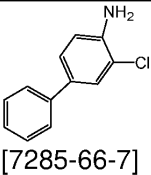
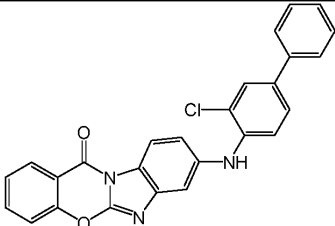
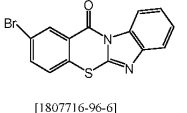
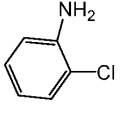
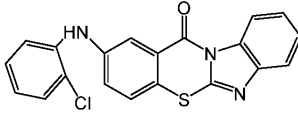
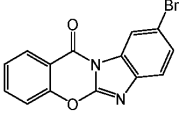
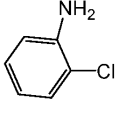
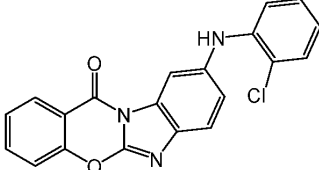
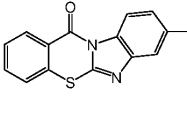
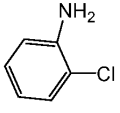
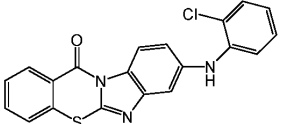
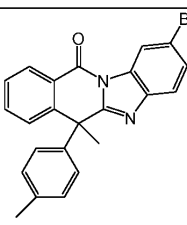
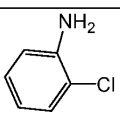
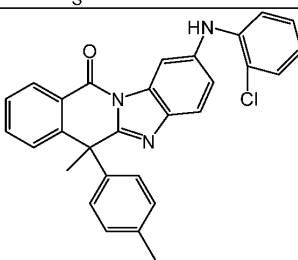
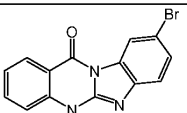
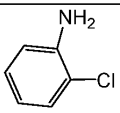
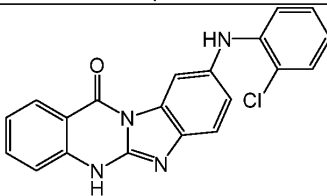
[0223] b) 8-(2-클로로아닐리노)벤즈이미다졸로[2,1-b][1,3]벤조티아진-12-온



[0224]

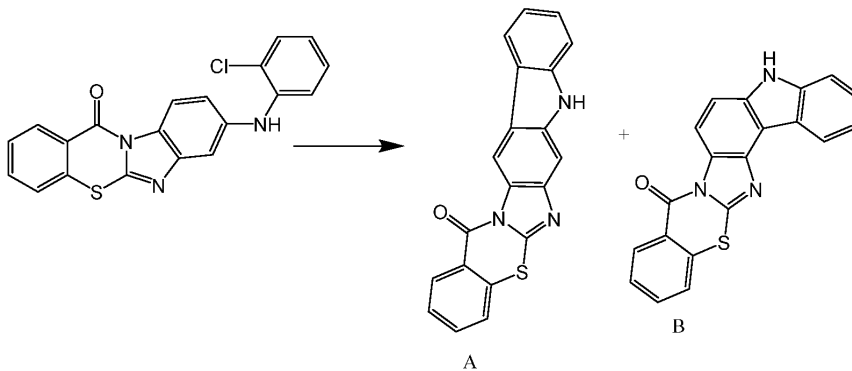
[0225] 46 g (140 mmol) 의 8-브로모벤즈이미다졸로[2,1-b][1,3]벤조티아진-12-온, 17.9 g (140 mmol) 의 2-클로로아닐린, 68.2 g (710 mmol) 의 나트륨 tert-부톡시드, 613 mg (3 mmol) 의 팔라듐 (II) 아세테이트 및 3.03 g (5 mmol) 의 dppf 를 1.3 l 의 톨루엔에 용해시키고 환류하에 5 시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 톨루엔으로 확장하고 Celite 를 통해 여과하였다. 여과물을 감압하에 농축시키고, 잔류물을 톨루엔/헥산으로부터 결정화시킨다. 생성물을 무색의 고체로서 단리한다. 수율: 42.7 g (113 mmol), 이론치의 81%.

[0226] 하기 화합물들을 유사하게 제조할 수 있다:

Ex.	반응물 1	반응물 2	생성물	수율
1b	 [2225171-22-0]	 [7285-66-7]		80%
2b	 [1807716-96-6]			83%
3b	 [2225171-21-9]			79%
4b	 [2225171-21-9]			77%
5b	 [2225171-21-9]			86%
6b	 [140939-09-9]			88%

[0227]

[0228] c) 고리화

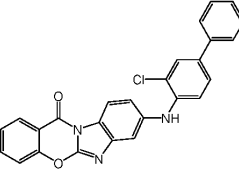
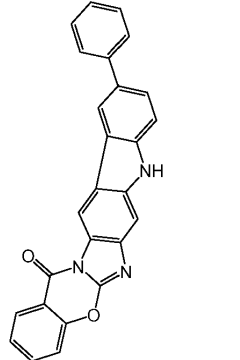
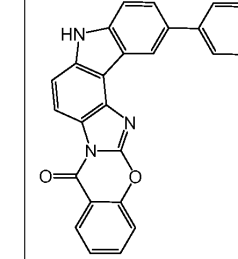


[0229]

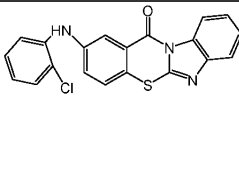
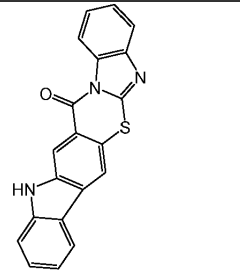
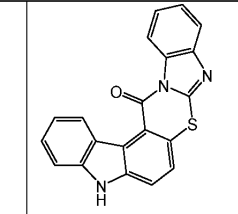
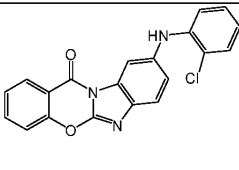
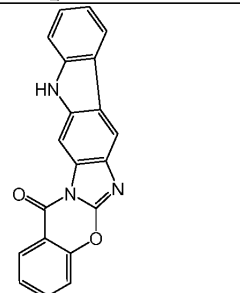
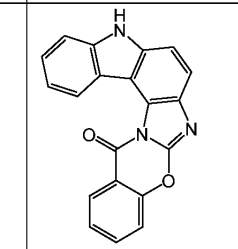
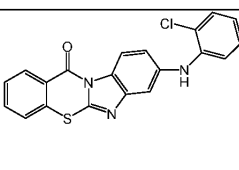
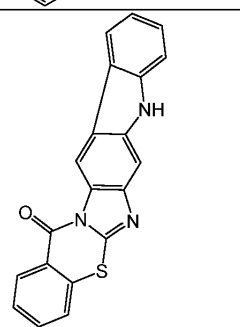
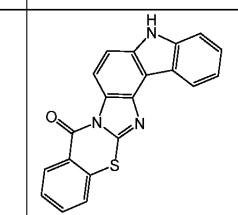
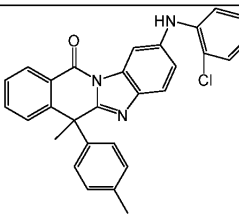
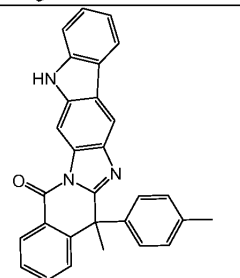
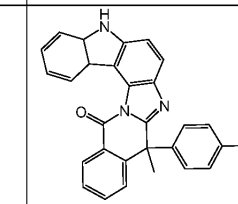
[0230] 37 g (100 mmol) 의 8-(2-클로로아닐리노)벤즈이미다졸로[2,1-b][1,3]벤조티아진-12-온, 56 g (409 mmol) 의 칼륨 카보네이트, 4.5 g (12 mmol) 의 트리시클로헥실포스핀 테트라플루오로보레이트, 1.38 g (6 mmol) 의 팔라듐(II) 아세테이트를 500 ml 의 디메틸아세트아미드에 현탁시키고 환류하 6시간 동안 교반하였다. 냉각 후, 반응 혼합물을 300 ml의 물 및 400 ml의 에틸 아세테이트로 희석한다. 혼합물을 추가로 30 분 동

안 교반하고, 유기 상을 분리하고, 짧은 Celite 층을 통해 여과한 후, 용매를 감압 하에 제거한다. 조 생성물 (crude product) 을 톨루엔으로 고온 추출하고, 톨루엔으로부터 재결정화한다. 수율: 22.8 g (88 mmol) 의 A+B 혼합물; 이론치의 88%; 순도: HPLC 에 의한 98.0%. EA/톨루엔 (1:3) 으로부터 재결정화 및 후속 후 처리(work up) 후, 69% A 및 19% B 가 수득된다.

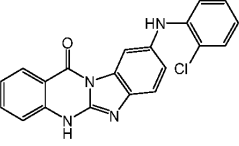
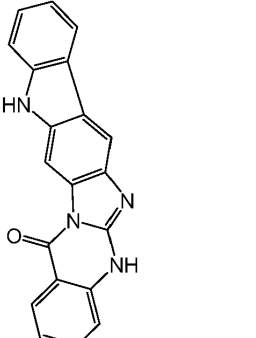
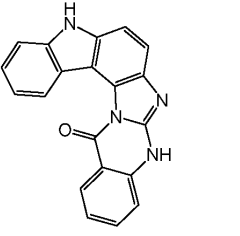
[0231] 하기 화합물들을 유사하게 제조할 수 있다:

	반응물	생성물 A	생성물 B	수율
1c				57%, 21%

[0232]

2c				65%, 14%
3c				66%, 18%
4c				61%, 19%
5c				55%, 17%

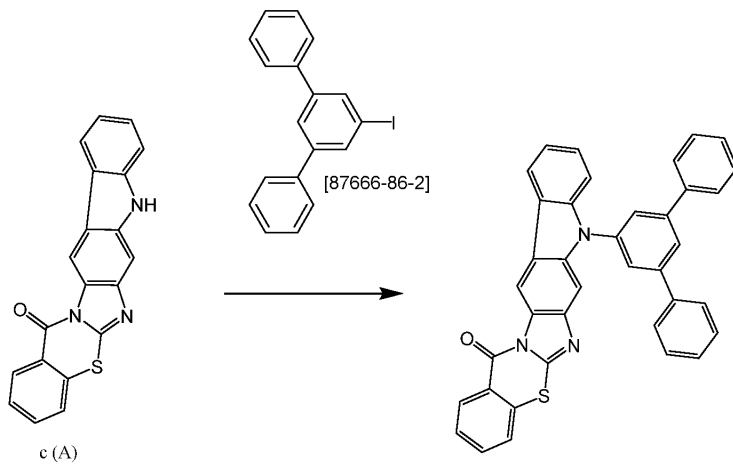
[0233]

6c				54%, 15%
----	---	---	--	-------------

[0234]

[0235]

d) Ullmann 반응

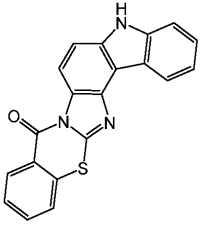
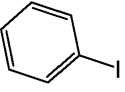
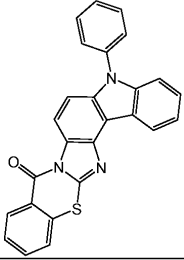
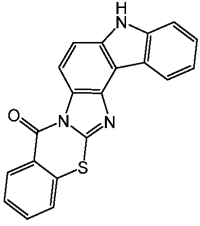
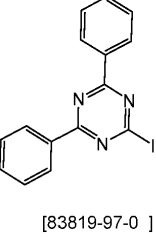
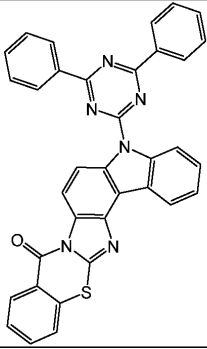
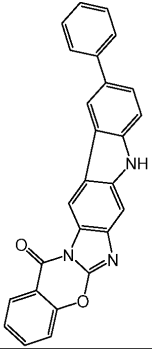
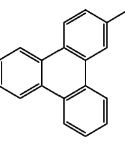
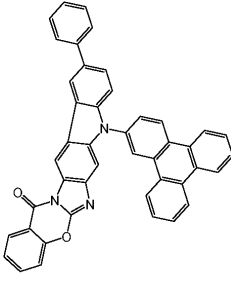
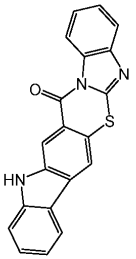
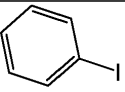
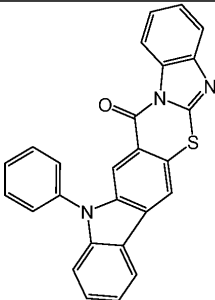


[0236]

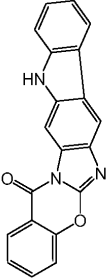
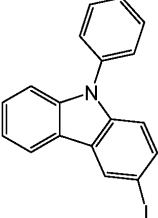
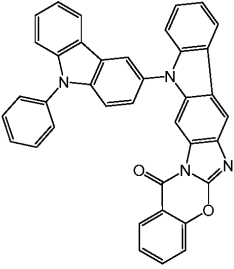
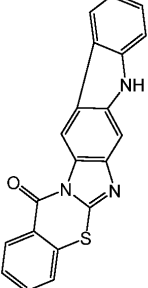
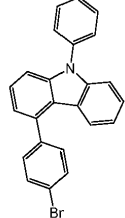
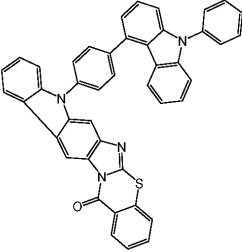
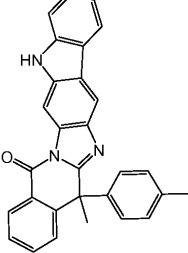
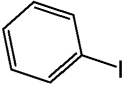
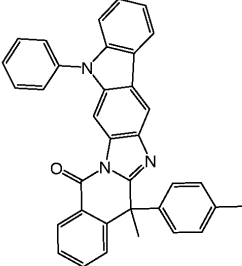
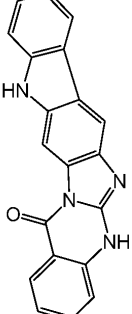
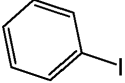
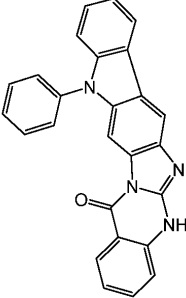
[0237]

68 g (200 mmol) 의 화합물 c (A), 106 g (300 mmol) 의 5'-요오도-[1,1';3',1'']테르페닐 및 2.3 g (20 mmol) 의 L-프롤린을 30시간 동안 150℃ 의 1,2-디클로로벤젠 100ml 에서 교반한다. 용액을 물로 희석하고 에틸 아세테이트로 두 번 추출하고 합해진 유기 상을 Na₂SO₄ 위에서 건조하고 회전 증발에 의해 농축한다. 잔류물을 크로마토그래피 (EtOAc/헥산: 2/3) 로 정제한다. 수율은 71 g (125 mmol), 이론치의 63% 이다.

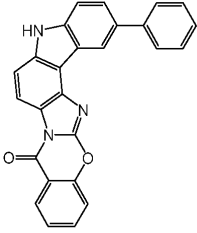
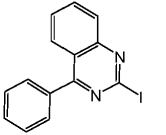
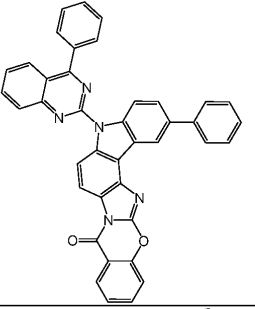
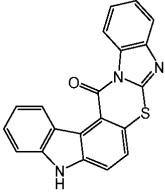
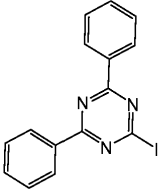
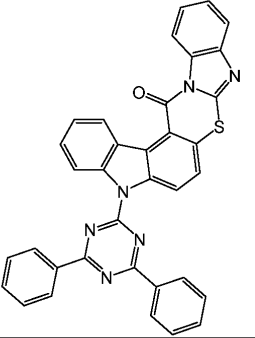
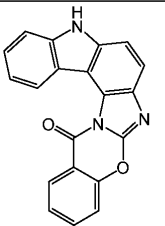
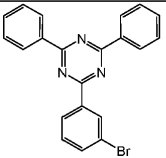
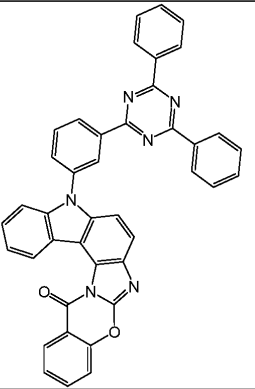
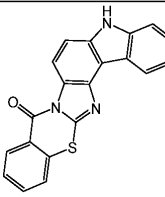
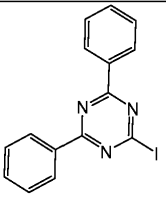
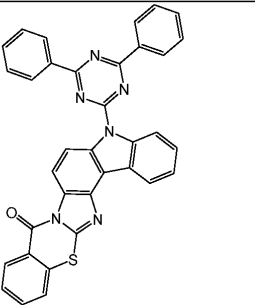
[0238] 하기 화합물이 유사한 방식으로 수득된다:

Ex.	반응물 1	반응물 2	생성물	수율
1d				59%
2d				65%
3d				66%
4d				66%

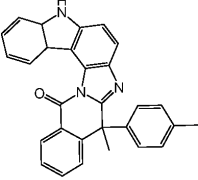
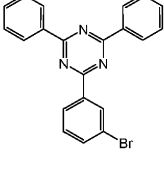
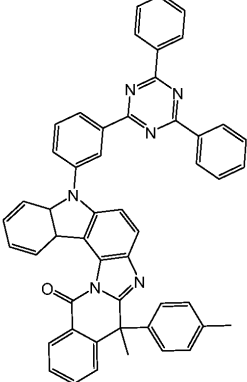
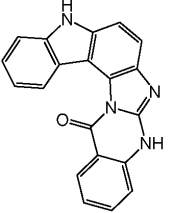
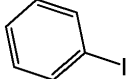
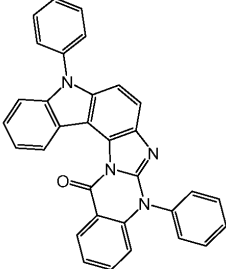
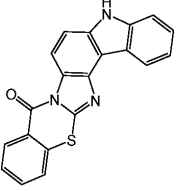
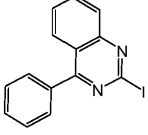
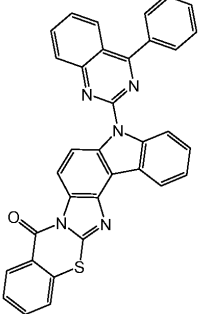
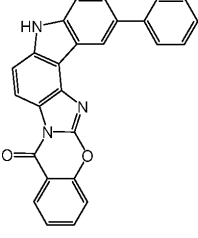
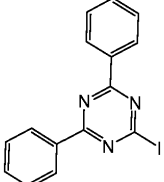
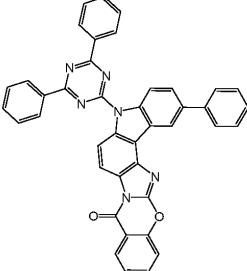
[0239]

5d		 <p>[502161-03-7]</p>		64%
6d		 <p>[1505512-86-6]</p>		55%
7d				71%
8d				70%

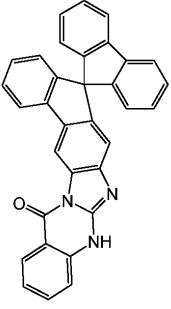
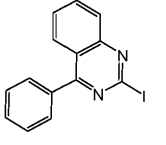
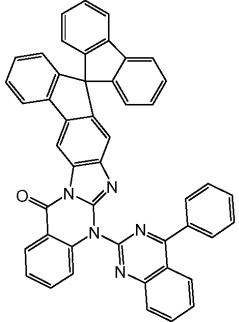
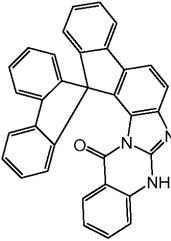
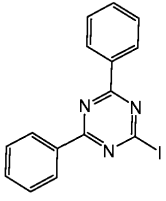
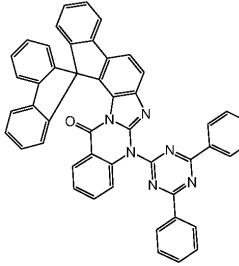
[0240]

9d		 <p>[1628067-38-8]</p>		65%
10d		 <p>[83819-97-0]</p>		53%
11d		 <p>[864377-31-1]</p>		52%
12d		 <p>[83819-97-0]</p>		60%

[0241]

13d		 <p>[864377-31-1]</p>		47%
14d				60%
15d		 <p>[1628067-38-8]</p>		63%
16d		 <p>[83819-97-0]</p>		70%

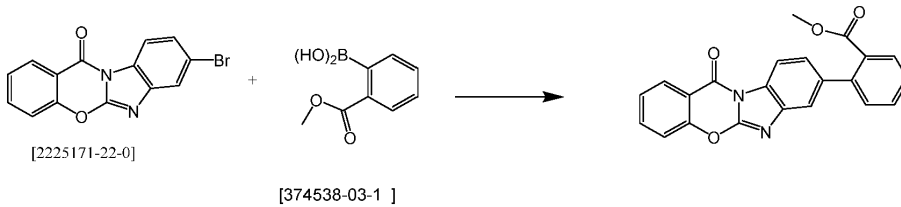
[0242]

17d		 <p>[1628067-38-8]</p>		65%
18d		 <p>[83819-97-0]</p>		63%

[0243]

[0244]

e) 2-(12-옥소벤즈이미다졸로[2,1-b][1,3]벤즈옥사진-8-일)메틸벤조산

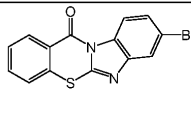
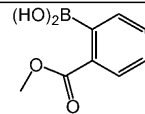
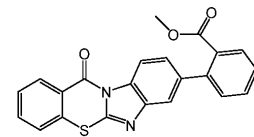
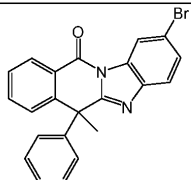
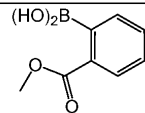
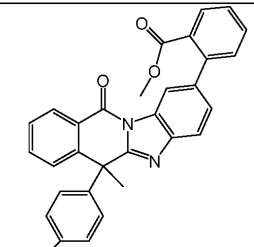
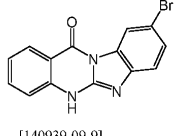
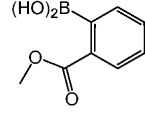
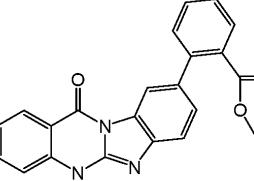
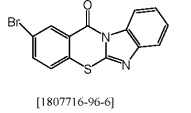
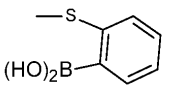
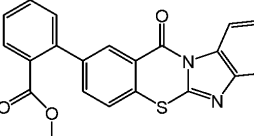
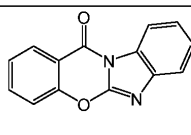
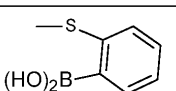
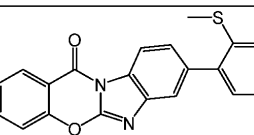


[0245]

[0246]

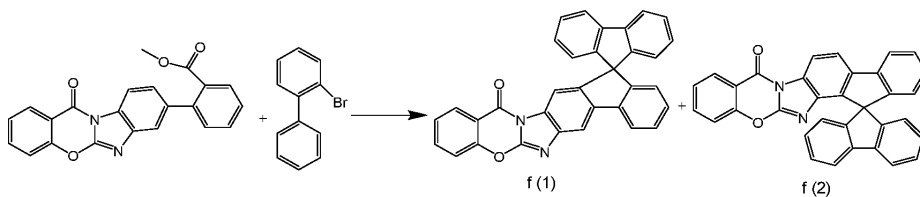
물 350 ml 및 THF 350 ml 의 혼합물 중 10.6 g (71 mmol) 의 [2-(메톡시카르보닐)페닐]보론산, 22.3 g (72 mmol) 의 8-브로모벤즈이미다졸로[2,1-b][1,3]벤즈옥사진-12-온 및 18.9 g (6.6 mmol) 의 인산삼칼륨의 잘 교반된 탈기된 현탁액에 1.55 g (0.1 mmol) 의 Pd(PPh₃)₄ 를 첨가하고 혼합물을 환류하에서 60 시간 동안 가열한다. 냉각 후, 유기상을 제거하고, 200 ml 의 물로 3 회 및 200 ml 의 포화 염화 나트륨 용액으로 1 회 세척한 후 황산 마그네슘 상에서 건조시킨다. 유기 상이 감압하에 회전 증발에 의해 농축 건조 (concentrated to dryness) 된다. 이렇게 얻어진 회색 잔류물을 디옥산으로부터 재결정화시킨다. 침전된 결정들을 흡인 여과하고, 50 ml 의 에탄올로 세척한 다음, 감압하에서 건조시킨다. 수율: 22.1 g (59 mmol), 이론치의 83%.

[0247] 하기 화합물들을 유사하게 제조할 수 있다:

	반응물 1	반응물 2	생성물	수율
1e		+  [374538-03-1]		70%
2e		+  [374538-03-1]		73%
3e	 [140939-09-9]	+  [374538-03-1]		75%
4e	 [1807716-96-6]	+  [168618-42-6]		69%
5e	 [2225171-22-0]	+  [168618-42-6]		70%

[0248]

[0249] f) 그리화



[0250]

[0251]

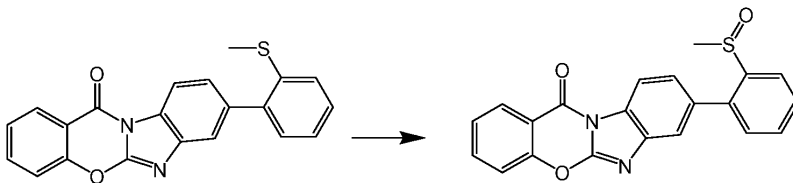
63 g (166 mmol)의 3-브로모바이페닐을 초기에 -78°C 의 THF 700 ml에 투입한다. 이 온도에서, 70 ml의 BuLi (헥산 중 2.5 M)를 적가한다. 1시간 후, 200 ml의 THF 중 99 g (166 mmol)의 메틸-(12-옥소벤즈이미다졸로[2,1-b][1,3]벤즈옥사진-8-일벤조에이트를 적가한다. 혼합물을 실온에서 밤새 교반되게 두고, 빙수에 첨가하고, 디클로로메탄으로 추출한다. 조합된 유기 상을 물로 세척하고, 황산 나트륨 상에서 건조한다. 용매를 감압하에 제거하고 잔류물을 추가 정제 없이 90ml의 HCl 및 1 l의 AcOH로 75°C 에서 밤새 가열한다. 냉각 후, 침전된 고체를 흡인 여과하고, 150 ml의 물로 2회 그리고 매회 150 ml의 에탄올로 3회 세척하고, 최종적으로 헵탄으로부터 재결정화시킨다. 잔류물을 톨루엔으로 고온 추출하고, 톨루엔으로부터 재결정화하고, 마지막으로 고진공하에서 승화시킨다. 수율: 96 g (60 mmol)의 f1 및 f2, 87%. 톨루엔/EA(2:1)로부터 재결정화한 후, HPLC에 의해 약 99.9%의 순도로 51% e1 및 18% e2가 수득된다.

[0252] 하기 화합물들을 유사하게 제조할 수 있다:

	반응물 1	반응물 2	생성물 1	생성물 2	수율
1f					53%/ 17%
2f					52%/ 17%
3f					46%/ 14%
4f					51%/ 15%

[0253]

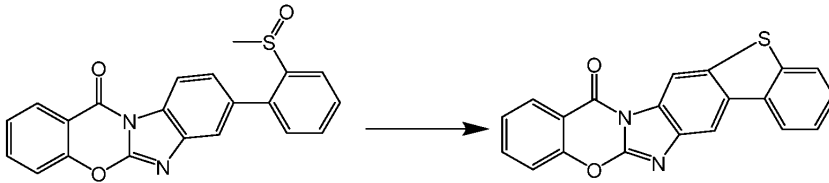
[0254] g) 8-(2-메틸설파닐페닐)벤즈이미다졸로[2,1-b][1,3]벤즈옥사진-12-온



[0255]

[0256] 보호 가스 하에서, 1.1 l의 빙초산 및 125 ml의 디클로로메탄 중 8-(2-메틸설파닐페닐)벤즈이미다졸로[2,1-b][1,3]벤즈옥사진-12-온 107 g (300 mmol)을 초기에 투입하고 그 혼합물을 0 °C로 냉각시킨다. 이 용액에 500 ml (309 mmol)의 30% H₂O₂ 용액을 적가하고, 혼합물을 밤새 교반한다. 혼합물을 Na₂SO₃ 용액과 혼합하고, 상을 분리하고, 용매를 감압 하에 제거한다. 수율: 95 g (255 mmol), 이론치의 85%; 순도: HPLC에 의한 92%.

[0257] h) 고리화



[0258]

[0259] 8-(2-메틸설피닐페닐)벤즈이미다졸로[2,1-b][1,3]벤즈옥사진-12-온 112 g (275 mmol) 및 트리플루오로메탄설펜 산 737 ml (8329 mol) 의 혼합물을 5 °C에서 48 시간 동안 교반하였다. 이어서, 혼합물을 2.4 l 의 물/피리딘 5 : 1과 혼합하고 20 분 동안 환류하에 가열하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 500 ml 의 물 및 1000 ml의 디클로로메탄을 신중하게 첨가하였다. 유기 상을 4 x 50 ml 의 H₂O 로 세척하고, MgSO₄ 로 건조시키고, 용매를 감압 하에 제거한다. 순수한 생성물을 재결정화에 의해 수득한다. 수율: 81 g (240 mmol), 이론치의 80%; 순도: HPLC 에 의한 96%.

[0260] OLED 의 제조

[0261] 이하의 실시예 E1 내지 E14 (표 1 참조) 는 OLED 에서의 본 발명의 재료의 사용을 제시한다.

[0262] 예 E1 내지 E14 를 위한 전처리: 두께 50nm의 구조화된 ITO (indium tin oxide) 로 코팅된 유리 판을 산소 플라즈마로, 다음으로 아르곤 플라즈마로, 코팅 전에, 처리한다. 이들 플라즈마 처리된 유리 플레이트는, OLED들이 적용되는 기관들을 형성한다.

[0263] OLED 는 기본적으로 다음의 층 구조를 갖는다: 기관/정공 주입 층 (HIL)/정공 수송 층 (HTL) / 전자 차단 층 (EBL) / 방출 층 (EML) / 선택적인 정공 차단 층 (HBL) / 전자 수송 층 (ETL) / 선택적인 전자 주입 층 (EIL) 및 최종적으로 캐소드. 캐소드는 두께 100 nm 의 알루미늄 층에 의해 형성된다. OLED 의 정확한 구조는 표 1 에서 확인할 수 있다. OLED 의 제조에 필요한 재료를 표 2 에 나타낸다.

[0264] 모든 재료는 진공 챔버에서 열 증착에 의해 적용된다. 이러한 경우, 방출층은 항상, 적어도 하나의 매트릭스 재료 (호스트 재료) 및 공증발에 의해 특정 부피 비율로 매트릭스 재료(들)에 첨가되는 방출 도펀트 (방출체)로 이루어진다. EG1:IC2:TEG1 (49%:44%:7%) 와 같은 형태에서 제시되는 상체는 여기서, 재료 EG1 가 49% 의 부피 비율로, IC2 이 44% 의 부피 비율로, 그리고 TEG1 가 7% 의 부피 비율로 층에 존재한다는 것을 의미한다. 유사하게, 전자 수송 층은 또한 2개의 재료들의 혼합물로 이루어질 수도 있다.

[0265] OLED는 표준 방식으로 특성화된다. 이 목적으로, 전계 발광 스펙트럼, 전류 효율 (CE, cd/A 로 측정됨) 및 외부 양자 효율 (EQE, % 로 측정됨) 이, Lambertian 방출 특성을 가정하여 전류-전압-휘도 특성으로부터 계산된, 휘도의 함수로서 결정된다. 전계 발광 스펙트럼은 휘도 1000 cd/m² 에서 측정되고 이를 이용하여 CIE 1931 x 및 y 색 좌표가 계산된다. 이에 따라 수득된 결과는 표 3 에서 찾아볼 수 있다.

[0266] OLED 에서의 본 발명의 재료의 용도

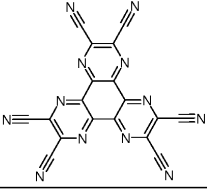
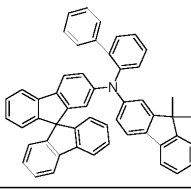
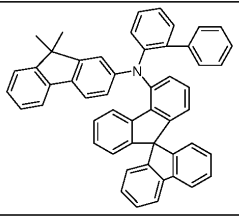
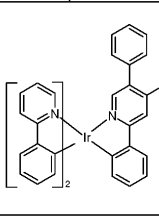
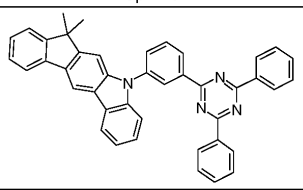
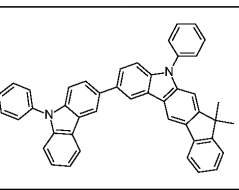
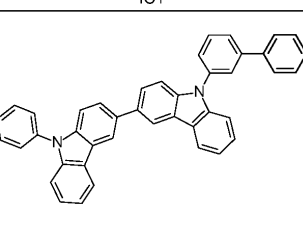
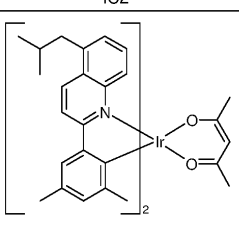
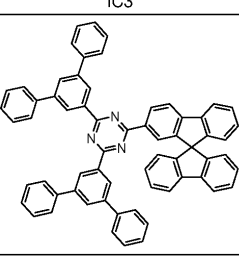
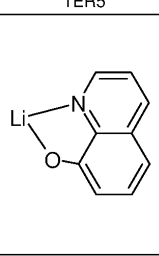
[0267] 본 발명 화합물들 EG1 내지 EG8 및 EG11 은 인광 녹색 OLED 의 방출층에서 매트릭스 재료로서 예 E1 내지 E9 및 E12 내지 E13 에서 사용된다. 본 발명 화합물 EG9 내지 EG10 은 인광 적색 OLED 의 방출층에서 매트릭스 재료로서 예 E10 내지 E11 에서 사용될 수 있다. 본 발명 화합물 EG5 은 인광 녹색 OLED 의 ETM 층에서 전자 수송으로서 예 E14 에서 사용될 수 있다.

[0268] 표 1: OLED 의 구조

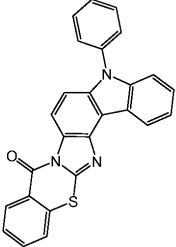
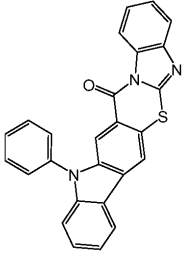
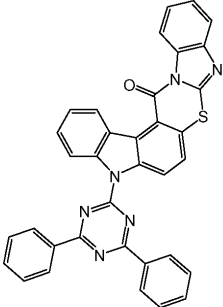
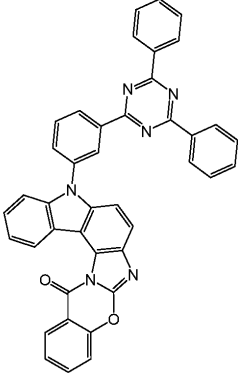
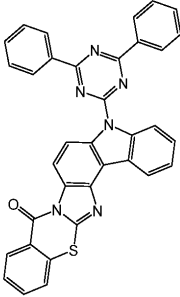
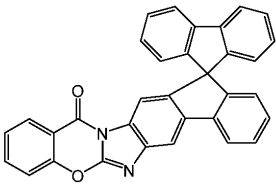
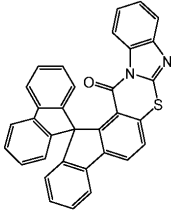
Ex.	HIL 두께	HTL 두께	EBL 두께	EML 두께	HBL 두께	ETL 두께	EIL 두께
E1	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG1:IC2:TEG1 (49%:44%:7%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E2	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG2:IC2:TEG1 (49%:44%:7%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E3	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG3:IC3:TEG1 (49%:44%:7%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E4	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG4:IC3:TEG1 (49%:44%:7%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E5	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG5:IC3:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E6	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG6: IC3:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E7	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG7: IC3:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E8	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG8: IC3:TEG1 (46%:47%:7%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E9	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG8: IC3:TEG1 (46%:47%:7%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E10	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA2 10nm	EG9:TER5 (97%:3%) 35nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E11	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA2 10nm	EG10:TER5 (97%:3%) 35nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E12	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	IC1: EG11:TEG1 (46%:47%:7%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E13	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG4:TEG1 (49%:44%:7%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E14	HATCN 5nm	SpMA1 70nm	SpMA2 15nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 25nm	---	EG5 45nm	LiQ 3nm

[0269]

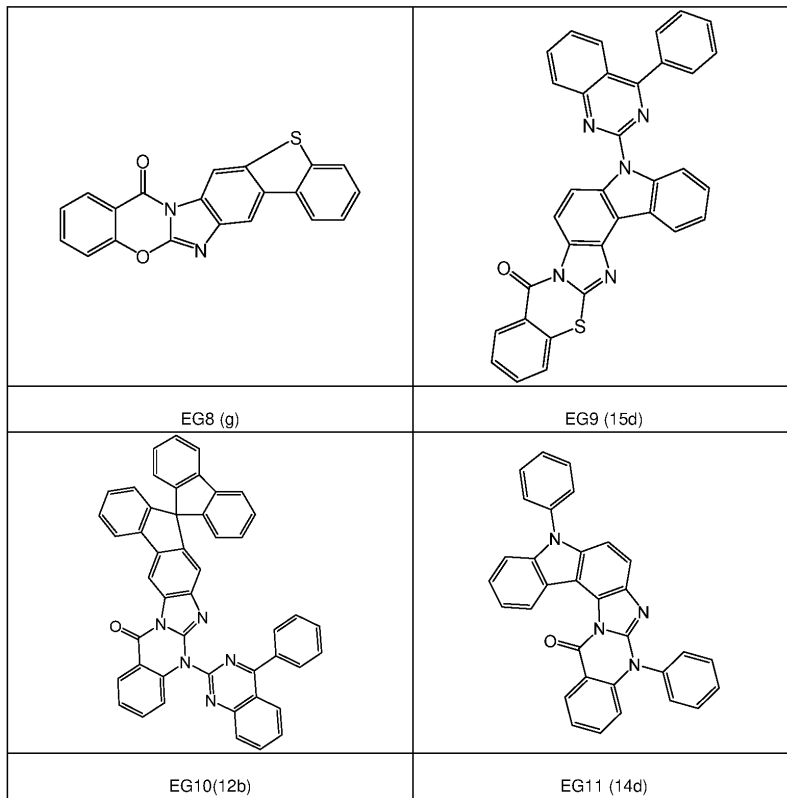
[0270] 표 2: OLED 용 재료의 구조식

	
<p>HATCN</p>	<p>SpMA1</p>
	
<p>SpMA3</p>	<p>TEG1</p>
	
<p>IC1</p>	<p>IC2</p>
	
<p>IC3</p>	<p>TER5</p>
	
<p>ST2</p>	<p>LiQ</p>

[0271]

	
	<p>EG1 (1d)</p>
	
<p>EG2 (4b)</p>	<p>EG3 (10d)</p>
	
<p>EG4 (11d)</p>	<p>EG5 (12d)</p>
	
<p>EG6 (f(1))</p>	<p>EG7 (4f)</p>

[0272]



[0273]

[0274]

표 3: OLED의 데이터

Ex.	U1000 (V)	SE1000 (cd/A)	EQE 1000 (%)	1000 cd/m ² 에서의 CIE x/y
E1	3.4	65	16.2	0.35/0.61
E2	3.4	66	17.3	0.33/0.62
E3	3.3	64	18.1	0.35/0.61
E4	3.0	69	18.2	0.35/0.62
E5	3.0	72	18.4	0.33/0.63
E6	3.3	70	17.7	0.33/0.62
E7	3.3	62	17.6	0.32/0.64
E8	3.2	73	18.0	0.32/0.63
E9	3.1	71	17.3	0.33/0.62
E10	3.9	24	20	0.66/0.34
E11	3.6	22	22	0.65/0.33
E12	3.5	80	16	0.35/0.61
E13	3.4	75	17	0.35/0.61
E14	3.6	63	16.9	0.33/0.62

[0275]