(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2024년12월09일
(11) 등록번호 10-2740106
(24) 등록일자 2024년12월04일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 307/91 (2006.01) *C07D 405/04* (2006.01)
C07D 405/12 (2006.01) *C07D 405/14* (2006.01)
C07D 409/04 (2006.01) *C07D 409/14* (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01) *H10K 50/12* (2023.01)
H10K 50/15 (2023.01) *H10K 50/18* (2023.01)
H10K 85/60 (2023.01)
(52) CPC특허분류
C07D 307/91 (2013.01)
C07D 405/04 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2024-7000874(분할)
(22) 출원일자(국제) 2017년02월06일
심사청구일자 2024년01월09일
(85) 번역문제출일자 2024년01월09일
(65) 공개번호 10-2024-0011864
(43) 공개일자 2024년01월26일
(62) 원출원 특허 10-2022-7000517
원출원일자(국제) 2017년02월06일
심사청구일자 2022년02월04일
(86) 국제출원번호 PCT/EP2017/000154
(87) 국제공개번호 WO 2017/148564
국제공개일자 2017년09월08일
(30) 우선권주장
16158460.2 2016년03월03일
유럽특허청(EPO)(EP)
16159829.7 2016년03월11일
유럽특허청(EPO)(EP)
(56) 선행기술조사문헌
KR101535606 B1*
(뒷면에 계속)
전체 청구항 수 : 총 11 항

(73) 특허권자
메르크 파텐트 게엠베하
독일 64293 다름스타트 프랑크푸르터 스트라세 250
(72) 발명자
파르함 아미르 호싸인
독일 60486 프랑크푸르트 암 마인 뢰미셔 링 26
에베를레 토마스
독일 76829 란다우 빌리-브란트-슈트라쎄 6
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인코리아나

심사관 : 이현준

(54) 발명의 명칭 **유기 전계 발광 장치용 재료**

(57) 요 약

본 발명은 특히 유기 전계 발광 장치에서 삼중 매트릭스 재료로서 사용하기 위한 디벤조퓨란, 디벤조티오펜 및 플루오렌기를 갖는 아민에 관한 것이다. 본 발명은 또한 본 발명의 화합물을 제조하는 방법 및 이를 포함하는 전자 장치에 관한 것이다.

(52) CPC특허분류
C07D 405/12 (2013.01)
C07D 405/14 (2013.01)
C07D 409/04 (2013.01)
C07D 409/14 (2013.01)
H10K 85/626 (2023.02)
H10K 85/633 (2023.02)
H10K 85/636 (2023.02)
H10K 85/6572 (2023.02)
H10K 85/6574 (2023.02)

(72) 발명자
야치 안야
독일 60489 프랑크푸르트 암 마인 하트슈타이너 슈트라쎄 12
그로쓰만 토비아스
독일 64297 다름슈타트 로이터알레 71
크뢰버 요나스 팔렌틴
독일 60311 프랑크푸르트 파르가쎄 4
몬테네그로 엘비라
독일 69469 바인하임 호라츠벡 5
베른 카롤리네
독일 64293 다름슈타트 칼러트슈트라쎄 28

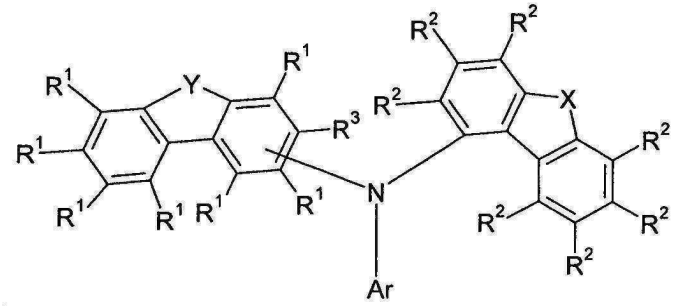
(56) 선행기술조사문헌
KR1020140103697 A*
KR1020160021424 A*
KR1020160059602 A*
KR1020160059609 A*
KR1020160121946 A*
KR1020170022438 A*
KR1020170095754 A*
KR1020170095755 A*
KR1020170095756 A*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

명 세 서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 (1)의 화합물:



화학식 (1)

(식 중, 사용된 기호는 하기와 같음:

X는 S이고;

Y는 O, S 또는 CR_2이고;

Ar은 6 내지 12 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 또는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템이며, 이들 각각은 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수 있고, 여기에서 Ar은 어떠한 카바졸릴기나 9,9'-스피로비플루오렌기를 갖지 않고;

R은 각각의 경우 동일하거나 상이하며 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: H, D, F, CN, $N(Ar^1)_2$, 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직선 사슬 알킬기 또는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬기 (여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D 로 대체될 수 있음), 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 가지고 각각의 경우 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 고리 시스템;

R^1은 각각의 경우 동일하거나 상이하고 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: H, D, F, CN, $N(Ar^1)_2$, 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직선 사슬 알킬기 또는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬기(여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D 로 대체될 수 있음), 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 가지고 각각의 경우 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 고리 시스템;

R^2는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: H, D, F, CN, $N(Ar^1)_2$, 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직선 사슬 알킬기 또는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬기(여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D 로 대체될 수 있음), 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 가지고 각각의 경우 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 여기에서 R^2는 N-카바졸릴 기를 포함하지 않음;

R^3는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: H, D, F, CN, $N(Ar^1)_2$, 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직선 사슬 알킬기 또는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬기(여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D 로 대체될 수 있음), 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 가지고 각각의 경우 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 고리 시스템;

Ar^1은 각각의 경우 동일하거나 상이하며 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 비방향족 R^4 라

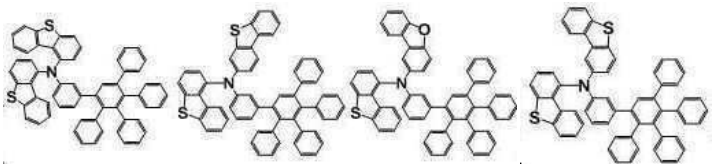
디칼로 치환될 수 있는 방향족 고리 시스템이고;

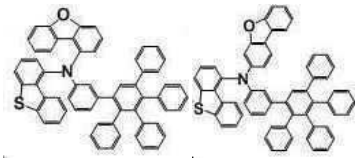
R^4는 각각의 경우 동일하거나 상이하며 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: H, D, F, CN, 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직선 사슬 알킬기 또는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬기 (여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D 로 대체될 수 있음), 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지고 각각의 경우 하나 이상의 R^5 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 고리 시스템; 동시에, 동일한 탄소 원자에 결합된 두 개의 R^4 치환기가 하나 이상의 R^5 라디칼로 치환될 수 있는 단일 고리형 또는 다중 고리형, 지방족 또는 방향족 고리 시스템 형성을 가능하게 함;

R^5는 각각의 경우 동일하거나 상이하며 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드로카빌 라디칼, 또는 하나 이상의 수소 원자가 D 로 대체될 수 있는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템;

하나의 경우, R^1 또는 R^3 대신에 질소 원자가 상응하는 탄소 원자에 결합되며, R^3의 경우 Y는 CR_2가 될 수 없고,

하기 화합물들은 본 발명으로부터 제외됨:





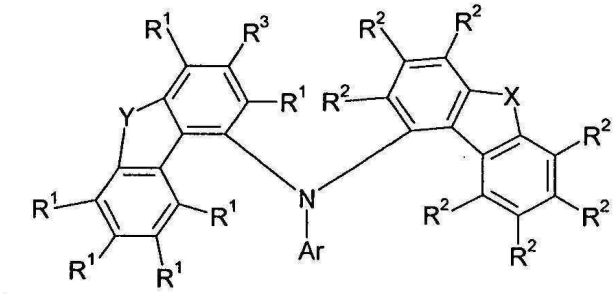
).

청구항 2

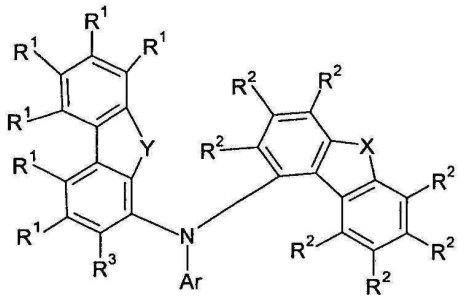
제 1 항에 있어서, Y가 CR_2인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 3

제 1 항에 있어서, 하기 화학식 (1-1) 또는 화학식 (1-2)의 화합물인 것을 특징으로 하는 화합물:



화학식 (1-1)

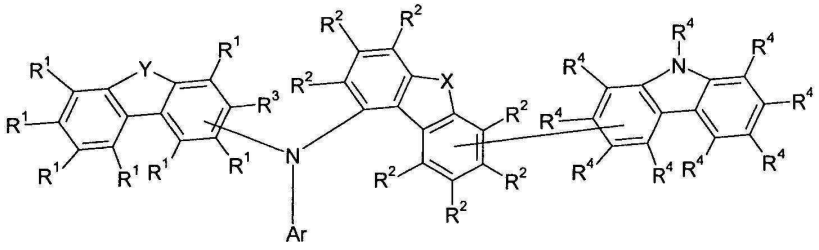


화학식 (1-2)

(식 중, 기호는 제 1 항에서 제시된 정의를 가짐).

청구항 4

제 1 항에 있어서, 하기 화학식 (2)의 화합물인 것을 특징으로 하는 화합물:

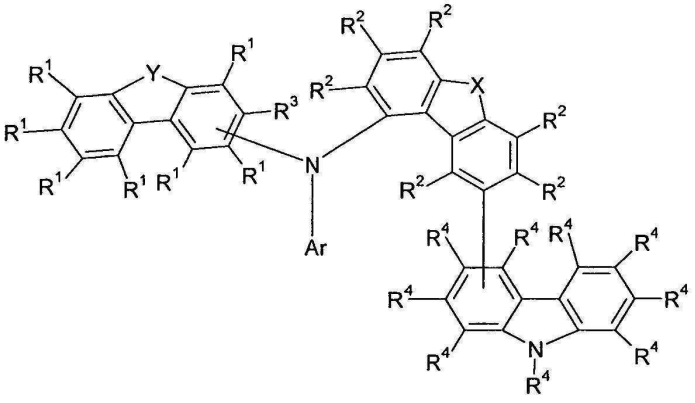


화학식 (2)

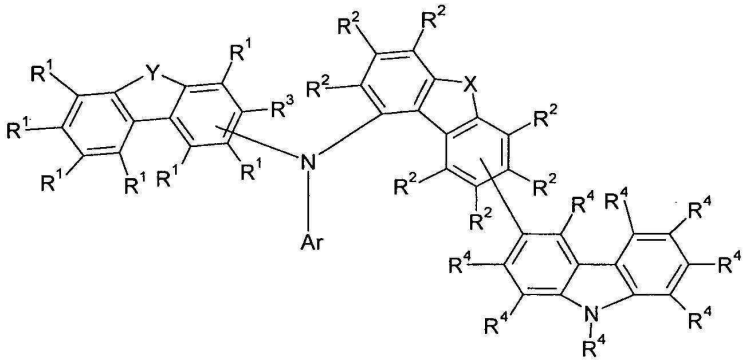
(식 중, 기호는 제 1 항에서 제시된 정의를 가지고, 하나의 R^2 및 탄소 원자에 결합된 하나의 R^4 는 단일 결합으로 대체됨).

청구항 5

제 1 항에 있어서, 하기 화학식 (2-1) 및 (2-2) 중 하나의 화합물인 것을 특징으로 하는 화합물:



화학식 (2-1)



화학식 (2-2)

(식 중, 기호는 제 1 항에서 제시된 정의를 가지고, 화학식 (2-1) 에서 하나의 R^2 및 화학식 (2-2) 에서 탄소 원자에 결합된 하나의 R^4는 단일 결합으로 대체됨).

청구항 6

제 5 항에 있어서, 화학식 (2-2)에서, 단일 결합으로 대체된 R^2 가 질소 원자에 결합된 6 원 고리 상에 배열되지 않는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 7

추가 화합물 및 용매로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상 및 제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 따른 화합물을 포함하는 혼합물.

청구항 8

제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 있어서, 전자 장치에서 사용되는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 9

제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 따른 화합물을 포함하는 전자 장치.

청구항 10

제 9 항에 있어서, 유기 전계 발광 장치인 것을 특징으로 하는 전자 장치.

청구항 11

제 10 항에 있어서, 화합물이 발광층에서, 또는 발광층에서 인광 도펀트 및 임의의 하나 이상의 추가의 매트릭스 재료와 조합으로, 또는 정공 수송층 또는 전자 차단층에서 사용되는 것을 특징으로 하는 전자 장치.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본 발명은 특히 유기 전계 발광 장치에서 삼중 매트릭스 재료로서 사용하기 위한 디벤조퓨란, 디벤조티오펜 및 플루오렌기를 갖는 아민에 관해 기술한다. 본 발명은 또한 본 발명의 화합물의 제조 방법 및 이들 화합물을 포함하는 전자 장치에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] 유기 반도체가 기능성 재료로서 사용되는 유기 전계 발광 장치 (OLED)의 구조는 예를 들어 US 4539507, US 5151629, EP 0676461 및 WO 98/27136에 기술되어 있다. 사용되는 방출 재료는 종종 인광을 나타내는 유기 금속 착물이다. 양자 역학적인 이유로, 인광 발광체로 유기 금속 화합물을 사용하면 최대 4 배의 에너지 효

율과 전력 효율이 가능하다. 일반적으로, OLED에서, 특히 효율, 작동 전압 및 수명과 관련하여 인광을 나타내는 OLED에서의 개선이 여전히 필요하다.

[0003] 인광성 OLED의 특성은 사용되는 삼중 방출기에 의해서만 결정되는 것은 아니다. 더욱 구체적으로, 사용되는 다른 재료, 예를 들어 매트릭스 재료도 여기에서 특히 중요하다. 따라서 이러한 재료의 개선은 OLED 특성의 뚜렷한 향상을 가져올 수 있다.

[0004] 선행 기술에 따르면, 플루오렌 및 디벤조퓨란기를 갖는 아민은 US 2014/0284578에 공지되어 있다. 카바졸을 갖는 화합물은 또한 EP 2421064에 공지되어 있다. US 2013/0234118은 융합된 방향족기, 예컨대 피렌을 갖는 아민을 개시한다.

[0005] 일반적으로, 매트릭스 재료로서 사용하기 위한 이들 재료의 경우, 특히 수명 및 산화 민감도 관련뿐만 아니라, 장치의 효율 및 작동 전압과 관련하여서도 여전히 개선이 필요하다.

발명의 내용

해결하려는 과제

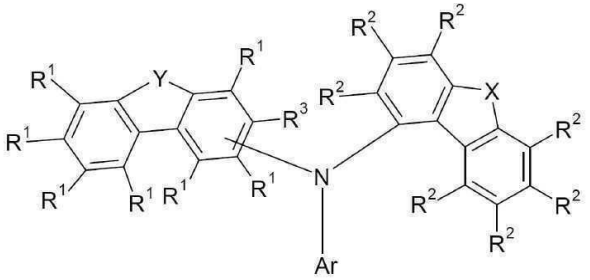
[0006] 본 발명의 목적은 인광 또는 형광 OLED, 특히 매트릭스 재료로서 사용하기에 적합한 화합물을 제공하는 것이다.

더욱 구체적으로, 본 발명의 목적은 적색, 황색 및 녹색 인광 OLED에 적합하고 가능하게는 청색 인광 OLED에 적합하며, 긴 수명, 양호한 효율 및 낮은 작동 전압을 유도하는 매트릭스 재료를 제공하는 것이다. 특히, 매트릭스 재료의 특성은 유기 전계 발광 장치의 수명 및 효율에 본질적인 영향을 미친다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0007] 놀랍게도, 하기 화학식 (1)의 화합물을 함유하는 전계 발광 장치는 특히 인광 도펀트용 매트릭스 재료로서 사용되는 경우, 종래 기술에 비해 개선이 발견되었다.

[0008] 따라서, 본 발명은 하기 화학식 (1)의 화합물을 제공한다:



[0009]

[0010] 화학식 (1)

[0011] 여기에서, 사용된 기호는 하기와 같다;

[0012] X는 O 또는 S이고;

[0013] Y는 O, S 또는 CR_2이고;

[0014] Ar은 각각의 경우 동일하거나 상이하며 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이며, 여기에서 Ar은 15 개 이하의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴기 또는 헤테로아릴기만을 포함하고, 헤테로아릴기로서 카바졸릴기가 없고, 9,9'-스피로비플루오렌기가 없고;

[0015] R은 각각의 경우 동일하거나 상이하며 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO_2, $N(Ar^1)_2$, $N(R^4)_2$, $C(=O)Ar^1$, $C(=O)R^4$, $P(=O)(Ar^1)_2$, $P(Ar^1)_2$, $B(Ar^1)_2$, 각각이 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직선 사슬 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐기 (여기에서 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 $R^4C=CR^4$, C=O, C=S, $C=NR^4$, $P(=O)(R^4)$, SO, SO_2, NR^4, O, S 또는 $CONR^4$

로 대체될 수 있고 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2로 대체될 수 있음), 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지고 각각의 경우 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 아랄킬 또는 헤테로아랄킬기; 동시에, 동일한 탄소 원자 또는 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의 R 치환기가 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 단일 고리형 또는 다중 고리형, 지방족 고리 시스템 형성을 가능하게 함;

[0016] R^1은 각각의 경우 동일하거나 상이하고 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO_2, $N(Ar^1)_2$, $N(R^4)_2$, $C(=O)Ar^1$, $C(=O)R^4$, $P(=O)(Ar^1)_2$, $P(Ar^1)_2$, $B(Ar^1)_2$, 각각이 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직선 사슬 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐기 (여기에서 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 $R^4C=CR^4$, C=O, C=S, $C=NR^4$, $P(=O)(R^4)$, SO, SO_2, NR^4, O, S 또는 $CONR^4$로 대체될 수 있고 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2로 대체될 수 있음), 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지고 각각의 경우 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 아랄킬 또는 헤테로아랄킬기; 동시에, 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의 R^1 치환기 또는 두 개의 R^1 및 R^3 치환기가 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 단일 고리형 또는 다중 고리형, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 형성을 가능하게 함;

[0017] R^2는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO_2, $N(Ar^1)_2$, $N(R^4)_2$, $C(=O)Ar^1$, $C(=O)R^4$, $P(=O)(Ar^1)_2$, $P(Ar^1)_2$, $B(Ar^1)_2$, 각각이 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직선 사슬 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐기 (여기에서 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 $R^4C=CR^4$, C=O, C=S, $C=NR^4$, $P(=O)(R^4)$, SO, SO_2, NR^4, O, S 또는 $CONR^4$로 대체될 수 있고 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2로 대체될 수 있음), 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지고 각각의 경우 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 아랄킬 또는 헤테로아랄킬기; 동시에, 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의 R^2 치환기가 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 단일 고리형 또는 다중 고리형, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 형성을 가능하게 함;

[0018] R^3는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO_2, $N(Ar^1)_2$, $N(R^4)_2$, $C(=O)Ar^1$, $C(=O)R^4$, $P(=O)(Ar^1)_2$, $P(Ar^1)_2$, $B(Ar^1)_2$, 각각이 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직선 사슬 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐기 (여기에서 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 $R^4C=CR^4$, C=O, C=S, $C=NR^4$, $P(=O)(R^4)$, SO, SO_2, NR^4, O, S 또는 $CONR^4$로 대체될 수 있고 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2로 대체될 수 있음), 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지고 각각의 경우 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고

리 시스템, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 아랄킬 또는 헤테로아랄킬기; 동시에, 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의 R^3 및 R^1 치환기가 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 단일 고리형 또는 다중 고리형, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 형성을 가능하게 함;

[0019] Ar^1은 각각의 경우 동일하거나 상이하며 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 비방향족 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이며; 동시에 동일한 인 원자 또는 붕소 원자에 결합된 두 개의 Ar^1 라디칼은 또한 단일 결합 또는 $N(R^4)$, $C(R^4)_2$, O 및 S로부터 선택된 가교에 의해 서로 가교될 수 있고;

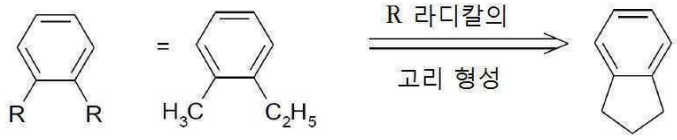
[0020] R^4는 각각의 경우 동일하거나 상이하며 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO_2, $N(R^5)_2$, $C(=O)R^5$, 각각이 하나 이상의 R^5 라디칼로 치환될 수 있는 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직선 사슬 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐기(여기에서 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 $R^5C=CR^5$, C=O, C=S, $C=NR^5$, $P(=O)(R^5)$, SO, SO_2, NR^5, O, S 또는 $CONR^5$ 로 대체될 수 있고 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2로 대체될 수 있음), 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지고 각각의 경우 하나 이상의 R^5 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R^5 라디칼로 치환될 수 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R^5 라디칼로 치환될 수 있는 아랄킬 또는 헤테로아랄킬기; 동시에, 동일한 탄소 원자 또는 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의 R^4 치환기가 하나 이상의 R^5 라디칼로 치환될 수 있는 단일 고리형 또는 다중 고리형, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 형성을 가능하게 함;

[0021] R^5는 각각의 경우 동일하거나 상이하며 하기로 이루어진 군으로부터 선택되고: H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드로카빌 라디칼, 또는 하나 이상의 수소 원자가 D, F, Cl, Br, I 또는 CN으로 대체될 수 있고 1 내지 4 개의 탄소 원자를 각각 갖는 하나 이상의 알킬기로 치환될 수 있는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템; 동시에 두 개 이상의 인접한 R^5 치환기가 함께 단일- 또는 다중 고리형, 지방족 고리 시스템 형성을 가능하게 함;

[0022] 여기에서, 하나의 경우, R^1 또는 R^3 대신에 질소 원자가 상응하는 탄소 원자에 결합되며, 여기에서 R^3의 경우 Y는 CR_2가 아니다.

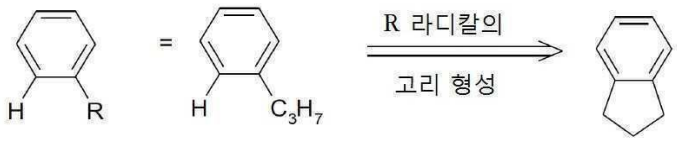
[0023] 본 발명의 문맥에서 인접한 탄소 원자는 서로 직접 결합된 탄소 원자이다.

[0024] 본 명세서의 문맥에서, 두 개 이상의 라디칼이 함께 고리를 형성할 수 있다는 문구는 두 개의 라디칼이 두 개의 수소 원자의 공식적 제거를 통해 화학 결합에 의해 서로 결합되어 있음을 의미하는 것으로 이해된다. 이것은 하기 도식으로 예시된다:



[0025]

[0026] 또한, 상기 언급된 문구는 두 개의 라디칼 중 하나가 수소인 경우, 제 2 라디칼이 수소 원자가 결합된 위치에 결합하여 고리를 형성함을 의미하는 것으로 이해해야 한다. 이것은 하기 도식으로 예시된다:



[0027]

[0028] 본 발명의 문맥에서 융합된 아릴기는 두 개 이상의 방향족기가, 예를 들어 나프탈렌과 같이, 공통 모서리를 따라 서로 융합, 즉 아닐화되는 (annellated) 기이다. 대조적으로, 예를 들어, 플루오렌의 두 개의 방향족기가 공통 모서리를 갖지 않기 때문에, 플루오렌은 본 발명과 관련하여 융합된 아릴기가 아니다.

[0029] 본 발명의 문맥에서 아릴기는 6 내지 40 개의 탄소 원자를 함유한다; 본 발명의 문맥에서 헤테로아릴기는 2 내지 40 개의 탄소 원자 및 적어도 하나의 헤테로 원자를 함유하지만, 탄소 원자 및 헤테로 원자의 총합은 적어도 5 이다. 헤테로 원자는 바람직하게는 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 여기에서 아릴기 또는 헤테로아릴기는 단순한 방향족 고리, 즉 벤젠, 또는 단순한 헤테로방향족 고리, 예를 들어 피리딘, 피리미딘, 티오펜 등, 또는 융합된 아릴 또는 헤테로아릴기, 예를 들어 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 퀴놀린, 이소퀴놀린 등을 의미하는 것으로 이해되어야 한다.

[0030] 본 발명의 문맥에서 방향족 고리 시스템은 고리 시스템 내에 6 내지 40 개의 탄소 원자를 함유한다. 본 발명의 문맥에서 헤테로방향족 고리 시스템은 고리 시스템 내에 1 내지 40 개의 탄소 원자 및 적어도 하나의 헤테로 원자를 함유하지만, 탄소 원자 및 헤테로 원자의 총합은 적어도 5 이다. 헤테로 원자는 바람직하게는 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 본 발명의 문맥에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 반드시 아릴 또는 헤테로아릴기만을 함유하지는 않지만 두 개 이상의 아릴 또는 헤테로아릴기가 비방향족 단위(바람직하게는 H 이외의 원자가 10 % 미만), 예를 들어 탄소, 질소 또는 산소 원자 또는 카르보닐기에 의해 차단될 수도 있는 시스템을 의미할 것이다. 예를 들어, 시스템, 예컨대 9,9'-스피로비플루오렌, 9,9-디아릴플루오렌, 트리아릴아민, 디아릴 에테르, 스틸벤 등도 또한 본 발명의 문맥에서 방향족 고리 시스템으로서, 마찬가지로 두 개 이상의 아릴기는, 예를 들어 선형 또는 고리형 알킬기 또는 실릴기에 의해 차단되는 시스템으로서 간주되어야 할 것이다. 또한, 두 개 이상의 아릴 또는 헤테로아릴기가 서로 직접 결합된 시스템, 예를 들어, 비페닐, 터페닐, 쿼터페닐 또는 비피리딘은 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 간주되어야 한다.

[0031] 본 발명의 문맥에서 고리형 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시기는 단일 고리형, 이중 고리형 또는 다중 고리형 기를 의미하는 것으로 이해된다.

[0032] 본 발명의 문맥에서, 개개의 수소 원자 또는 CH_2 기가 또한 상기 언급된 기로 치환될 수 있는 C_1- 내지 C_{20}- 알킬기는 예를 들어, 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, 시클로프로필, n-부틸, i-부틸, s-부틸, t-부틸, 시클로부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, s-펜틸, t-펜틸, 2-펜틸, 네오펜틸, 시클로펜틸, n-헥실, s-헥실, t-헥실, 2-헥실, 3-헥실, 네오헥실, 시클로헥실, 1-메틸시클로펜틸, 2-메틸펜틸, n-헵틸, 2-헵틸, 3-헵틸, 4-헵틸, 시클로헵틸, 1-메틸시클로헥실, n-옥틸, 2-에틸헥실, 시클로옥틸, 1-비시클로[2.2.2]옥틸, 2-비시클로[2.2.2]옥틸, 2-(2,6-디메틸)옥틸, 3-(3,7-디메틸)옥틸, 아다만틸, 트리플루오로메틸, 펜타플루오로에틸, 2,2,2-트리플루오로에틸, 1,1-디메틸-n-헥스-1-일, 1,1-디메틸-n-헵트-1-일, 1,1-디메틸-n-옥트-1-일, 1,1-디메틸-n-데크-1-일, 1,1-디메틸-n-도데크-1-일, 1,1-디메틸-n-테트라데크-1-일, 1,1-디메틸-n-헥사데크-1-일, 1,1-디메틸-n-옥타데크-1-일, 1,1-디에틸-n-헥스-1-일, 1,1-디에틸-n-헵트-1-일, 1,1-디에틸-n-옥트-1-일, 1,1-디에틸-n-데크-1-일, 1,1-디에틸-n-도데크-1-일, 1,1-디에틸-n-테트라데크-1-일, 1,1-디에틸-n-헥사데크-1-일, 1,1-디에틸-n-옥타데크-1-일, 1-(n-프로필)시클로헥스-1-일, 1-(n-부틸)시클로헥스-1-일, 1-(n-헥실)시클로헥스-1-일, 1-(n-옥틸)시클로헥스-1-일 및 1-(n-데실)시클로헥스-1-일 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다.
알케닐기는, 예를 들어, 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 시클로펜테닐, 헥세닐, 시클로헥세닐, 헵테닐, 시클로헵테닐, 옥테닐, 시클로옥테닐 또는 시클로옥타디에닐을 의미하는 것으로 이해된다. 알키닐기는, 예를 들어, 에티닐, 프로피닐, 부티닐, 펜티닐, 헥시닐, 헵티닐 또는 옥티닐을 의미하는 것으로 이해된다. C_1- 내지 C_{40}- 알콕시기는, 예를 들어, 메톡시, 트리플루오로메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, s-부톡시, t-부톡시 또는 2-메틸부톡시를 의미하는 것으로 이해된다.

[0033] 5-40 개의 방향족 고리 원자를 가지며 각각의 경우 상기 언급된 라디칼에 의해 치환될 수 있고 임의의 바람직한 위치를 통해 방향족 또는 헤테로방향족 시스템에 결합될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 예를 들어, 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센, 페난트렌, 벤조페난트렌, 피렌, 크리센, 페릴렌, 플루오란텐, 벤조플루오란텐, 나프타센, 펜타센, 벤조피렌, 비페닐, 비페닐렌, 터페닐, 터페닐렌, 플루오렌, 스피로비플루오

렌, 디히드로페난트렌, 디히드로피렌, 테트라히드로피렌, 시스- 또는 트랜스-인데노플루오렌, 시스- 또는 트랜스-모노벤조인데노플루오렌, 시스- 또는 트랜스-디벤조인데노플루오렌, 트룩센, 이소트룩센, 스피로트룩센, 스피로이소트룩센, 퓨란, 벤조퓨란, 이소벤조퓨란, 디벤조퓨란, 티오펜, 벤조티오펜, 이소벤조티오펜, 디벤조티오펜, 피롤, 인돌, 이소인돌, 카바졸, 인돌로카바졸, 인데노카바졸, 피리딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 아크리딘, 페난트리딘, 벤조-5,6-퀴놀린, 벤조-6,7-퀴놀린, 벤조-7,8-퀴놀린, 페노티아진, 페녹사진, 피라졸, 인다졸, 이미다졸, 벤즈이미다졸, 나프트이미다졸, 페난트리미다졸, 피리미디아졸, 피라진이미다졸, 퀴녹살린이미다졸, 옥사졸, 벤즈옥사졸, 나프톡사졸, 안트록사졸, 페난트록사졸, 이속사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴녹살린, 2,5-디아자안트라센, 2,7-디아자피렌, 2,3-디아자피렌, 1,6-디아자피렌, 1,8-디아자피렌, 4,5-디아자피렌, 4,5,9,10-테트라아자피렌, 피라진, 페나진, 페녹사진, 페노티아진, 플루오루빈, 나프티리딘, 아자카바졸, 벤조카볼린, 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 벤조티아디아졸을 의미하는 것으로 이해된다.

[0034] 바람직하게는, 화학식 (1)에 있어서, Y가 CR_2 인 경우, 질소 원자는 R^1 대신에 상응하는 탄소 원자에 결합되고; Y가 O 또는 S 인 경우, 질소 원자는 R^1 또는 R^3 대신에 상응하는 탄소 원자에 결합된다.

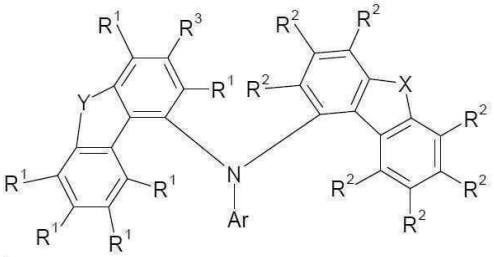
[0035] 바람직한 구현예에서, X는 O이다.

[0036] 추가의 바람직한 구현예에서, Y는 CR_2이다.

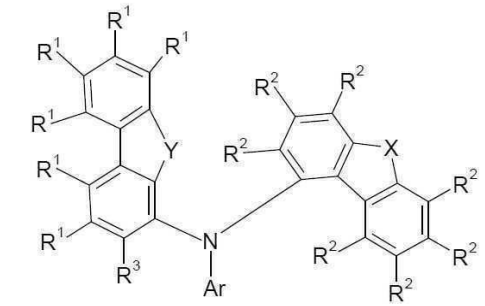
[0037] 추가의 바람직한 구현예에서, X는 O이고 Y는 CR_2이다.

[0038] 본 발명의 추가의 바람직한 구현예에서, 화학식 (1)의 화합물이 임의로 치환 된 카바졸인 R^1 또는 R^2 치환기를 갖는 경우, 이 카바졸은 이의 2 위치를 통해 결합되지 않는다.

[0039] 본 발명의 추가의 구현예에서, 화합물은 화학식 (1-1) 또는 화학식 (1-2)의 화합물로부터 선택된다:

[0040] 

[0041] 화학식 (1-1)

[0042] 

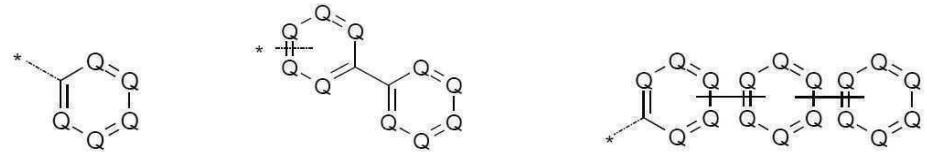
[0043] 화학식 (1-2)

[0044] 여기에서, 기호는 화학식 (1)의 기호에 해당한다.

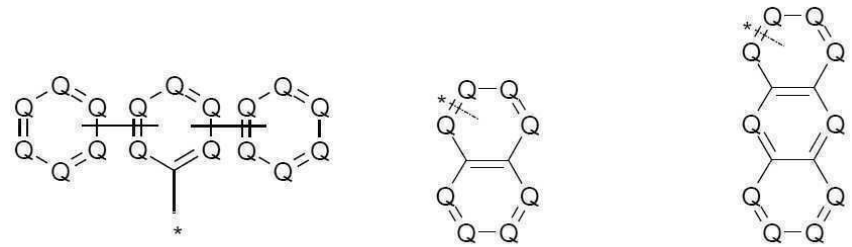
[0045] 본 발명의 추가의 바람직한 구현예에서, Ar은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자, 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이며, 더욱

바람직하게는 6 내지 12 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 또는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템이며, 이들 각각은 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수 있지만, 바람직하게는 비치환되며, Ar은 15 개 이하의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴기 또는 헤테로아릴기 만을 포함하고 카바졸릴기 및 9,9'-스피로비플루오렌기가 없다. 적합한 Ar 기의 예는 페닐, 오르토-, 메타- 또는 파라-비페닐, 터페닐, 특히 분지형 터페닐, 쿼터페닐, 특히 분지형 쿼터페닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-플루오레닐, 피리딜, 피리미디닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-디벤조퓨라닐 및 1-, 2-, 3- 또는 4-디벤조티에닐로 이루어진 군으로부터 선택되고, 이들 각각은 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수 있지만, 바람직하게는 치환되지 않는다.

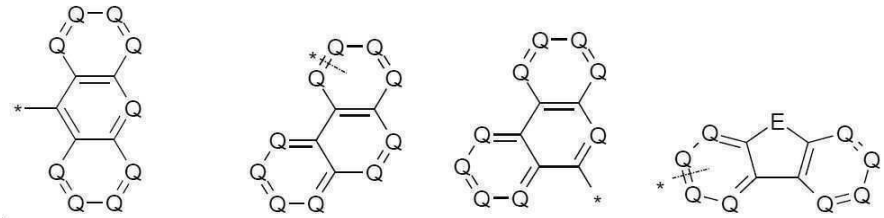
[0046] 본 발명의 바람직한 구현예에서, Ar은 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-16)의 구조로부터 선택된다:

[0047] 

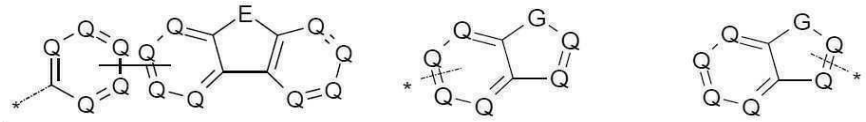
[0048] 화학식 (Ar-1) 화학식 (Ar-2) 화학식 (Ar-3)

[0049] 

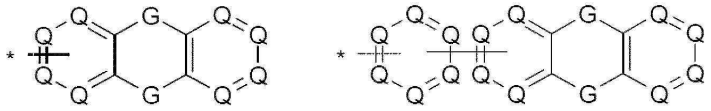
[0050] 화학식 (Ar-4) 화학식 (Ar-5) 화학식 (Ar-6)

[0051] 

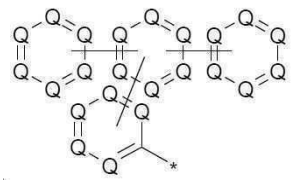
[0052] 화학식 (Ar-7) 화학식 (Ar-8) 화학식 (Ar-9) 화학식 (Ar-10)

[0053] 

[0054] 화학식 (Ar-11) 화학식 (Ar-12) 화학식 (Ar-13)

[0055] 

[0056] 화학식 (Ar-14) 화학식 (Ar-15)

[0057] 

[0058] 화학식 (Ar-16)

[0059] 여기에서 기호는 화학식 (1)의 기호에 대응하고, 또한,

[0060] Q는 각각의 경우에 동일하거나 상이하고 CR_4 또는 N이며, 고리 당 3 개 이하의 Q 기호가 N 이고;

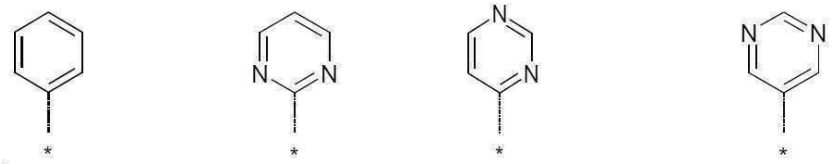
[0061] E는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 $C(R^4)_2$, O, S 또는 C=O이며, 두 개의 R^4가 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성하지 않고;

[0062] G는 각 경우 NR^4, $C(R^4)_2$, O, S 또는 C=O이고;

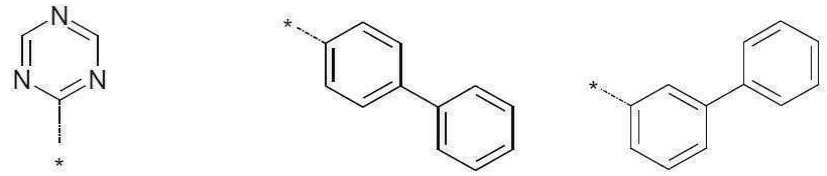
[0063] *는 질소 원자와의 결합을 나타낸다.

[0064] 바람직하게, Q는 N이 아니다.

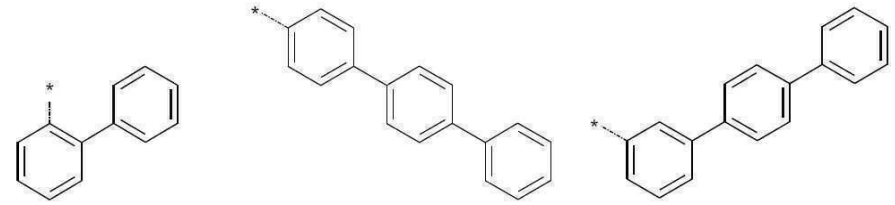
[0065] 추가의 바람직한 구현예에서, 각 경우의 Ar 기는 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-16)의 구조를 갖는 군으로부터 선택되며, 여기에서 일반 화학식은 하기 화학식 (Ar-1-1) 내지 (Ar-16-6)의 각각의 특히 바람직한 구현예로 대체된다 (예를 들어, 화학식 (Ar-1) 은 화학식 (Ar-1-1) 내지 (Ar-1-9) 중 하나로 대체됨):

[0066] 

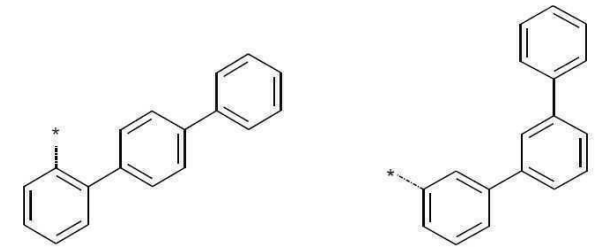
[0067] 화학식 (Ar-1-1) 화학식 (Ar-1-2) 화학식 (Ar-1-3) 화학식 (Ar-1-4)

[0068] 

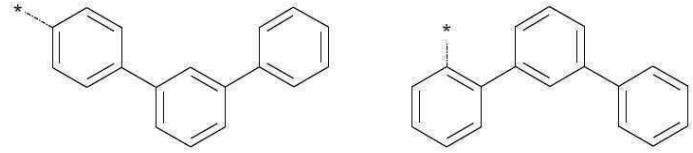
[0069] 화학식 (Ar-1-5) 화학식 (Ar-2-1) 화학식 (Ar-2-2)

[0070] 

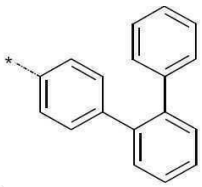
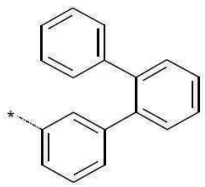
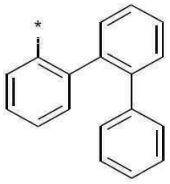
[0071] 화학식 (Ar-2-3) 화학식 (Ar-3-1) 화학식 (Ar-3-2)

[0072] 

[0073] 화학식 (Ar-3-3) 화학식 (Ar-3-4)

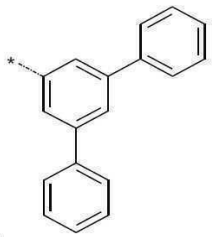
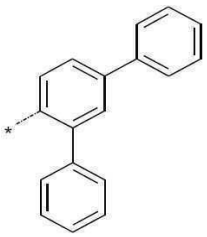
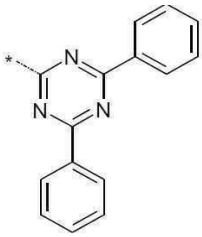
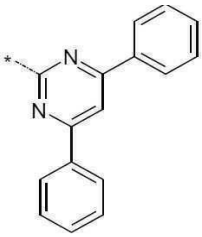
[0074] 

[0075] 화학식 (Ar-3-5) 화학식 (Ar-3-6)

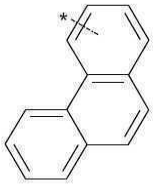
[0076]

[0077] 화학식 (Ar-3-7) 화학식 (Ar-3-8) 화학식 (Ar-3-9)

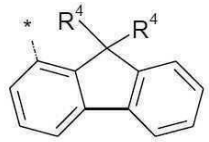
[0078]

[0079] 화학식 (Ar-4-1) 화학식 (Ar-4-2) 화학식 (Ar-4-3) 화학식 (Ar-4-4)

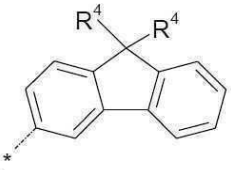
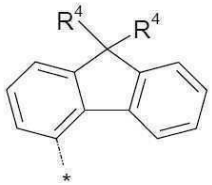
[0080]

[0081] 화학식 (Ar-5-1) 화학식 (Ar-8-1)



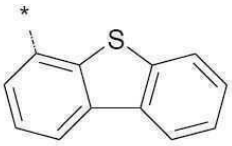
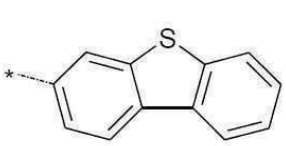

[0082]

[0083] 화학식 (Ar-10-1) 화학식 (Ar-10-2)

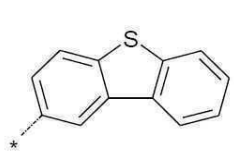
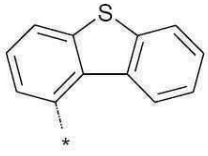
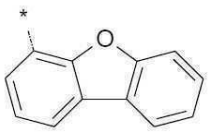
[0084]

[0085] 화학식 (Ar-10-3) 화학식 (Ar-10-4)

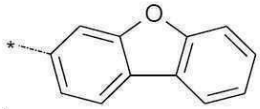
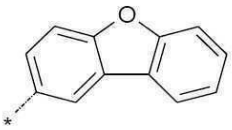
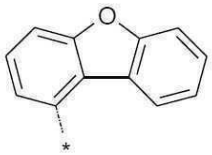
[0086]

[0087] 화학식 (Ar-10-5) 화학식 (Ar-10-6)

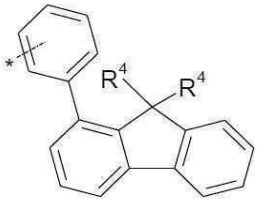
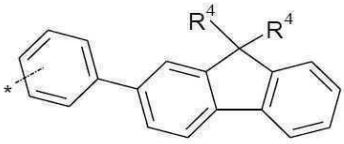
[0088]

[0089] 화학식 (Ar-10-7) 화학식 (Ar-10-8) 화학식 (Ar-10-9)

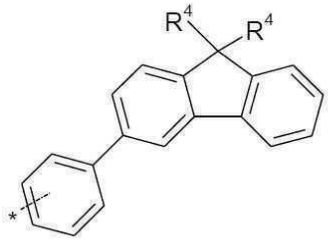
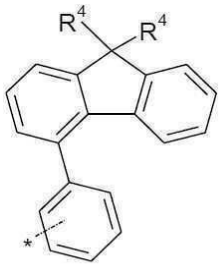
[0090]

[0091] 화학식 (Ar-10-10) 화학식 (Ar-10-11) 화학식 (Ar-10-12)

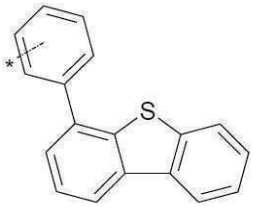
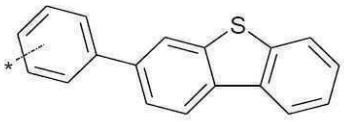
[0092]

[0093] 화학식 (Ar-11-1) 화학식 (Ar-11-2)

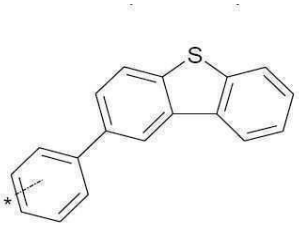
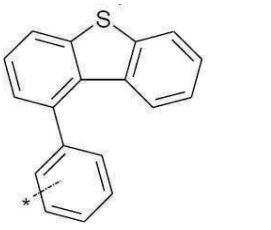
[0094]

[0095] 화학식 (Ar-11-3) 화학식 (Ar-11-4)

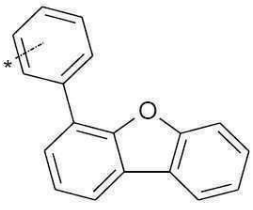
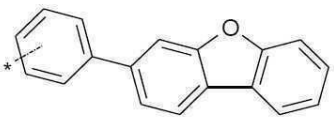
[0096]

[0097] 화학식 (Ar-11-5) 화학식 (Ar-11-6)

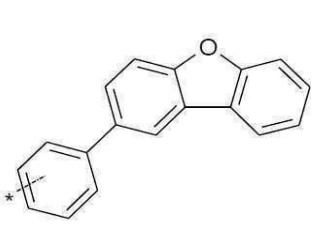
[0098]

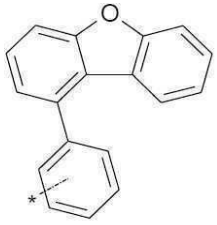
[0099] 화학식 (Ar-11-7) 화학식 (Ar-11-8)

[0100]

[0101] 화학식 (Ar-11-9) 화학식 (Ar-11-10)

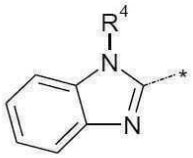




[0102]

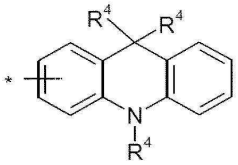
[0103] 화학식 (Ar-11-11) 화학식 (Ar-11-12)





[0104]

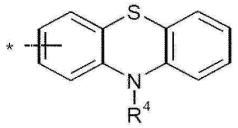
[0105] 화학식 (Ar-12-1) 화학식 (Ar-13-1)

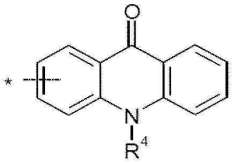




[0106]

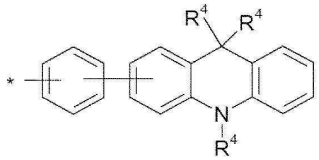
[0107] 화학식 (Ar-14-1) 화학식 (Ar-14-2)

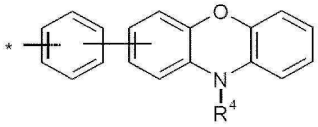




[0108]

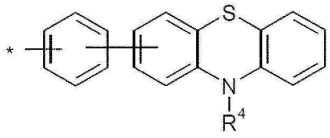
[0109] 화학식 (Ar-14-3) 화학식 (Ar-14-4)

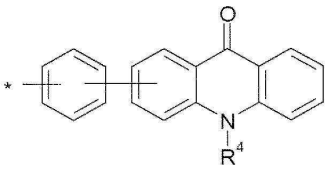




[0110]

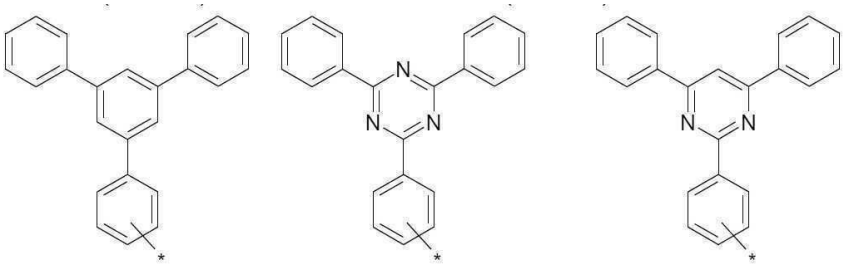
[0111] 화학식 (Ar-15-1) 화학식 (Ar-15-2)



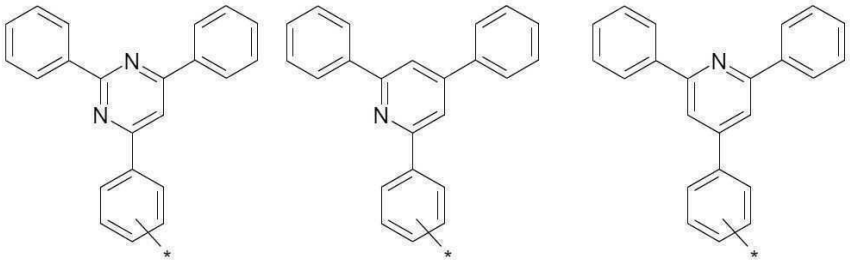


[0112]

[0113] 화학식 (Ar-15-3) 화학식 (Ar-15-4)

[0114] 

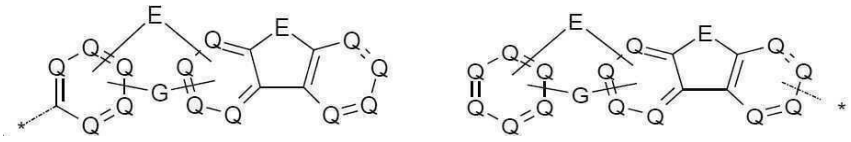
[0115] 화학식 (Ar-16-1) 화학식 (Ar-16-2) 화학식 (Ar-16-3)

[0116] 

[0117] 화학식 (Ar-16-4) 화학식 (Ar-16-5) 화학식 (Ar-16-6)

[0118] 여기에서 기호는 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-16)의 기호에 상응한다. 화학식은 자유 위치에서 R^4로 치환될 수 있다.

[0119] 본 발명의 추가의 구현예에서, R^2는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템의 경우 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-16)의 구조, 또는 이들의 바람직한 구현예, 및 화학식 (Ar-17) 및 (Ar-18)의 구조로부터 선택된다:

[0120] 

[0121] 화학식 (Ar-17) 화학식 (Ar-18)

[0122] 여기에서 기호는 화학식 (1)의 기호에 상응하고, 또한 화학식 (Ar-17) 및 (Ar-18)에 해당한다:

[0123] Q는 각각의 경우에 동일하거나 상이하고 CR_4 또는 N이며, 고리 당 3 개 이하의 Q 기호가 N 이고;

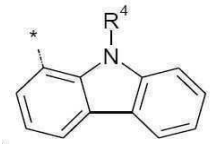
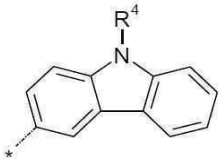
[0124] E는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 NR^4, $C(R^4)_2$, O, S 또는 C=O이며, 두 개의 R^4가 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성하지 않고;

[0125] G는 각 경우 NR^4, $C(R^4)_2$, O, S 또는 C=O이고;

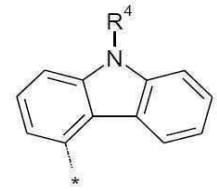
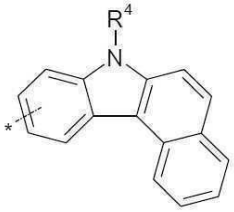
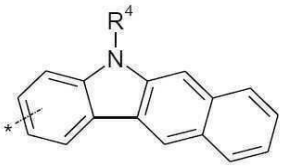
[0126] *는 방향족 고리 시스템과의 결합을 나타낸다.

[0127] 바람직하게, Q는 N이 아니다.

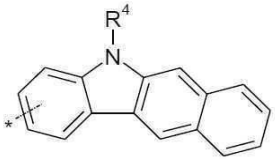
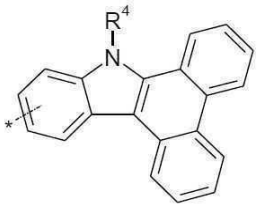
[0128] 추가의 바람직한 구현예에서, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템의 경우, 각 경우의 R^2 기는 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-18)의 구조를 갖는 군으로부터 선택되며, 여기에서 일반 화학식은 하기 화학식 (Ar-1-1) 내지 (Ar-16-6)의 각각의 특히 바람직한 구현예로 대체되고 (예를 들어, 화학식 (Ar-1) 은 화학식 (Ar-1-1) 내지 (Ar-1-9) 중 하나로 대체됨), 바람직한 것은 부가적으로 하기 화학식에 제시된다:

[0129]   

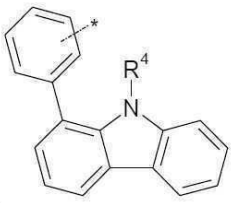
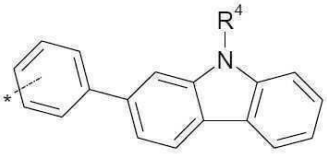
[0130] 화학식 (Ar-10-17) 화학식 (Ar-10-18) 화학식 (Ar-10-19)

[0131]   

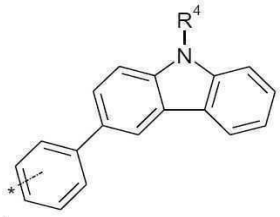
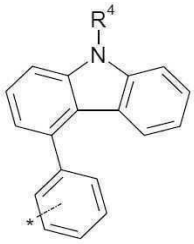
[0132] 화학식 (Ar-10-20) 화학식 (Ar-10-21) 화학식 (Ar-10-22)

[0133]   

[0134] 화학식 (Ar-10-23) 화학식 (Ar-10-24) 화학식 (Ar-10-25)

[0135]  

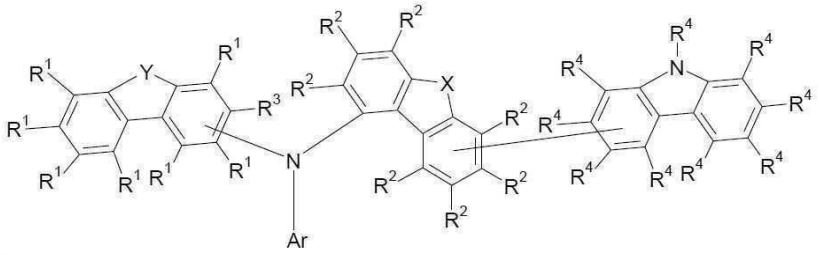
[0136] 화학식 (Ar-11-13) 화학식 (Ar-11-14)

[0137]  

[0138] 화학식 (Ar-11-15) 화학식 (Ar-11-16)

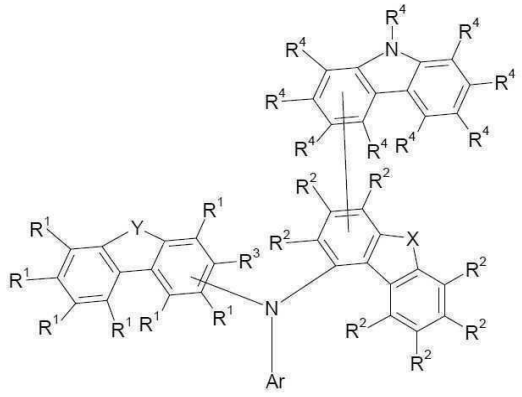
[0139] 여기에서 기호는 화학식 (1)의 기호에 상응한다.

[0140] 본 발명의 하나의 구현예에서, 화합물은 화학식 (2) 또는 화학식 (3)의 구조이다:



[0141]

[0142] 화학식 (2)



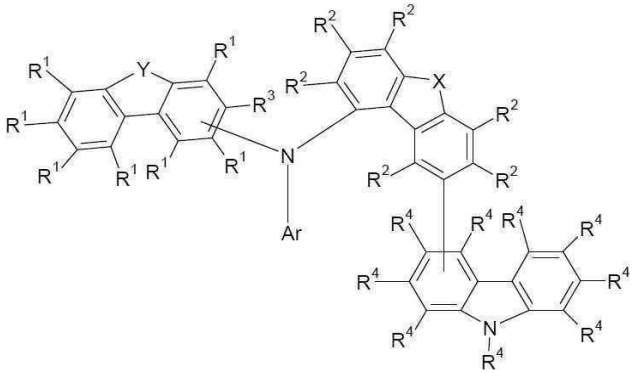
[0143]

[0144] 화학식 (3)

[0145] 여기에서 기호는 화학식 (1)의 기호에 상응하는데, 하나의 R^2 및 탄소 원자에 결합된 하나의 R^4 가 단일 결합으로 대체되고, R^2의 경우 바람직하게는 화학식 (2)에서 질소 원자에 결합되지 않은 6 원 고리 상에 있다.

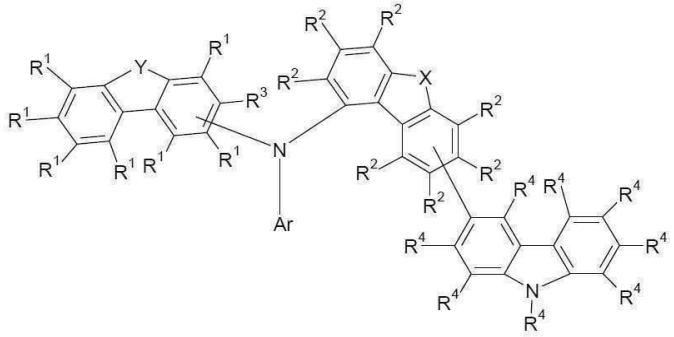
[0146] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 카바졸은 이의 2 위치를 통해 결합되지 않는다.

[0147] 본 발명의 추가의 바람직한 구현예에서, 화합물은 화학식 (2-1) 및 (2-2)의 구조 중 하나의 화합물이다:



[0148]

[0149] 화학식 (2-1)

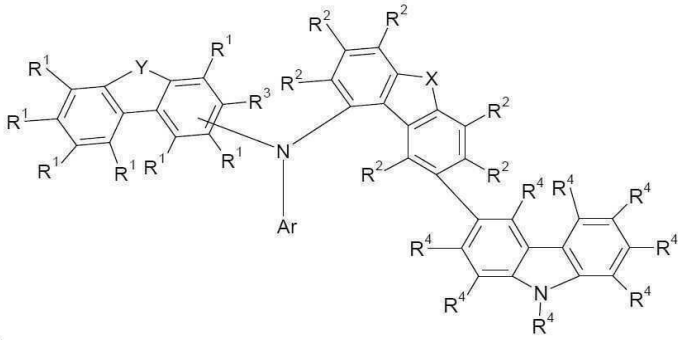


[0150]

[0151] 화학식 (2-2)

[0152] 여기에서 기호는 화학식 (2)의 기호에 상응하는데, 화학식 (2-1) 에서 하나의 R^2 및 화학식 (2-2) 에서 탄소 원자에 결합된 하나의 R^4 는 단일 결합으로 대체되고, 화학식 (2-2)의 경우 질소 원자에 결합되지 않은 6 원 고리상에 있다.

[0153] 본 발명의 추가의 바람직한 구현예에서, 화합물은 화학식 (2-3)의 화합물이다:

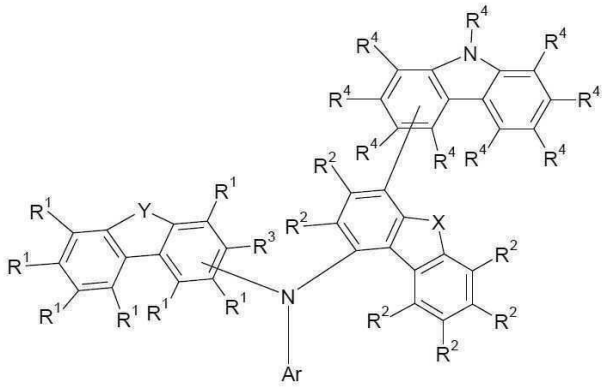


[0154]

[0155] 화학식 (2-3)

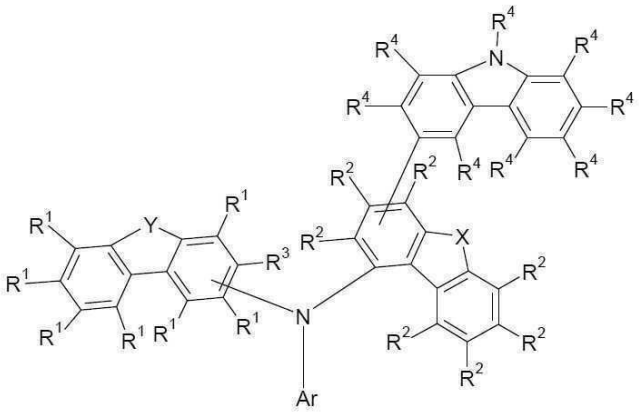
[0156] 여기에서 기호는 화학식 (2)의 기호에 상응한다.

[0157] 본 발명의 추가의 바람직한 구현예에서, 화합물은 화학식 (3-1) 및 (3-2)의 구조 중 하나의 화합물이다:



[0158]

[0159] 화학식 (3-1)

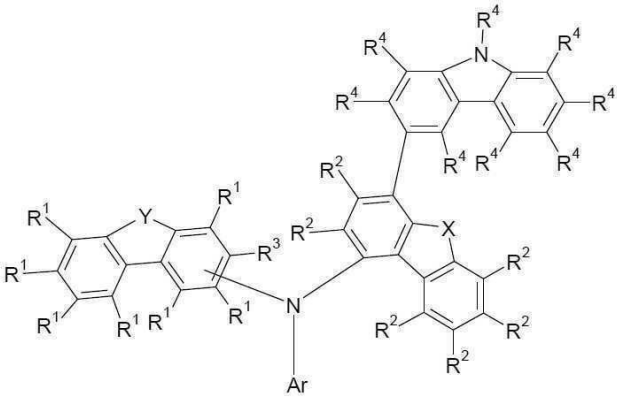


[0160]

[0161] 화학식 (3-2)

[0162] 여기에서 기호는 화학식 (3)의 기호에 상응하는데, 화학식 (3-1) 에서 하나의 R^2와 화학식 (3-2)에서 탄소 원자에 결합된 하나의 R^4 는 단일 결합으로 대체되고, 화학식 (3-2)의 경우 질소 원자에 결합된 6 원 고리상에 있다.

[0163] 본 발명의 추가의 바람직한 구현예에서, 화합물은 화학식 (3-3)의 화합물이다:

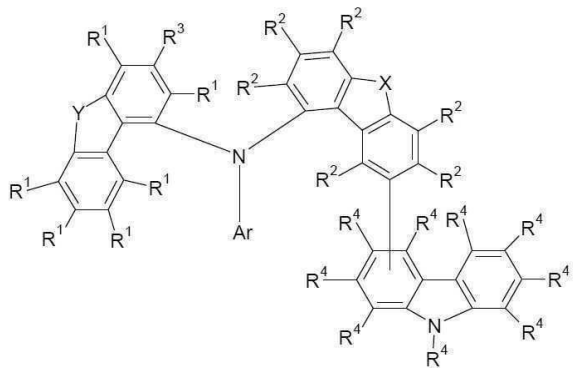


[0164]

[0165] 화학식 (3-3)

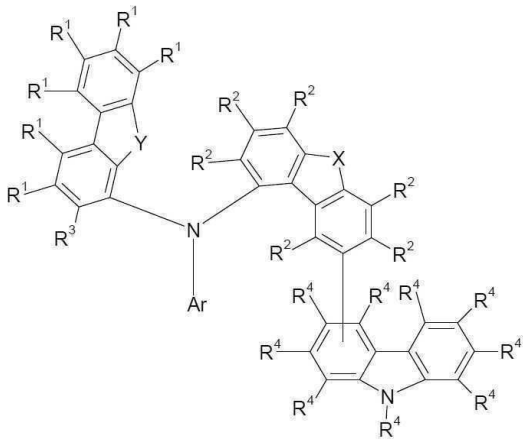
[0166] 여기에서 기호는 화학식 (3)의 기호에 상응한다.

[0167] 본 발명의 추가의 구현예에서, 화합물은 하기 화학식 (2-1a), (2-1b), (2-2a), (2-2b)의 화합물이다:



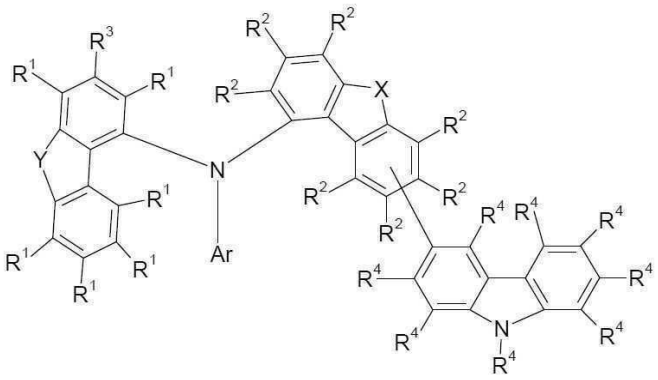
[0168]

[0169] 화학식 (2-1a)



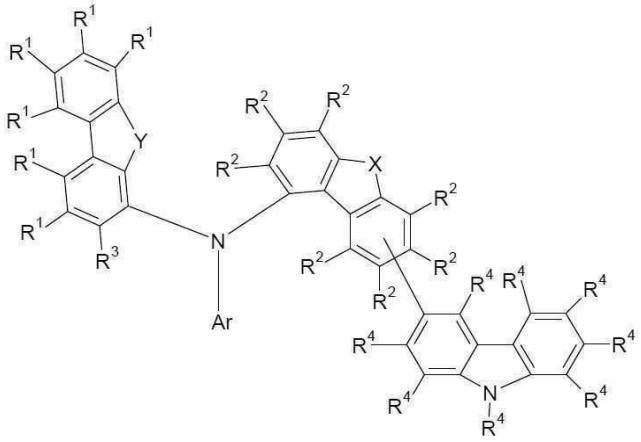
[0170]

[0171] 화학식 (2-1b)



[0172]

[0173] 화학식 (2-2a)

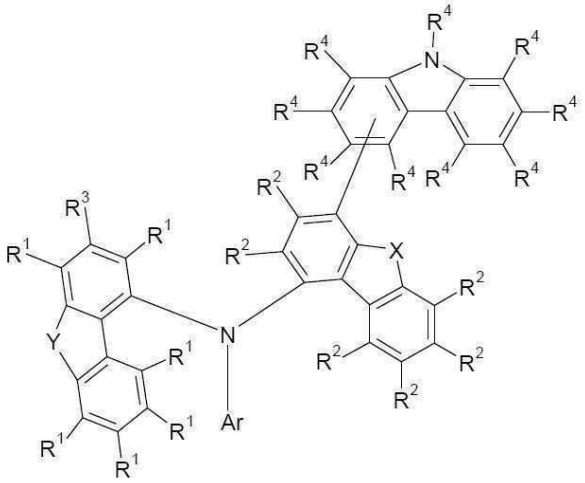


[0174]

[0175] 화학식 (2-2b)

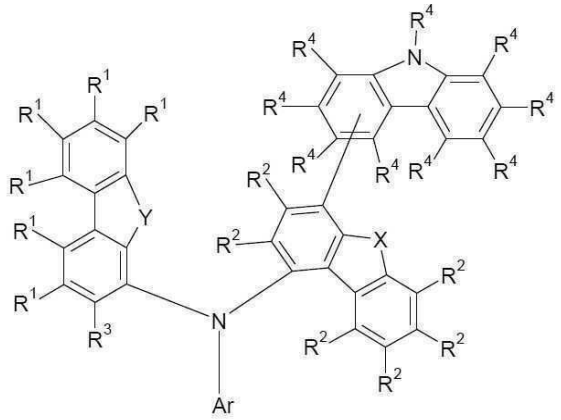
[0176] 여기에서 기호는 화학식 (2)의 기호에 상응한다.

[0177] 본 발명의 추가의 구현예에서, 화합물은 화학식 (3-1a), (3-1b), (3-2a) 또는 (3-2b)의 화합물이다:



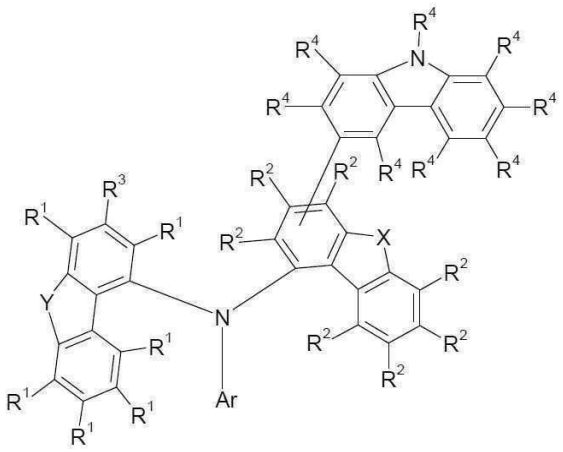
[0178]

[0179] 화학식 (3-1a)



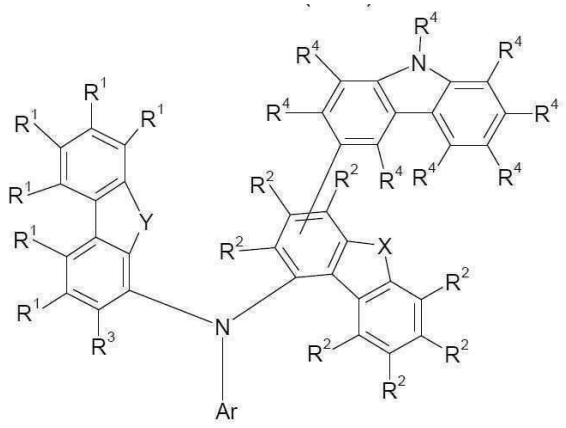
[0180]

[0181] 화학식 (3-1b)



[0182]

[0183] 화학식 (3-2a)

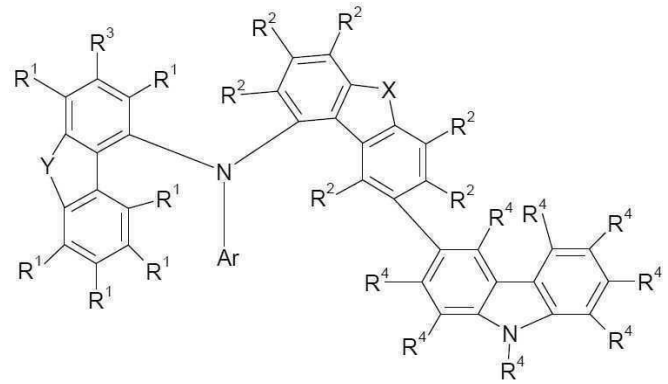


[0184]

[0185] 화학식 (3-2b)

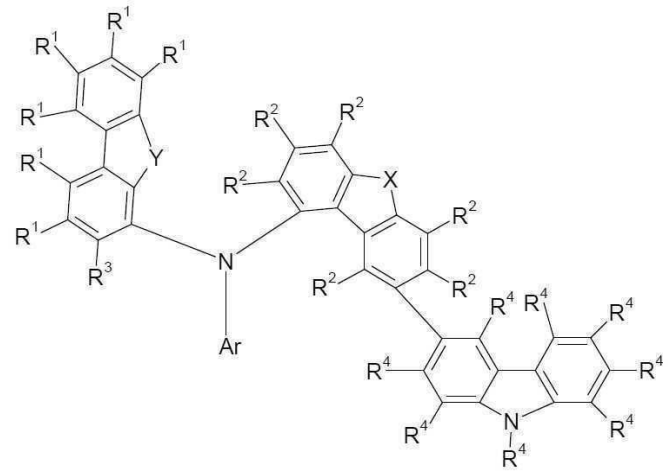
[0186] 여기에서 기호는 화학식 (3)의 기호에 상응한다.

[0187] 본 발명의 추가의 바람직한 구현예에서, 화합물은 하기 화학식 (2-3a) 또는 (2-3b)의 화합물이다:



[0188]

[0189] 화학식 (2-3a)

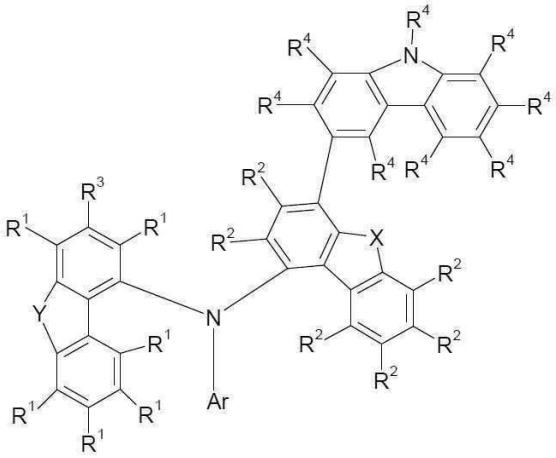


[0190]

[0191] 화학식 (2-3b)

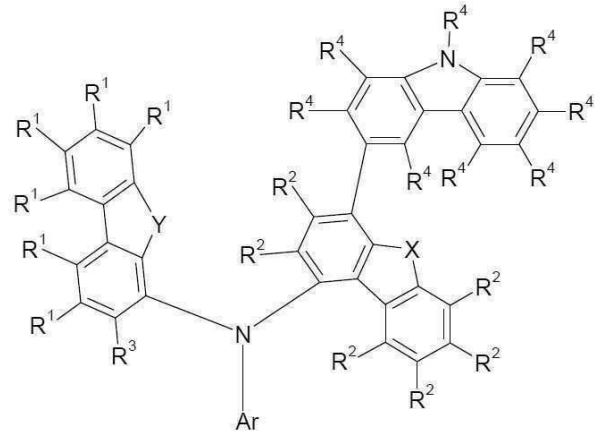
[0192] 여기에서 기호는 화학식 (2-3)의 기호에 상응한다.

[0193] 본 발명의 추가의 바람직한 구현예에서, 화합물은 화학식 (3-3a) 또는 (3-3b)의 화합물이다:



[0194]

[0195] 화학식 (3-3a)



[0196]

[0197] 화학식 (3-3b)

[0198] 여기에서 기호는 화학식 (3-3)의 기호에 상응한다.

[0199] 본 발명의 추가의 구현예에서, R^1 및 R^3는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템의 경우, 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-16) (여기에서 기호의 정의는 Ar에 대해 정의된 바와 같은 기호에 상응하고 *는 방향족 고리 시스템에 대한 결합임)중 하나로부터 선택된다.

[0200] 바람직하게는, Ar에 결합된 R 치환기는 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다: H, D, F, CN, $N(Ar^1)_2$, 1 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직선 사슬 알킬기, 또는 3 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬기, 또는 2 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐기 (여기에서 알킬 또는 알케닐기는 각각의 경우 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있지만, 바람직하게는 치환되지 않음), 또는 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자, 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 더욱 바람직하게는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이들 각각은 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있지만, 바람직하게는 치환되지 않음); 동시에, 인접 탄소 원자에 결합된 두 개의 R 치환기가 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 단일 고리형 또는 다중 고리형 지방족 고리 시스템을 형성할 수 있지만, 바람직하게는 치환되지 않는다.

[0201] Y가 CR_2 인 경우, 이 탄소 원자에 결합된 R 라디칼은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 1 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직선 사슬 알킬기, 또는 3 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬기, 또는 2 내지 8

개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐기 (여기에서, 각각의 알킬 또는 알케닐기는 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 O로 대체될 수 있고, 하나 이상의 수소 원자는 D 또는 F로 대체될 수 있음), 또는 하나 이상의 R^4 라디칼로 각각 치환될 수 있는 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 더욱 바람직하게는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템인 것이 바람직하고; 동시에, 두 개의 R 치환기가 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 단일 고리형 또는 다중 고리형 지방족 고리 시스템을 형성할 수 있다. 두 개의 R 치환기 사이의 고리 형성은 스피로 시스템을 형성한다.

[0202] 바람직하게는, R^1 치환기는 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다: H, D, F, CN, $N(Ar^1)_2$, 1 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직선 사슬 알킬기, 또는 3 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬기, 또는 2 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐기 (여기에서 알킬 또는 알케닐기는 각각의 경우 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있지만, 바람직하게는 치환되지 않음), 또는 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자, 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 더욱 바람직하게는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이들 각각은 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있지만, 바람직하게는 치환되지 않음); 동시에, 동일한 탄소 원자 또는 인접 탄소 원자에 결합된 두 개의 R^1 치환기 또는 2 개의 R^1 및 R^2 치환기가 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 단일 고리형 또는 다중 고리형 지방족 고리 시스템을 형성할 수 있지만, 바람직하게는 치환되지 않는다.

[0203] 바람직하게는, R^2 치환기는 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다: H, D, F, CN, $N(Ar^1)_2$, 1 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직선 사슬 알킬기, 또는 3 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬기, 또는 2 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐기 (여기에서 알킬 또는 알케닐기는 각각의 경우 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있지만, 바람직하게는 치환되지 않음), 또는 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자, 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 더욱 바람직하게는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이들 각각은 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있지만, 바람직하게는 치환되지 않음); 동시에, 동일한 탄소 원자 또는 인접 탄소 원자에 결합된 두 개의 R^2 치환기가 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 단일 고리형 또는 다중 고리형 지방족 고리 시스템을 형성할 수 있지만, 바람직하게는 치환되지 않는다.

[0204] 바람직하게는, R^3 치환기는 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다: H, D, F, CN, $N(Ar^1)_2$, 1 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직선 사슬 알킬기, 또는 3 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬기, 또는 2 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐기 (여기에서 알킬 또는 알케닐기는 각각의 경우 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있지만, 바람직하게는 치환되지 않음), 또는 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자, 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 더욱 바람직하게는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이들 각각은 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있지만, 바람직하게는 치환되지 않음); 동시에, 동일한 탄소 원자 또는 인접 탄소 원자에 결합된 두 개의 R^3 및 R^1 치환기가 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있는 단일 고리형 또는 다중 고리형 지방족 고리 시스템을 형성할 수 있지만, 바람직하게는 치환되지 않는다.

[0205] 바람직하게는, R^4 치환기는 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다: H, D, F, CN, $N(Ar^1)_2$, $N(R^5)_2$, 1 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직선 사슬 알킬기, 또는 3 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬기, 또는 2 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐기 (여기에서 알킬 또는 알케닐기는 각각의 경우 하나 이상의 R^4 라디칼로 치환될 수 있지만, 바람직하게는 치환되지 않음), 또는 6 내지

24 개의 방향족 고리 원자, 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 더욱 바람직하게는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이들 각각은 하나 이상의 R^5 라디칼로 치환될 수 있지만, 바람직하게는 치환되지 않음); 동시에, 동일한 탄소 원자 또는 인접 탄소 원자에 결합된 두 개의 R^4 치환기가 하나 이상의 R^5 라디칼로 치환될 수 있는 단일 고리형 또는 다중 고리형 지방족 고리 시스템을 형성할 수 있지만, 바람직하게는 치환되지 않는다.

[0206] E 또는 G가 NR^4인 경우, 이 질소 원자에 결합된 R^4 라디칼은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각각의 경우 하나 이상의 R^5 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 더욱 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R^5 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템인 것이 바람직하다. 적합한 R^4 치환기의 예는 하기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다: 페닐, 오르토-, 메타- 또는 파라-비페닐, 터페닐, 특히 분지형 터페닐, 쿼터페닐, 특히 분지형 쿼터페닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-플루오레닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-스피로비플루오레닐, 피리딜, 피리미디닐, 1,3,5-트리아지닐, 4,6-디페닐-1,3,5-트리아지닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-디벤조퓨라닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-디벤조티에닐 및 1-, 2-, 3- 또는 4-카바졸릴 (여기에서 카바졸릴기는 질소 원자 상에서 H 또는 D 이외의 R^5 라디칼로 치환됨). 이들 기는 각각 하나 이상의 R^5 라디칼로 치환될 수 있지만, 바람직하게는 치환되지 않는다.

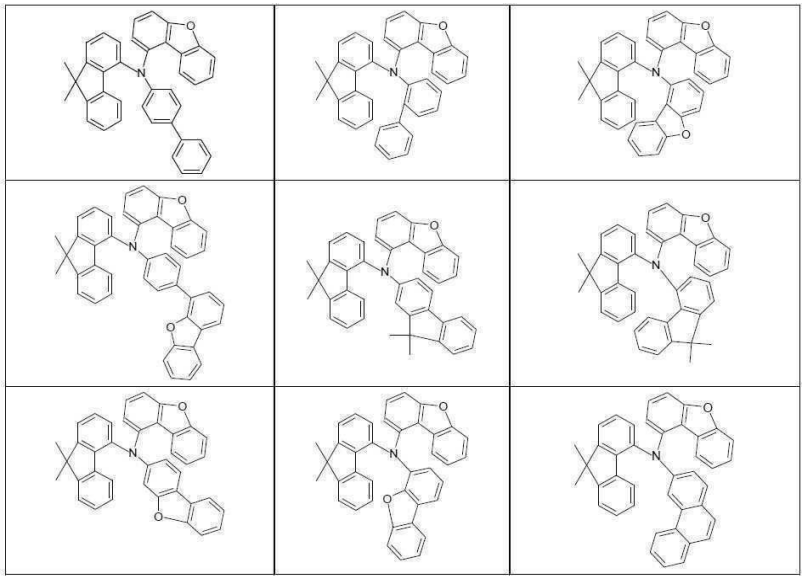
[0207] 본 발명의 추가의 구현예에서, 화합물은 중심 질소 원자를 제외하고 임의의 추가의 가교 결합되지 않은 아민을 포함하지 않는다. 이것은, 예를 들어, 라디칼이 $N(Ar^1)_2$ 또는 $N(R^4)_2$가 아님을 의미한다.

[0208] 본 발명의 추가의 구현예에서, 화학식 (1)의 적어도 하나의 R, R^1, R^2 또는 R^3 는 헤테로아릴기이다.

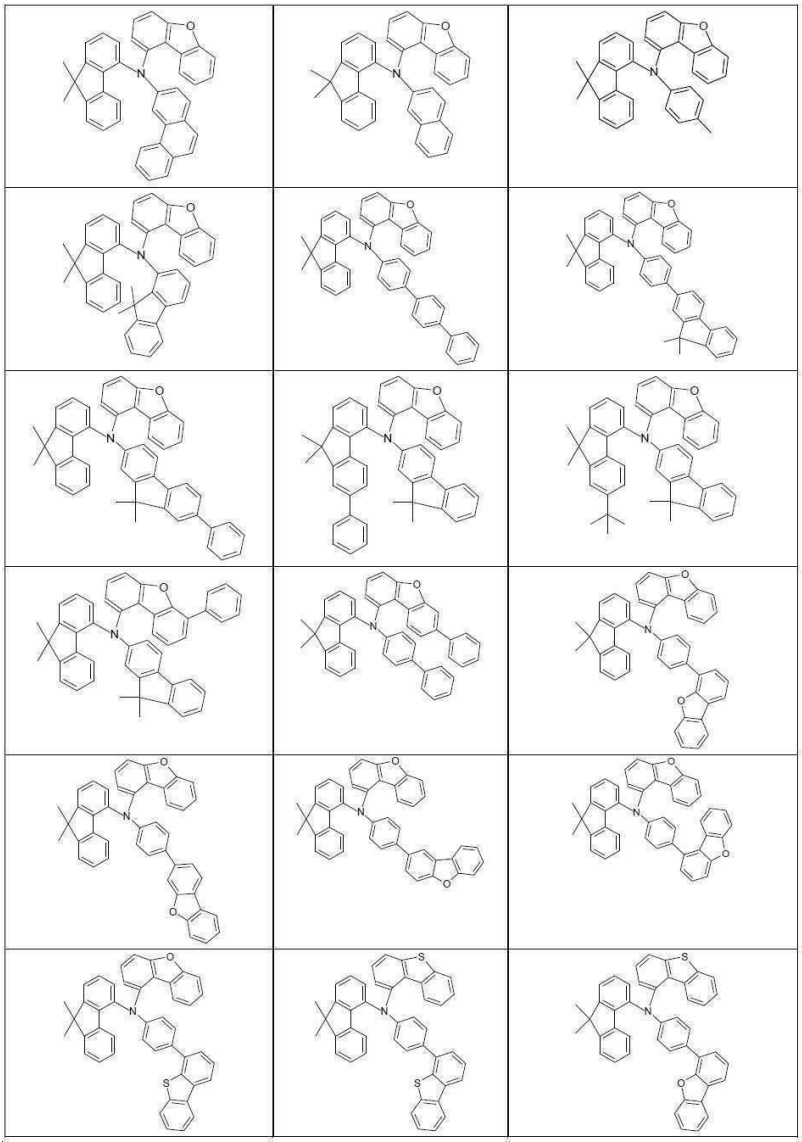
[0209] 본 발명의 추가의 구현예에서, Ar은 화학식 (Ar-10-2)의 기, 예컨대 2-플루오레닐기가 아니다.

[0210] 상기 언급한 선호도는 개별적으로 또는 함께 발생할 수 있다. 상기 언급한 선호도가 함께 발생하는 것이 바람직하다.

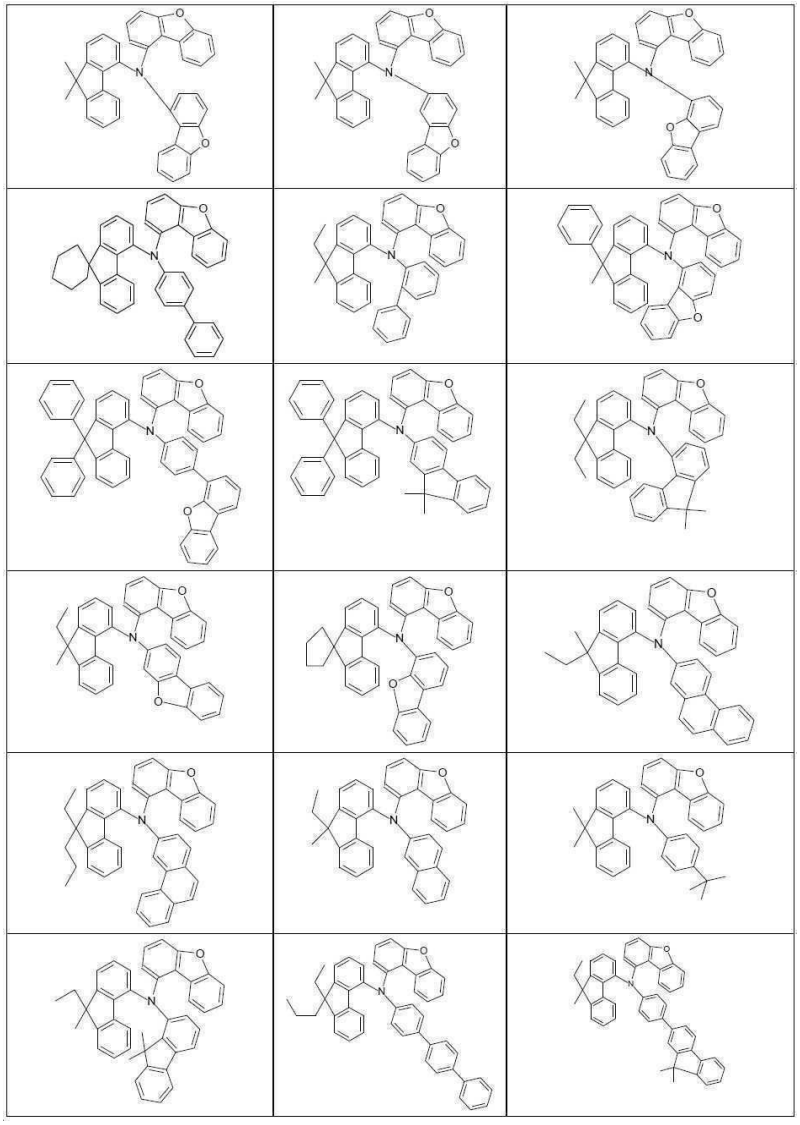
[0211] 본 발명의 적합한 화합물의 예는 하기에 나타낸 구조이다.

[0212] 

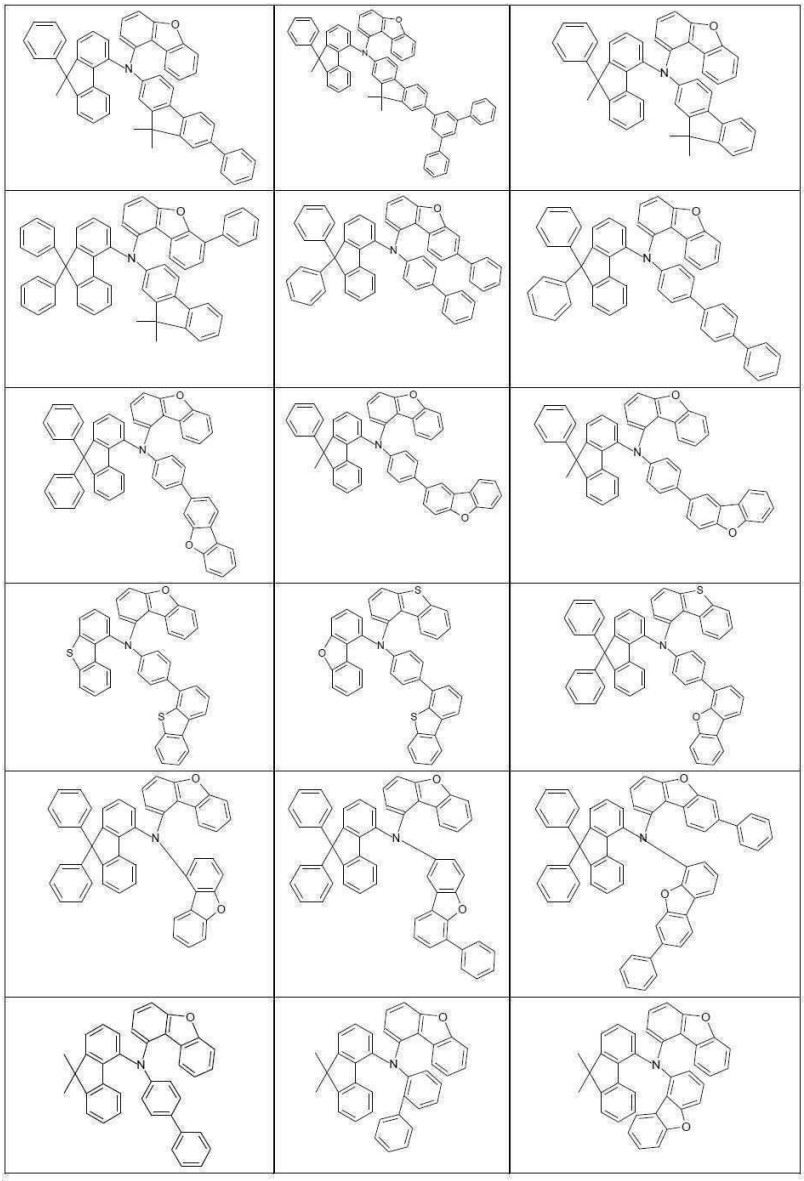
[0213]



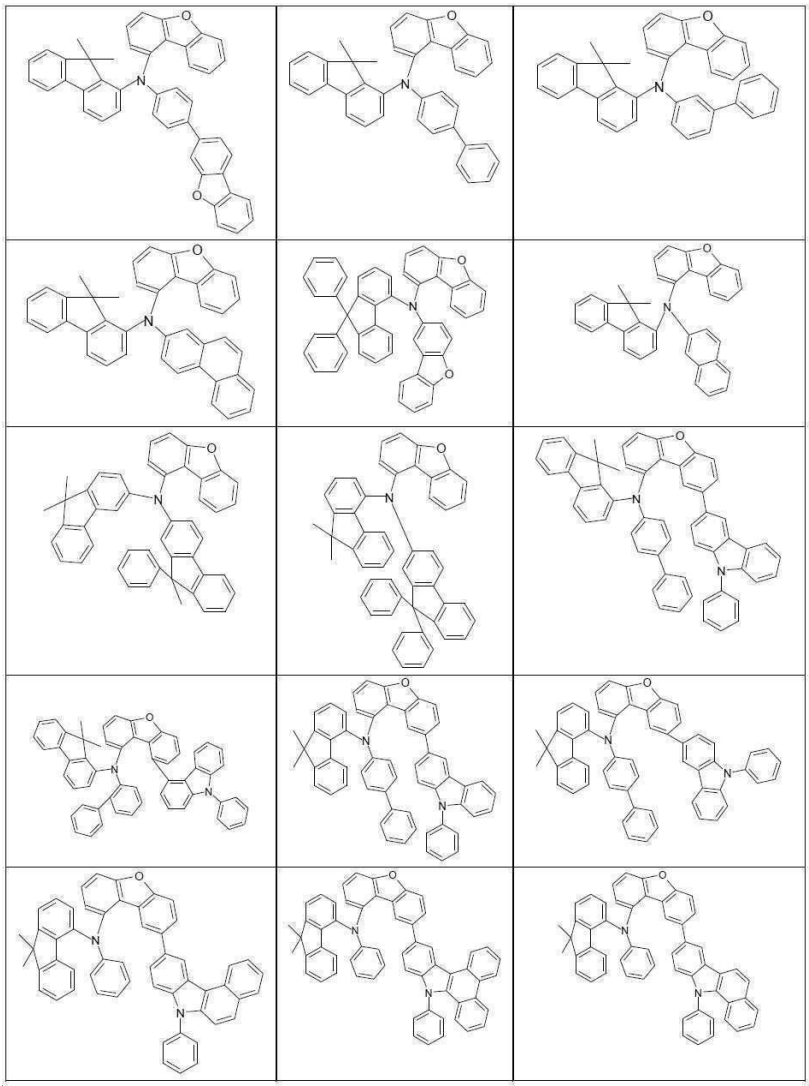
[0214]



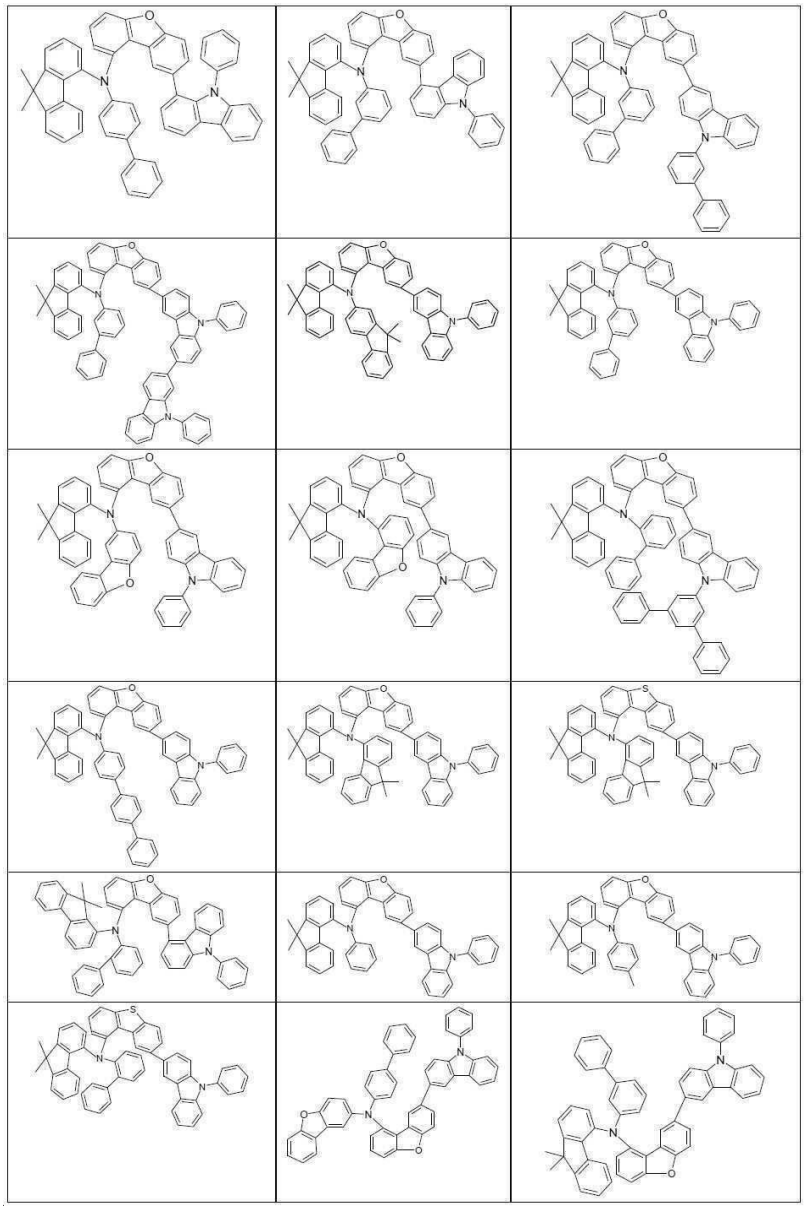
[0215]



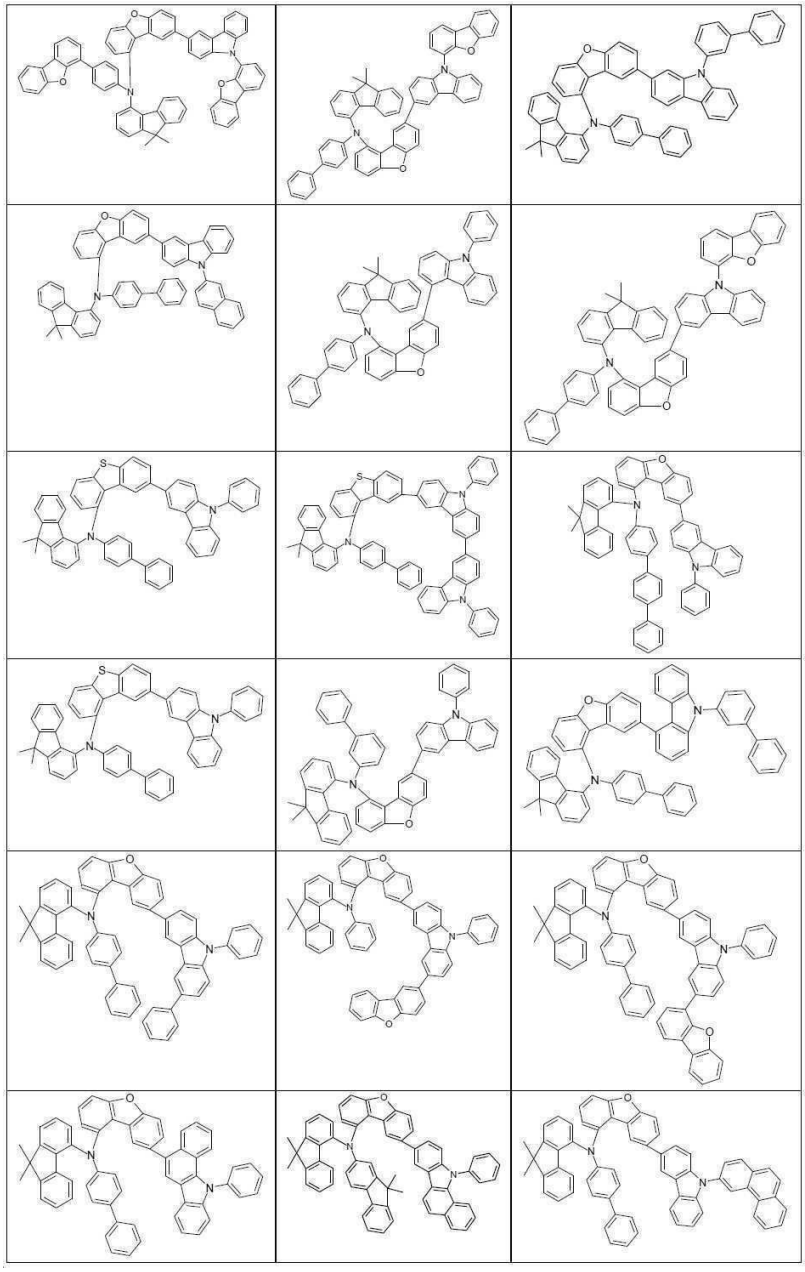
[0216]



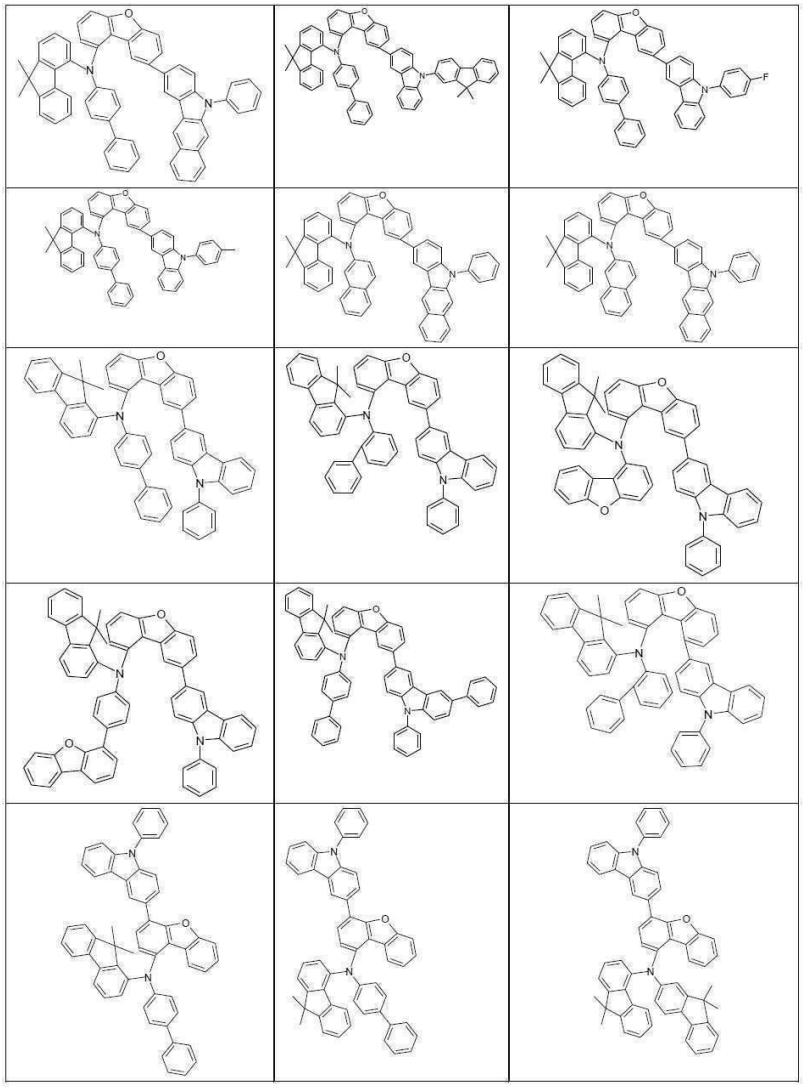
[0217]



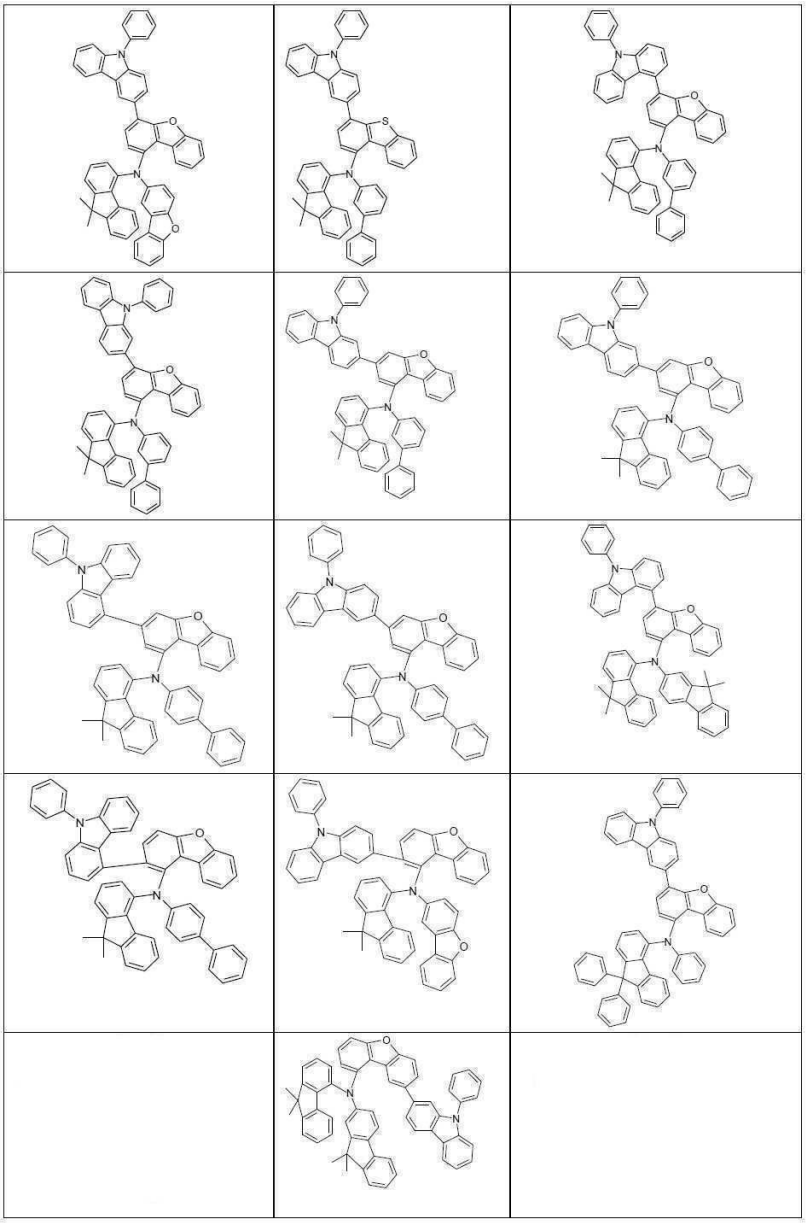
[0218]



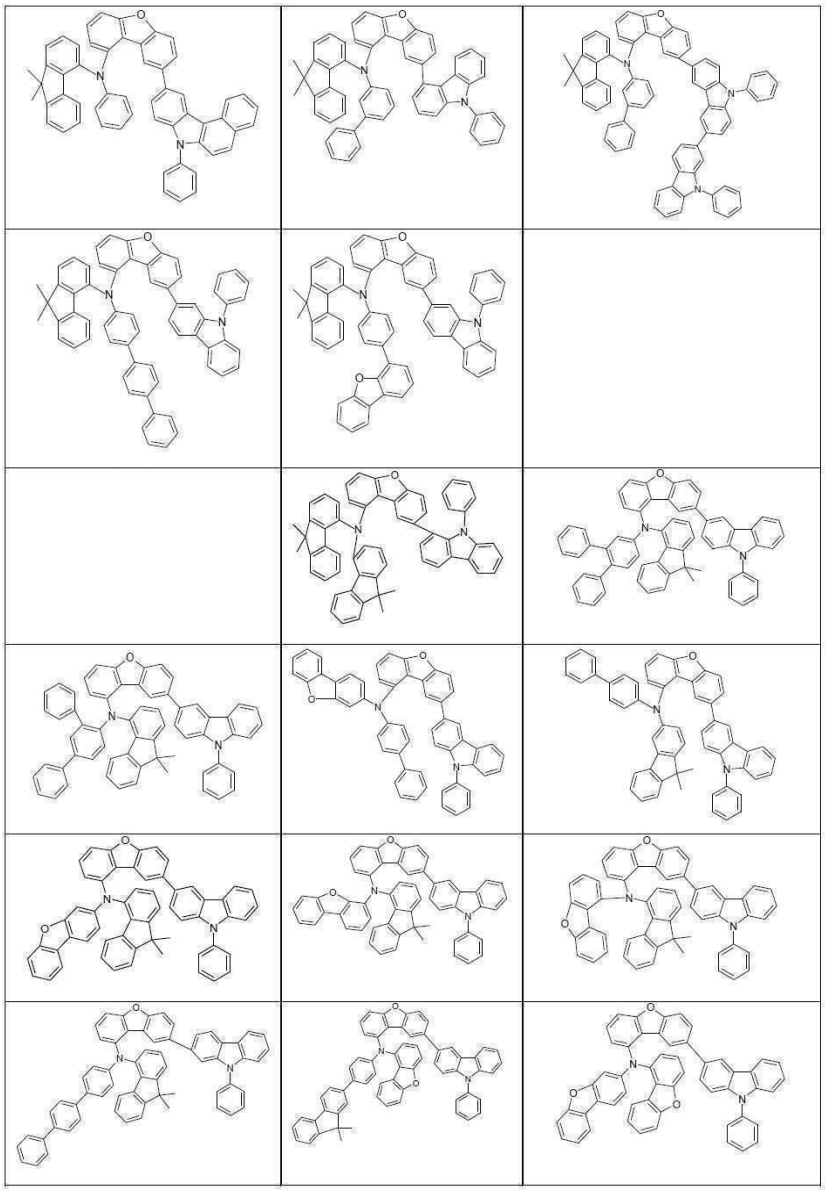
[0219]



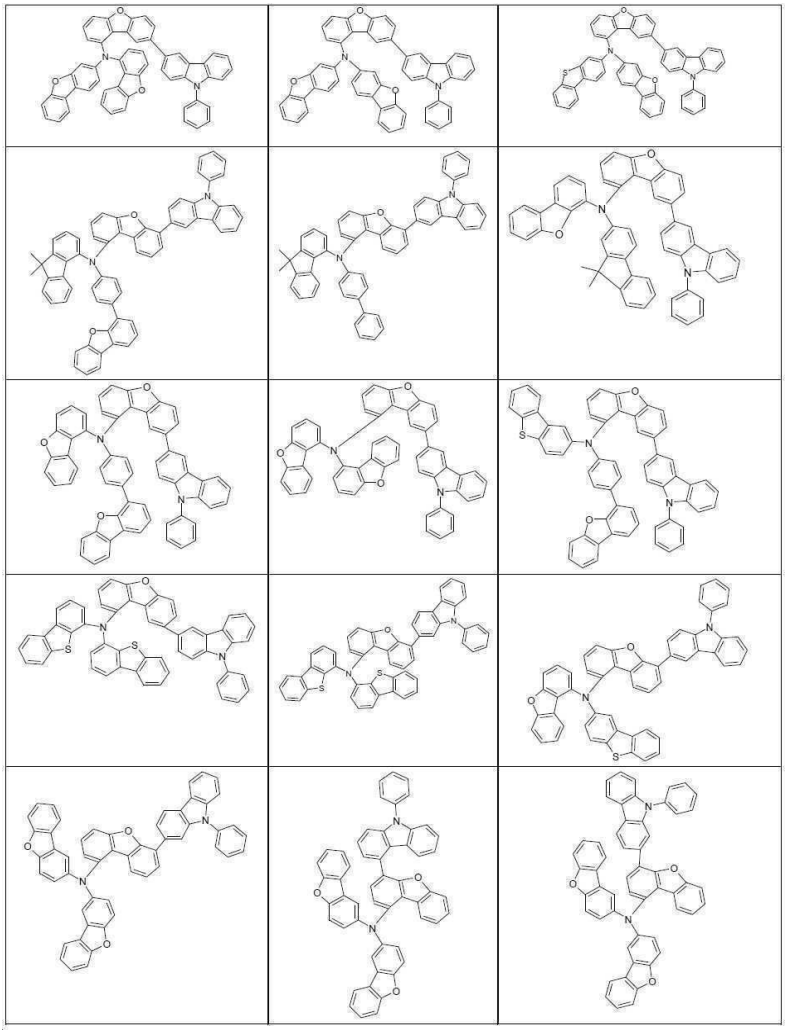
[0220]



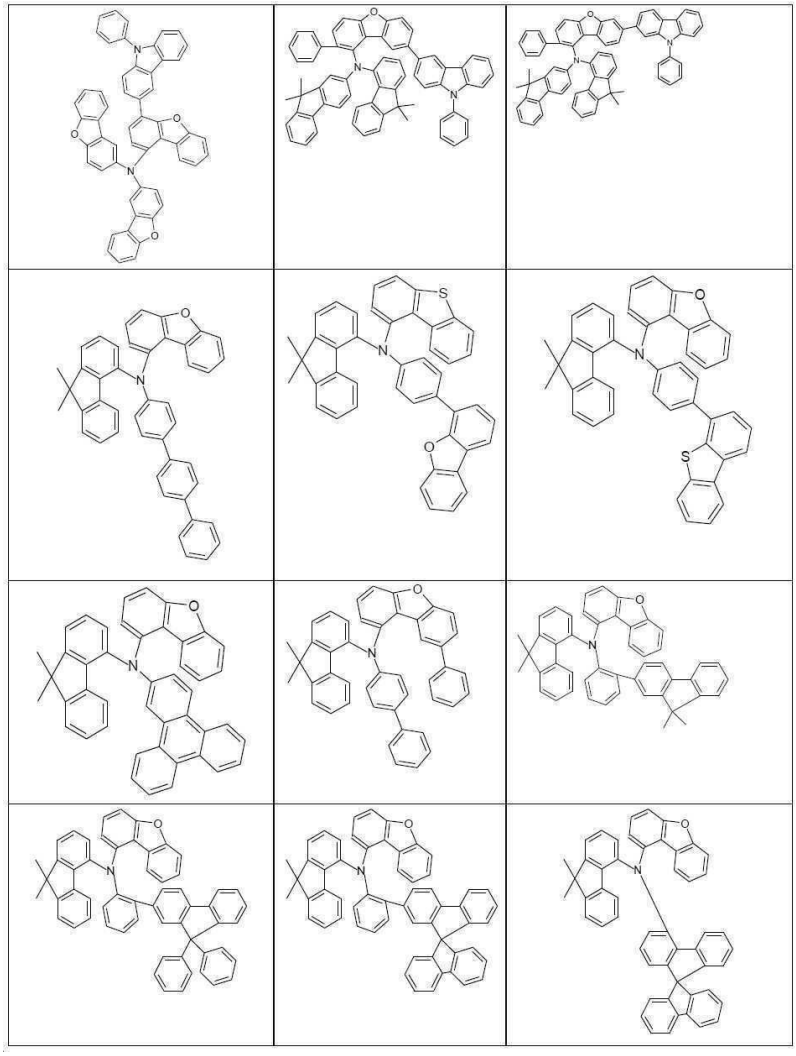
[0221]



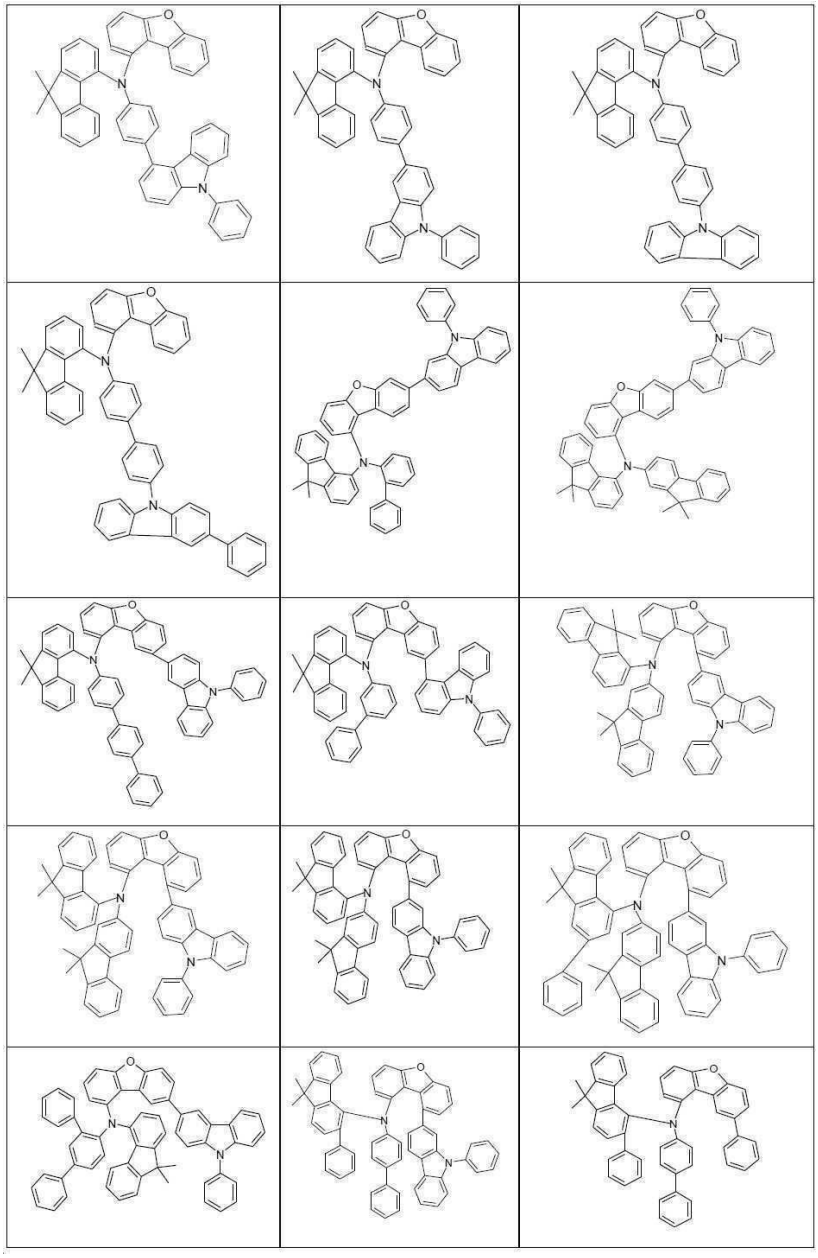
[0222]



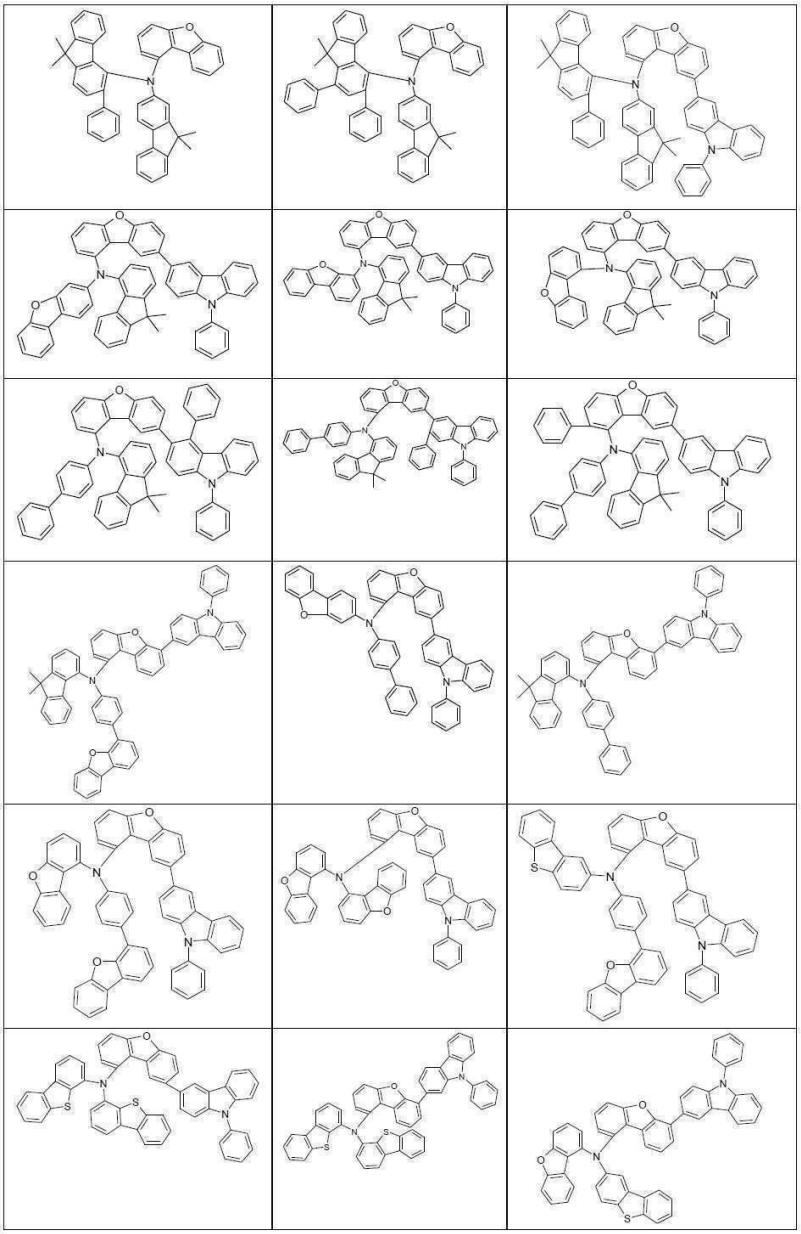
[0223]



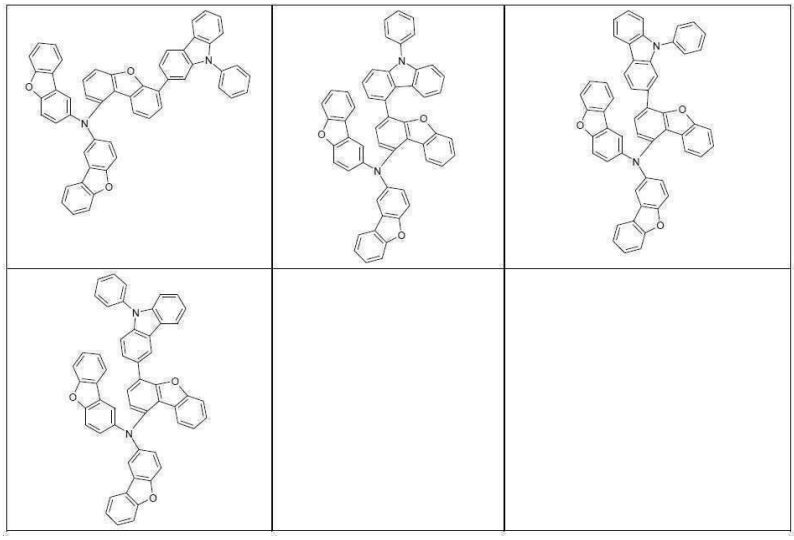
[0224]



[0225]



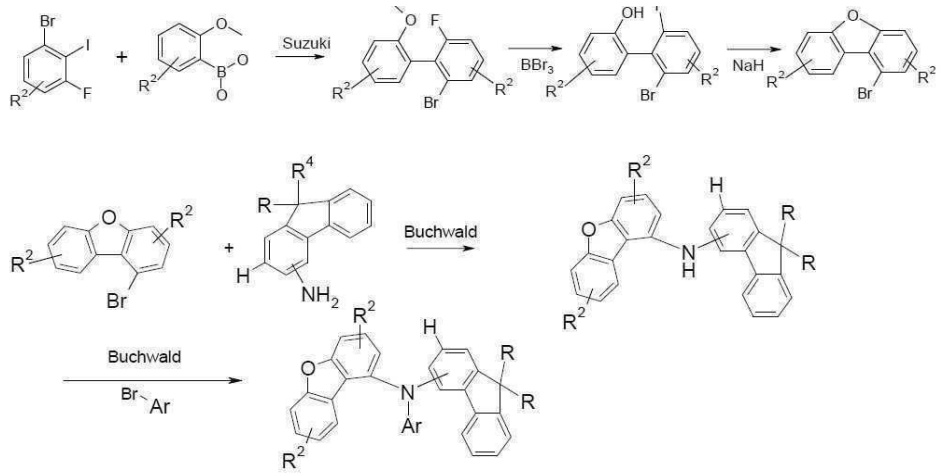
[0226]



[0227] 본 발명의 화합물은 당업자에게 공지된 합성 단계, 예를 들어 브롬화, 스즈끼 (Suzuki) 커플링, 울만 (Ullmann) 커플링, 하르트비그-부크발트 (Hartwig-Buchwald) 커플링 등에 의해 제조될 수 있다. 적합한 합성 방법은

하기 도식 1에 일반적으로 나타나 있다:

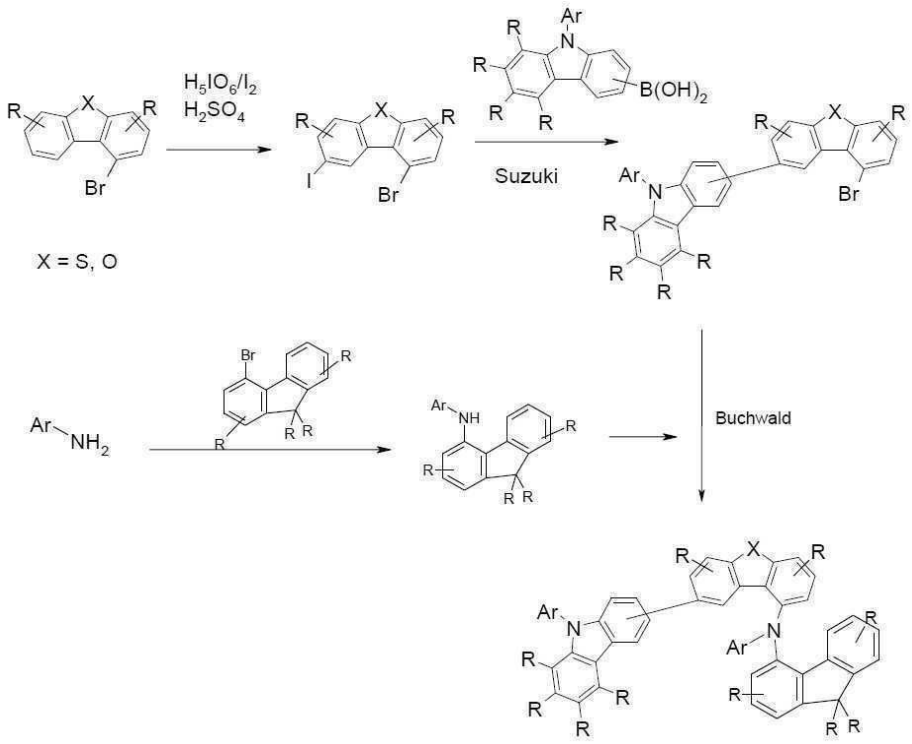
[0228] 도식 1



[0229]

[0230] 화학식 (2)의 화합물은 하기 도식 (2)에 따라서 수득할 수 있다:

[0231] 도식 2



[0232]

[0233] 이 도식에서, R은 화학식 (1) 또는 (2)에 따라 R, R^1, R^2 또는 R^3이다. 플루오렌 유도체보다는, 디벤조퓨란 유도체 또는 디벤조티오펜 유도체를 사용할 수도 있다.

[0234] 본 발명의 화합물을 액체상으로부터, 예를 들어 스핀-코팅 또는 프린팅 방법에 의해 가공하기 위해, 본 발명의 화합물의 제형이 요구된다. 이러한 제형은 예를 들어 용액, 분산액 또는 유화액일 수 있다. 이 목적을 위해, 두 개 이상의 용매의 혼합물을 사용하는 것이 바람직할 수 있다. 적합한 및 바람직한 용매는, 예를 들어, 톨루엔, 아니솔, o-, m- 또는 p-크실렌, 메틸 벤조에이트, 메시틸렌, 테트랄린, 베라트롤, THF, 메틸-THF, THP, 클로로벤젠, 디옥산, 페녹시톨루엔, 특히 3-페녹시톨루엔, (-)-펜촌, 1,2,3,5-테트라메틸벤젠, 1,2,4,5-테트라메틸벤젠, 1-메틸나프탈렌, 2-메틸벤조티아졸, 2-페녹시에탄올, 2-피롤리디논, 3-메틸아니솔, 4-메틸아니솔, 3,4-디메틸아니솔, 3,5-디메틸아니솔, 아세토페논, α-테르피네올, 벤조티아졸, 부틸 벤조에이트, 쿠멘, 시클로헥산올, 시클로헥사논, 시클로헥실벤젠, 데칼린, 도데실벤젠, 에틸 벤조에이트, 인단, 메틸 벤조에

이트, NMP, p-시멘, 페네톨, 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, 헥사메틸인단 또는 이들 용매의 혼합물이 있다.

[0235] 따라서, 본 발명은 본 발명의 화합물 및 적어도 하나의 추가의 화합물을 포함하는 제형을 제공한다. 추가 화합물은, 예를 들어 용매, 특히 상기 언급된 용매 중 하나 또는 이들 용매의 혼합물일 수 있다. 추가의 화합물은 다르게는, 예를 들어 발광 화합물, 특히 인광 도펀트 및/또는 추가의 매트릭스 재료와 같은 전자 장치에서 마찬가지로 사용되는 적어도 하나의 추가의 유기 또는 무기 화합물일 수 있다. 적합한 발광 화합물 및 추가의 매트릭스 재료는 유기 전계 발광 장치와 관련하여 뒤에서 열거된다. 이 추가 화합물은 또한 중합체성일 수 있다.

[0236] 본 발명의 화합물 및 혼합물은 전자 장치에서의 사용에 적합하다. 전자 장치는 적어도 하나의 유기 화합물을 함유하는 적어도 하나의 층을 함유하는 장치를 의미하는 것으로 이해된다. 이 성분은 또한 무기 재료 또는 무기 재료로 완전히 형성된 층을 포함할 수 있다.

[0237] 따라서, 본 발명은 전자 장치, 특히 유기 전계 발광 장치에서의 본 발명의 화합물 또는 혼합물의 용도를 제공한다.

[0238] 본 발명은 또한 상기 상술한 적어도 하나의 화합물 또는 본 발명의 혼합물을 포함하는 전자 장치를 추가로 제공한다. 이 경우, 화합물에 대해 상기 상술한 선호도는 전자 장치에도 적용된다.

[0239] 전자 장치는 바람직하게는 하기로 이루어진 군으로부터 선택된다: 유기 전계 발광 장치 (OLED, PLED), 유기 집적 회로 (O-IC), 유기 전기 효과 트랜지스터 (O-FET), 유기 박막 트랜지스터 (O-TFT), 유기 발광 트랜지스터 (O-LETs), 유기 태양 전지 (O-SCs), 유기 염료 감응형 태양 전지, 유기 광 검출기, 유기 감광체, 유기 필드 켄치 장치 (O-FQDs), 발광 전기 화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-lasers) 및 유기 플라즈몬 방출 장치, 바람직하게는 유기 전계 발광 장치 (OLED, PLED), 특히 인광성 OLED.

[0240] 유기 전계 발광 장치는 캐소드, 애노드 및 적어도 하나의 발광층을 포함한다. 이들 층과는 별도로, 예를 들어 각각 하나 이상의 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 차단층, 전자 수송층, 전자 주입층, 엑시톤 차단층, 전자 차단층 및/또는 전하 생성층을 포함할 수 있다. 마찬가지로, 예를 들어, 엑시톤 차단 기능을 갖는 중간층이 두 개의 발광층 사이에 도입될 수 있다. 그러나, 반드시 이들 층의 모든 것이 존재할 필요는 없다는 점을 지적해야 한다. 이 경우, 유기 전계 발광 소자는 발광층을 포함하거나, 또는 복수의 발광층을 포함할 수 있다. 복수의 발광층이 존재하는 경우, 이들은 전체 결과가 백색 방출이 되도록 전체적으로 380 nm와 750 nm 사이의 몇몇 발광 최대값을 갖는 것이 바람직하고; 즉, 형광 또는 인광을 일으킬 수 있는 다양한 발광 화합물이 발광층에 사용된다. 본 발명의 하나의 구현예는 3 개의 발광층을 갖는 시스템에 관한 것으로, 3 개의 층은 청색, 녹색 및 주황색 또는 적색 방출을 나타낸다. 이들은 형광 또는 인광 방출층 또는 형광 및 인광 방출층이 서로 결합된 하이브리드 시스템일 수 있다. 본 발명의 추가의 구현예는 직렬형 OLED에 관한 것이다. 백색 발광 전계 발광 장치는, 예를 들어 조명 용도로 사용될 수 있을 뿐만 아니라, 풀컬러 디스플레이용 컬러 필터와 조합하여 사용될 수 있다.

[0241] 상기 상세한 구현예에 따른 본 발명의 화합물은 정확한 구조에 따라 상이한 층에 사용될 수 있다. 형광 또는 인광 이미터 또는 TADF (thermally activated delayed fluorescence)를 나타내는 이미터를 위한, 특히 인광 이미터를 위한 매트릭스 재료로서, 및/또는 정확한 치환에 따라, 전자 수송층 및/또는 전자 차단 또는 액시톤 차단층 및/또는 정공 수송층 및/또는 정공 주입층에서, 화학식 (1)의 화합물 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 장치가 바람직하다. 이 문맥에서, 상기 상세한 바람직한 구현예는 유기 전자 장치에서의 재료의 사용에도 적용된다.

[0242] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 화학식 (1)의 화합물 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물은 형광 또는 인광 화합물, 특히 인광 화합물의 매트릭스 재료로서 발광층에서 사용된다. 이 경우, 유기 전계 발광 소자는 발광층을 포함하거나, 적어도 하나의 발광층이 적어도 하나의 본 발명의 화합물을 매트릭스 재료로서 함유하는 복수의 발광층을 포함할 수 있다.

[0243] 화학식 (1)의 화합물 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물을 발광층의 발광 화합물의 매트릭스 재료로서 사용하는 경우, 바람직하게는 하나 이상의 인광 재료 (삼중 이미터)와 조합하여 사용된다. 본 발명의 문맥에서의

인광은 스핀 다중도 > 1 를 갖는 들뜬 상태로부터의, 특히 들뜬 삼중 상태로부터의 발광을 의미하는 것으로 이해된다. 본 출원의 문맥에서, 모든 발광 전이 금속 착물 및 발광 란타니드 착물, 특히 모든 이리듐, 백금 및 구리 착물은 인광성 화합물로 간주되어야 한다.

[0244] 화학식 (1)의 화합물 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물 및 발광 화합물의 혼합물은 이미터 및 매트릭스 재료의 전체 혼합물에 대해, 99 내지 1 부피%, 바람직하게는 98 내지 10 부피%, 더욱 바람직하게는 97 내지 60 부피%, 특히 95 내지 80 부피%의 화학식 (1)의 화합물 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물을 함유한다. 상응하여, 혼합물은 이미터와 매트릭스 재료의 전체 혼합물에 대해, 1 내지 99 부피%, 바람직하게는 2 내지 90 부피%, 더욱 바람직하게는 3 내지 40 부피%, 특히 5 내지 20 부피%의 이미터를 함유한다. 화합물이 용액으로부터 가공되는 경우, 부피%로 상기 명시된 양보다는 중량% 기준으로 상응하는 양을 사용하는 것이 바람직하다.

[0245] 적합한 인광 화합물 (=삼중 이미터)은 적절하게 들뜰 경우, 바람직하게는 가시 영역에서 광을 방출하고, 또한 20 초과의, 바람직하게는 38 초과 84 미만의, 더욱 바람직하게는 56 초과 80 미만의 원자번호를 갖는 적어도 하나의 원자, 특히 이 원자 번호를 갖는 금속을 함유한다. 바람직한 인광 이미터는 구리, 몰리브덴, 텅스텐, 레늄, 루테늄, 오스뮴, 로듐, 이리듐, 팔라듐, 백금, 은, 금 또는 유로퓸를 함유하는 화합물, 특히 이리듐 또는 백금을 함유하는 화합물이다. 본 발명의 문맥에서, 상기 언급된 금속을 함유하는 모든 발광 화합물은 인광 화합물로 간주된다.

[0246] 상기 기술한 이미터의 예는 하기 출원에서 발견될 수 있다: 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 및 WO 2016/124304. 일반적으로, 종래 기술에 따른 인광 OLED에 사용되고, 유기 전계 발광의 분야에서 당업자에게 공지된 모든 인광 착물이 적합하며, 당업자는 진보성 없이 추가의 인광 착물을 사용할 수 있다.

[0247] 본 발명의 추가의 바람직한 구현예는 추가의 매트릭스 재료와 조합된 인광 이미터에 대한 매트릭스 재료로서의 화학식 (1)의 화합물 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물의 용도이다. 본 발명의 바람직한 구현예에서, 추가의 매트릭스 재료는 정공 수송 화합물이다. 본 발명의 추가의 바람직한 구현예에서, 추가의 매트릭스 재료는 전자 수송 화합물이다. 또 다른 바람직한 구현예에서, 추가의 매트릭스 재료는 층 내의 정공 및 전자 수송에 상당한 정도로 관여하지 않는 큰 밴드 갭을 갖는 화합물이다.

[0248] 화학식 (1)의 화합물 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물과 조합으로 사용될 수 있는 적합한 매트릭스 재료는 방향족 케톤, 방향족 포스핀 옥사이드 또는 방향족 설폭시드 또는 설폰, 예를 들어 WO 2004/013080, WO 2004/093207, WO 2006/005627 또는 WO 2010/006680에 따름, 트리아릴아민, 특히 모노아민, 예를 들어 WO 2014/015935에 따름, 카바졸 유도체, 예를 들어 WO 2005/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527 또는 WO 2008/086851에 개시된 CBP (N,N-비스카바졸릴비페닐) 또는 카바졸 유도체, 예를 들어 WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746에 따른 인돌로카바졸 유도체, 예를 들어 WO 2010/136109 및 WO 2011/000455에 따른 인데노카바졸 유도체, 예를 들어 EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160에 따른 아자카바졸 유도체, 예를 들어 WO 2007/137725에 따른 양극성 매트릭스 재료, 예를 들어 WO 2005/111172에 따른 실란, WO 2006/117052에 따른 아자보롤 또는 보로닉 에스테르, 예를 들어 WO 2010/015306, WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746에 따른 트리아진 유도체, EP 652273 또는 WO 2009/062578에 따른 아연 착물, 예를 들어 WO 2010/054729에 따른 디아자실롤 또는 테트라아자실롤 유도체, 예를 들어 WO 2010/054730에 따른 디아자포스폴 유도체, 예를 들어 US 2009/0136779, WO 2010/050778, WO 2011/042107, WO 2011/088877 또는 WO 2012/143080에 따른 가교 카바졸 유도체, 예를 들어 WO 2012/048781에 따른 트리페닐렌 유도체, 예를 들어 WO 2011/116865, WO 2011/137951 또는 WO 2013/064206에 따른 락탐, 또는 예를 들어 WO 2014/094963 또는 WO 2015/192939에 따른 4-스피로카바졸 유도체가 있다. 실제 이미터보다 짧은 파장에서 방출하는 추가의 인광 이미터가 혼합물에서 공동 호스트로서 존재할 수도 있다.

[0249] 바람직한 공동 호스트 재료는 트리아릴아민 유도체, 특히 모노아민, 인데노카바졸 유도체, 4-스피로카바졸 유도체, 락탐 및 카바졸 유도체이다.

[0250] 본 발명의 추가의 구현예에서, 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 별개의 정공 주입층 및/또는 정공 수송층 및/또는 정공 차단층 및/또는 전자 수송층을 전혀 함유하지 않으며, 이는 발광층이 직접적으로 정공 주입층 또는

애노드에 인접하는 것, 및/또는 발광층이 예를 들어 WO 2005/053051에 기술된 바와 같이 전자 수송층 또는 전자 주입층 또는 캐소드에 직접적으로 인접하는 것을 의미한다. 또한, 예를 들어 WO 2009/030981에 기술된 바와 같이, 발광층에 금속 착물과 동일하거나 유사한 금속 착물을 직접적으로 발광층에 인접한 정공 수송 또는 정공 주입 물질로서 사용할 수 있다.

[0251] 또한, 정공 수송 또는 전자 차단층에서 본 발명의 화합물을 사용할 수 있다.

[0252] 본 발명의 유기 전계 발광 장치의 추가의 층에서, 종래 기술에 따라 통상적으로 사용되는 임의의 재료를 사용할 수 있다. 따라서 당업자는 본 발명의 화학식 (1)의 화합물 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물과 조합하여 유기 전계 발광 소자에 대해 공지된 임의의 재료를 진보성 없이 사용할 수 있다.

[0253] 또한, 하나 이상의 층이 승화 공정에 의해 코팅되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 장치가 바람직하다. 이 경우, 재료는 10^{-5} mbar 미만, 바람직하게는 10^{-6} mbar 미만의 초기 압력에서 진공 승화 시스템의 기상 증착에 의해 적용된다. 또한 초기 압력이 더 낮거나 높을 수도 있다 (예를 들어 10^{-7} mbar 미만).

[0254] 마찬가지로, 하나 이상의 층이 OVPD (organic vapour phase deposition) 방법에 의해 또는 캐리어 가스 승화의 도움으로 코팅되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 장치가 바람직하다. 이 경우, 재료는 10^{-5} mbar와 1 bar 사이의 압력에서 적용된다. 이 방법의 특별한 경우는 재료가 노즐에 직접 적용되어 구조화된 OVJP (organic vapour jet printing) 방법이다 (예를 들어, M. S. Arnold *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **2008**, *92*, 053301).

[0255] 하나 이상의 층이 용액으로부터, 예를 들어 스핀-코팅에 의해, 또는 임의의 프린팅 방법, 예를 들어 잉크젯 프린팅, LITI (light-induced thermal imaging, thermal transfer printing), 스크린 프린팅, 플렉소그래픽 프린팅, 오프셋 프린팅 또는 노즐 프린팅에 의해 제조되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 장치가 추가로 제공된다. 이 목적을 위해, 예를 들어 적합한 치환을 통해 수득되는 수용성 화합물이 필요하다.

[0256] 본 발명의 화합물은 특히 용액 중에서, 특히 통상적으로 사용되는 디아민과 비교하여 개선된 산화 안정성을 갖는다. 이것은 특히 프린팅 방법에서 중요하다. 본 발명의 화합물은 또한 높은 열 안정성을 특징으로 하며, 따라서 이들은 고진공 하에서 분해되지 않고 증발될 수 있다. 열적 안정성은 또한 화합물의 작동 수명을 증가시킨다.

[0257] 또한, 하이브리드 방법이 가능하며, 예를 들어 하나 이상의 층이 용액으로부터 적용되고 하나 이상의 추가의 층이 진공 증착에 의해 적용된다. 예를 들면, 용액으로부터 발광층을 적용하고 전자 수송층을 진공 증착에 의해 적용하는 것이 가능하다.

[0258] 이들 방법은 일반적으로 당업자에게 공지되어 있으며, 당업자는 본 발명의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 장치에 대해 진보성 없이 적용할 수 있다.

[0259] 본 발명의 화합물은 일반적으로 유기 전계 발광 장치에서 사용시 매우 우수한 특성을 갖는다. 특히, 유기 전계 발광 장치에서 본 발명의 화합물을 사용하는 경우, 수명은 종래 기술에 따른 유사한 화합물에 비해 상당히 우수하다. 동시에, 유기 전계 발광 장치의 추가 특성, 특히 효율 및 전압은 마찬가지로 우수하거나 적어도 비교 가능하다.

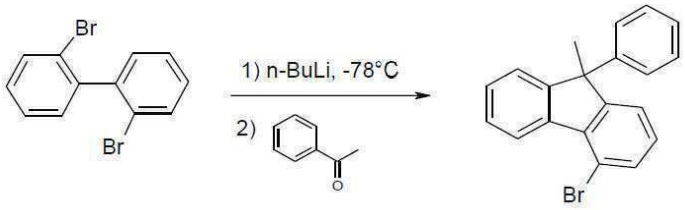
[0260] 이제 본 발명을 하기 실시예에 의해 상세히 예시하는데, 본 발명은 이에 제한되지 않는다.

[0261] **실시예**

[0262] 달리 기재되지 않는 한, 하기 합성은 건조된 용매 중에서 보호 가스 대기 하에서 수행된다. 용매 및 시약은, 예를 들어, Sigma-ALDRICH 또는 ABCR에서 구입할 수 있다. 문헌으로부터 공지된 화합물에 대해서도, 각각의 경우에 상응하는 CAS 번호가 보고된다.

[0263] **합성예**

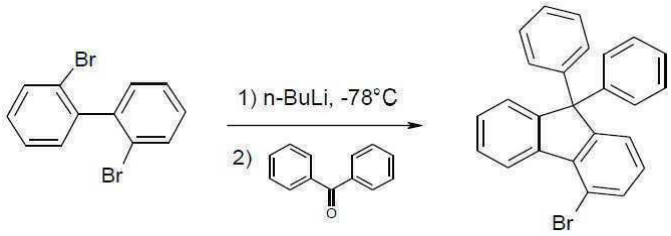
[0264] a) 4-브로모-9-메틸-9-페닐-9H-플루오렌



[0265]

[0266] 2,2'-디브로모비페닐 30 g (94 mmol)을 베이크드-아웃(baked-out) 처리된 플라스크 속의 건조된 THF 200 ml 에 용해시킨다. 반응 혼합물을 -78 ℃로 냉각시킨다. 이 온도에서, 헥산 중 n-부틸리튬 (94 mmol)의 2.5 M 용액 37.7 ml를 (약 1 시간에 걸쳐서) 서서히 적가한다. 혼합물을 -70 ℃에서 추가로 1 시간 동안 교반한다. 이어서, 아세토페논 11.1 ml (94mmol)을 THF 100 ml에 용해시키고 -70 ℃에서 적가한다. 첨가가 종료된 후, 반응 혼합물을 서서히 실온으로 가온시키고, NH_4Cl 로 급냉시킨 후 회전 증발기에서 농축시킨다. 농축액에 아세트산 300 ml를 신중하게 첨가한 다음 발연성 HCl 50 ml를 첨가한다. 혼합물을 6 시간 동안 75 ℃로 가열한다. 이 시간 동안, 백색 고체가 침전된다. 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 침전된 고체를 흡입 여과하고 메탄올로 세척하였다. 잔류물을 감압 하에 40 ℃에서 건조시킨다. 수율은 25.3 g (75 mmol) (이론치의 80 %)이다.

[0267] b) 4-브로모-9,9-디페닐-9H-플루오렌

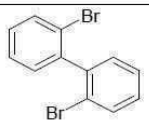
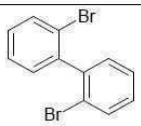
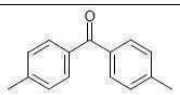


[0268]

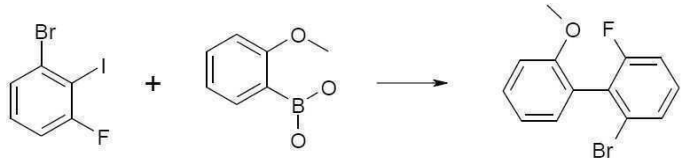
[0269] 2,2'-디브로모비페닐 37 g (152 mmol)을 베이크드-아웃 처리된 플라스크 속의 건조된 THF 300 ml 에 용해시킨다. 반응 혼합물을 -78 ℃로 냉각시킨다. 이 온도에서, 헥산 중 n-부틸리튬 (119 mmol)의 15 % 용액 75 ml를 (약 1 시간에 걸쳐서) 서서히 적가한다. 혼합물을 -70 ℃에서 추가로 1 시간 동안 교반한다. 이어서, 벤조페논 21.8 g (119 mmol)을 THF 100 ml에 용해시키고 -70 ℃에서 적가한다. 첨가가 종료된 후, 반응 혼합물을 서서히 실온으로 가온시키고, NH_4Cl 로 급냉시킨 후 회전 증발기에서 농축시킨다. 농축액에 아세트산 510 ml를 신중하게 첨가한 다음 발연성 HCl 100 ml를 첨가한다. 혼합물을 4 시간 동안 75 ℃로 가열한다. 이 시간 동안, 백색 고체가 침전된다. 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 침전된 고체를 흡입 여과하고 메탄올로 세척하였다. 잔류물을 감압 하에 40 ℃에서 건조시킨다. 수율은 33.2 g (83 mmol) (이론치의 70 %)이다.

[0270] 유사한 방식으로, 하기 브롬화 화합물이 제조된다:

[0271]

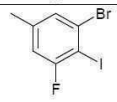
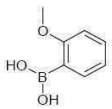
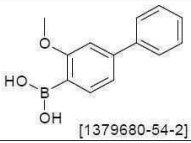
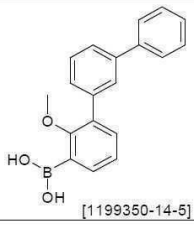
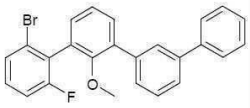
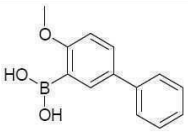
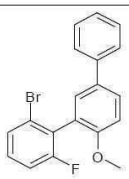
	반응물 1	반응물 2	생성물	수율
b1				78%
b2				70%
b3				82%

[0272] c) 6-브로모-2-플루오로-2'-메톡시비페닐

[0273] 

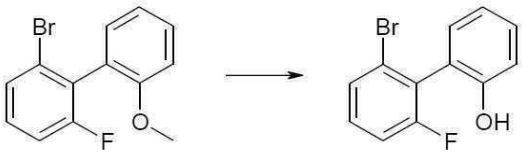
[0274] 1-브로모-3-플루오로-2-아이오도벤젠 200 g (664 mmol), 2-메톡시페닐보론산 101 g (664 mmol) 및 테트라보레이트 소디움 137.5 g (997 mmol)을 THF 1000 ml 및 물 600 ml 에 용해시킨 다음, 가스 제거하였다. 비스(트리페닐포스핀)팔라듐(II)클로라이드 9.3 g (13.3 mmol) 및 히드라지늄 히드록시드 1 g (20 mmol)을 첨가하였다. 이어서, 반응 혼합물을 보호 기체 대기 하에 70 ℃에서 48 시간 동안 교반하였다. 냉각된 용액에 톨루엔을 보충하고, 물로 반복해서 세척하고, 건조 및 농축시켰다. 생성물을 톨루엔/헵탄 (1:2)을 사용하여 실리카겔 상에서 컬럼 크로마토그래피로 정제하였다. 수율 : 155 g (553 mmol), 이론치의 83 %.

[0275] 하기 화합물을 유사한 방식으로 제조하였다:

	반응물 1	반응물 2	생성물	수율
c1	 [1000576-09-9]			77%
c2		 [1379680-54-2]		74%
c3		 [1199350-14-5]		76%
c3		 [1114496-44-4]		71%

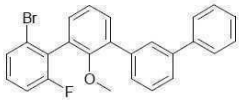
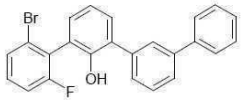
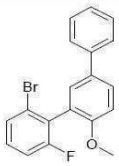
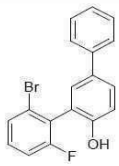
[0276]

[0277] d) 6'-브로모-2'-플루오로비페닐-2-올

[0278] 

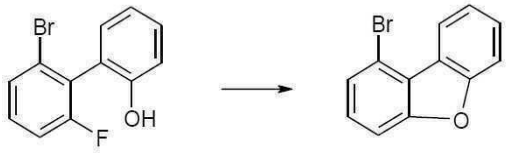
[0279] 6-브로모-2-플루오로-2'-메톡시비페닐 112 g (418 mmol)을 디클로로메탄 2 l에 용해시키고, 5 ℃로 냉각시킨다. 보론 트리브로미드 41.0 ml (431 mmol)을 이 용액에 90 분 내에 적가하고, 혼합물을 밤새 교반시킨다. 이어서, 혼합물을 물로 서서히 혼합하고, 유기 상을 물로 3 회 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 회전 증발로 농축시키고, 크로마토그래피로 정제한다. 수율: 104 g (397 mmol), 이론치의 98 %.

[0280] 하기 화합물을 유사한 방식으로 제조하였다:

	반응물 1	생성물	수율
d1			92%
d2			90%
d3			93%
d4			94%

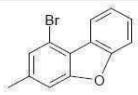
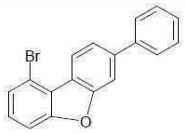
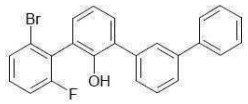
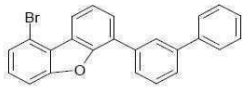
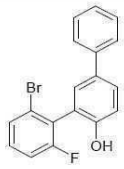
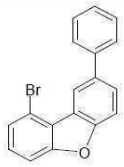
[0281]

[0282] **e) 1-브로모디벤조퓨란**

[0283] 

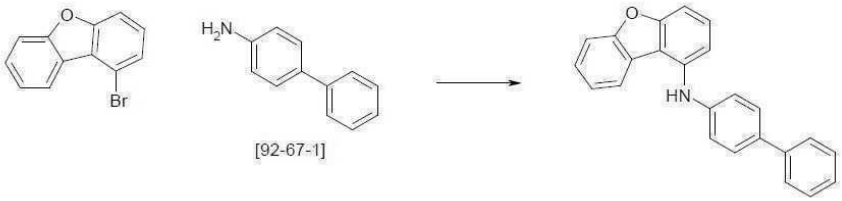
[0284] 6'-브로모-2'-플루오로비페닐-2-올 111 g (416 mmol)을 DMF (최대 0.003 % H_2O) SeccoSolv® 2 l에 용해시키고 5 ℃로 냉각시켰다. 소디움 히드라이드 (파라핀 오일 중 60 % 현탁액) 20 g (449 mmol)을 조금씩 이 용액에 첨가하고, 일단 첨가가 끝나면 혼합물을 20 분 동안 교반한 후, 혼합물을 100 ℃로 45 분 동안 가열한다. 냉각 후, 에탄올 500 ml를 상기 혼합물에 서서히 첨가하고, 이를 회전 증발에 의해 농축시킨 다음, 크로마토그래피로 정제하였다. 수율 : 90 g (367 mmol), 이론치의 88.5 %.

[0285] 하기 화합물을 유사한 방식으로 제조하였다:

	반응물 1	생성물	수율
e1			81%
e2			78%
e3			73%
I4			79%

[0286]

[0287] **f) 비페닐-4-일디벤조퓨란-1-일아민**

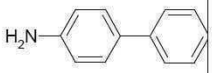
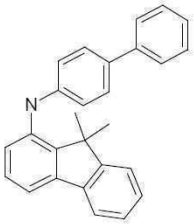
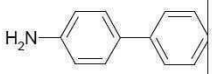
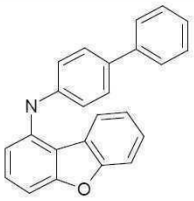
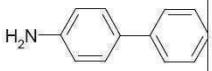
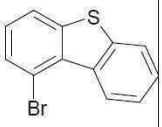
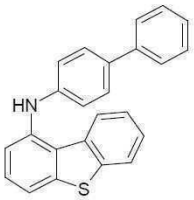


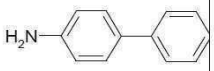
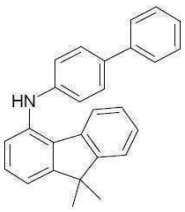
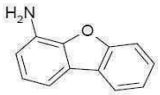
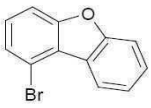
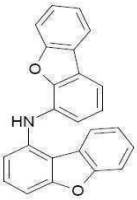
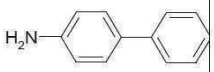
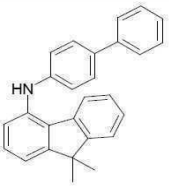
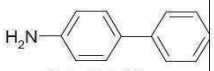
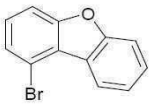
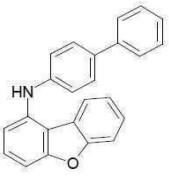
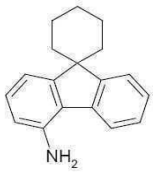
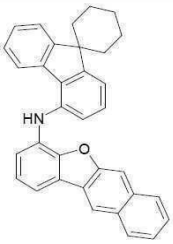
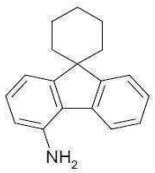
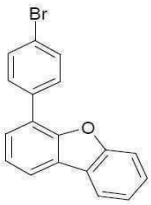
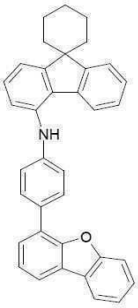
[0288]

[0289] 1-브로모디벤조퓨란 43.7g (177 mmol, 1.0 당량) 및 소디움 *터트*-펜톡시드 [14593-46-5] 2.4 g (212 mmol, 1.20 당량)과 함께 4-아미노비페닐 30.0 g (177 mmol, 1.0 당량)을 무수 톨루엔 600 ml에 처음에 채우고 30 분 동안 가스 제거시켰다. 이어서, 팔라듐 (II) 아세테이트 [3375-31-3] 398 mg (1.77 mmol, 0.01 당량) 및 2-디시클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시비페닐 SPHOS [657408-07-6] 1.46 g (3.56 mmol, 0.02 당량) 을 첨가하고 혼합물을 환류 하에 밤새 가열하였다. 반응이 종결된 후, 혼합물을 실온으로 냉각시키고 500 ml의 물로 추출하였다. 이어서, 수성 상을 톨루엔으로 3 회 세척하고, 조합한 유기상을 황산나트륨 상에서 건조시키고, 용매를 회전 증발기 상에서 제거하였다. 갈색 잔류물을 톨루엔 약 200 ml에 용해시키고 실리카겔로 여과하였다. 추가의 정제를 위해, 톨루엔/헵탄으로부터의 재결정화가 수행된다. 수율: 44 g (133 mmol), 이론치의 76 %.

[0290] 하기 화합물을 유사한 방식으로 제조하였다:

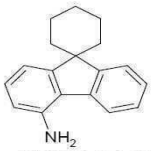
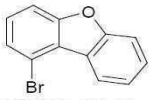
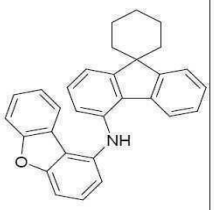
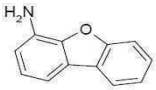
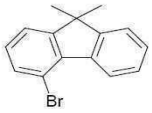
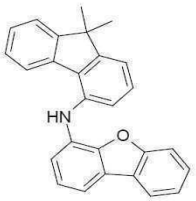
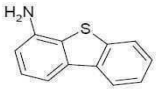
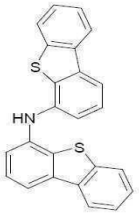
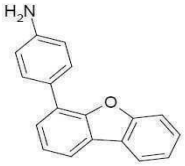
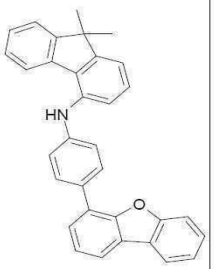
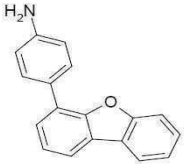
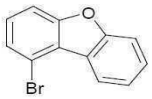
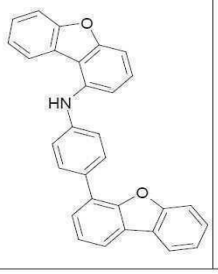
[0291]

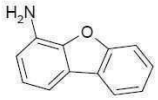
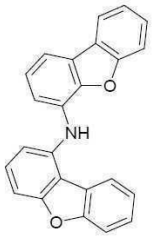
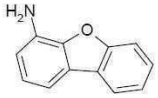
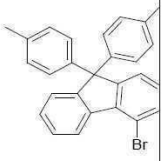
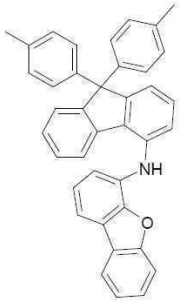
	반응물 **1**	반응물 **2**	생성물 3	수율 **[%]**
f1	 [92-67-1]	 [89827-45-2]		45
f2	 [92-67-1]	 [50548-45-3]		61
f3	 [92-67-1]	 [65642-94-6]		68

f4	 [92-67-1]	 [942615-32-9]		34
f5	 [50548-43-1]	 [50548-45-3]		73
f6	 [92-67-1]	 [942615-32-9]		51
f7	 [92-67-1]	 [50548-45-3]		65
f8	 [18998-24-8]	 [1642127-11-4]		81
f9	 [18998-24-8]	 [1225053-54-2]		62

[0292]

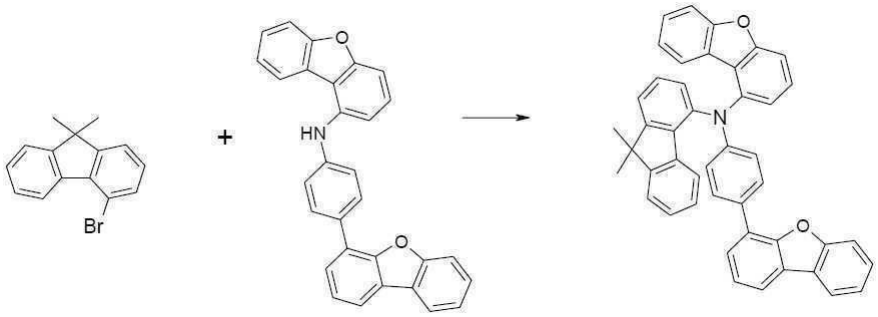
[0293]

f10	 [18998-24-8]	 [50548-45-3]		43
f11	 [50548-43-1]	 [942615-32-9]		34
f12	 [72433-66-0]	 [942615-32-9]		55
f13	 [578027-21-1]	 [942615-32-9]		62
f14	 [578027-21-1]	 [50548-45-3]		70

f15	 [50548-43-1]	 [50548-45-3]		77
f16	 [50548-43-1]			75

[0294]

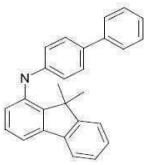
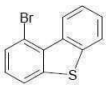
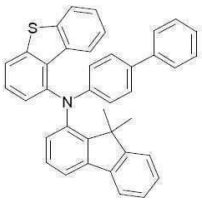
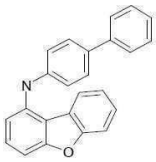
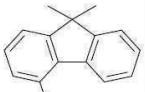
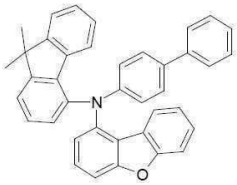
[0295] **g) 디벤조퓨란-1-일-(4-디벤조퓨란-4-일페닐)-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-4-일)아민**



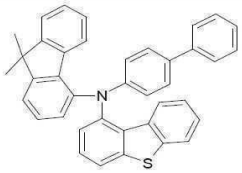
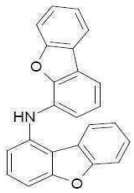
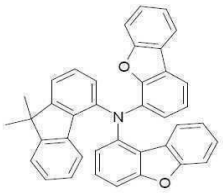
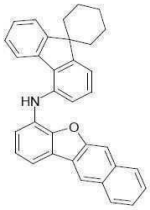
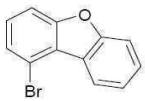
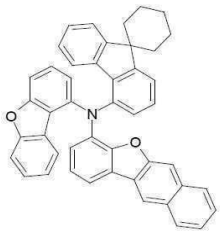
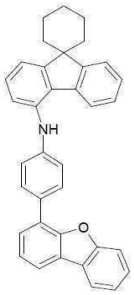
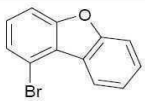
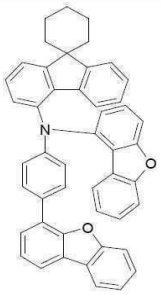
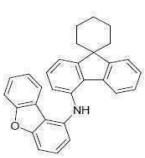
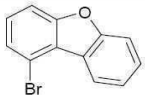
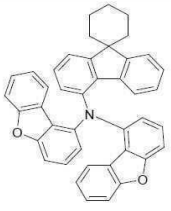
[0296]

[0297] 4-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌 13.6 g (50 mmol), 디벤조퓨란-1-일-(4-디벤조퓨란-4-일페닐)아민 25.5 g (60 mmol), 소디움 터트-부톡시드 7.7 g (80 mmol), 트리시클로헥실아민 1.4 g (5 mmol), 팔라듐 (II) 아세테이트 561 mg (2.5 mmol) 및 메시틸렌 300 ml의 혼합물을 환류 하에 24 시간 동안 가열하였다. 냉각 후, 물 200 ml를 첨가하고, 혼합물을 추가로 30 분 동안 교반하고, 유기 상을 제거하고, 후자를 쇼트 Celite 베드를 통해 여과한 다음, 용매를 감압 하에 제거하였다. 잔류물을 DMF로부터 5 회 재결정하고 최종적으로 2 회 분별 승화시켰다 (p 약 10^{-6} mbar, T = 340-350 ℃). 수율: 23 g (37 mmol), 이론치의 75 % : HPLC에 의한 99.9 %.

[0298] 유사한 방식으로, 하기 화합물을 수득한다:

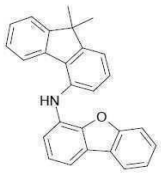
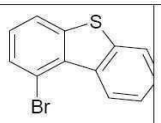
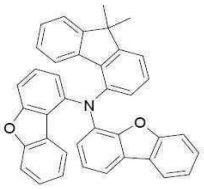
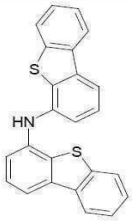
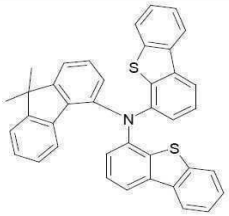
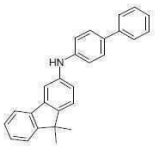
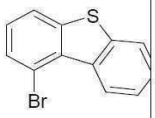
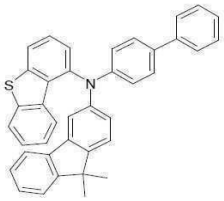
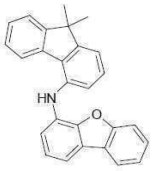
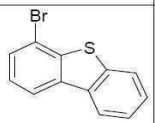
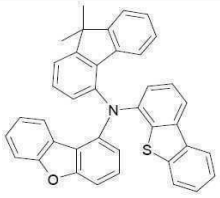
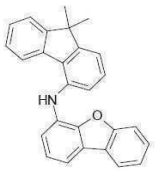
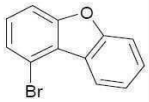
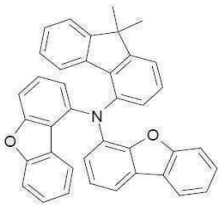
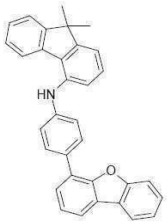
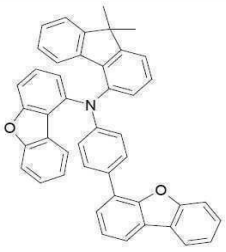
실시예	반응물 1	반응물 2	생성물	수율 [%]
g1		 [65642-94-6]		69
g2		 [942615-32-9]		72

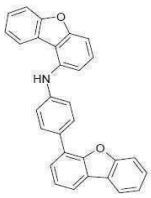
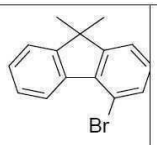
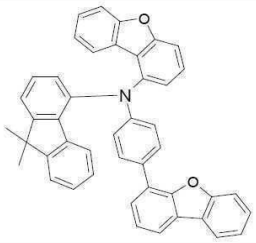
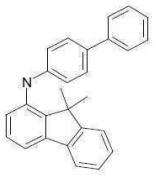
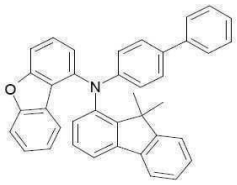
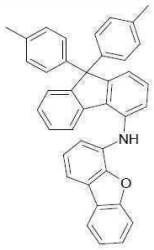
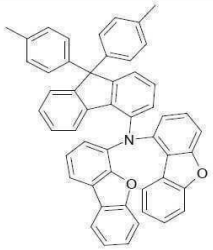
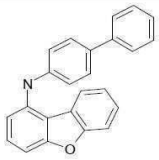
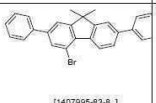
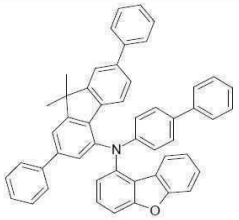
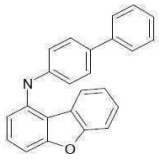
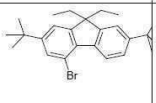
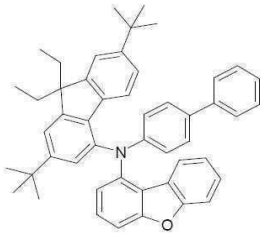
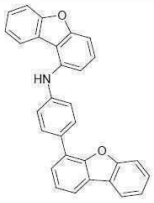
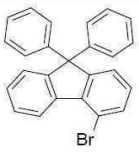
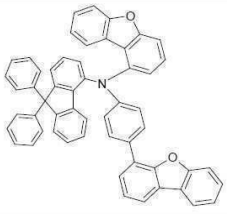
[0299]

g3		 [942615-32-9]		71
g4		 [942615-32-9]		69
g5		 [50548-45-3]		74
g6		 [50548-45-3]		75
g7		 [50548-45-3]		72

[0300]

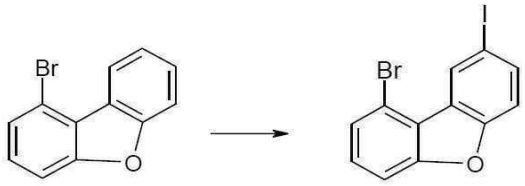
[0301]

g8		 [65642-94-6]		70
g9		 [942615-32-9]		71
g11		 [65642-94-6]		68
g12		 [97511-05-2]		75
g15		 [50548-45-3]		63
g16		 [50548-45-3]		73

g17				72
g18		 [50548-45-3]		77
g19		 [50548-45-3]		72
g20				63
g21		 [942615-28-3]		67
g22		 [713125-22-5]		60

[0302]

[0303] h) 1-브로모-8-아이오도디벤조퓨란

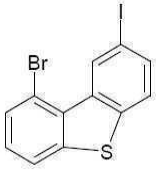


[0304]

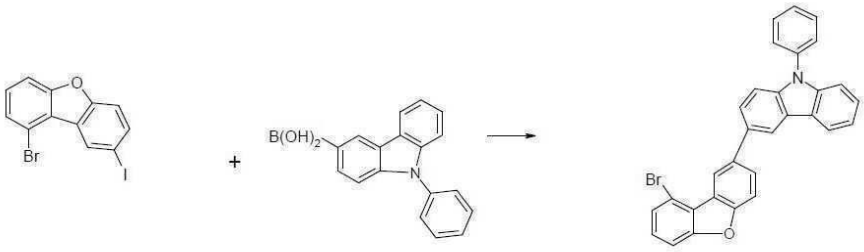
[0305] 디벤조퓨란-1-보론산 20 g (80 mmol), 요오드 2.06 g (40.1 mmol), 요오드산 3.13 g (17.8 mmol), 아세트산 80 ml 및 황산 5 ml 및 물 5 ml 및 클로로포름 2 ml를 65 ℃에서 3 시간 동안 교반하였다. 냉각 후, 혼합물을 물과 혼합하고, 침전된 고체를 흡입 여과해내고 물로 3 회 세척하였다. 잔류물을 톨루엔 및 디클로로메탄/헵탄으로부터 재결정화하였다. 수율은 이론치의 85 %에 상응하는 25.6 g (68 mmol)이다.

[0306] 하기 화합물을 유사한 방식으로 제조하였다:

[0307]

	반응물 1	생성물	수율
h1	 [65642-94-6]		81%
h2			67%

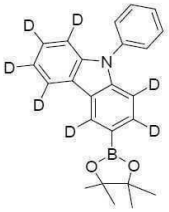
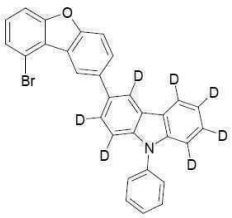
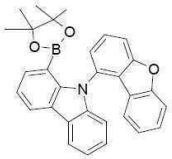
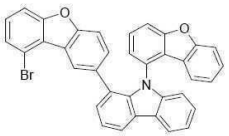
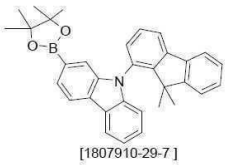
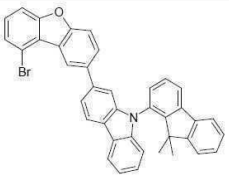
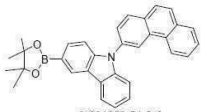
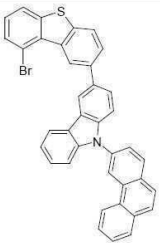
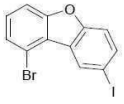
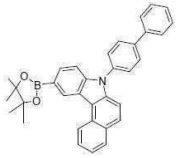
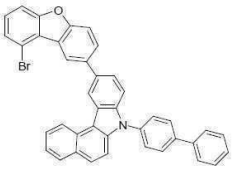
[0308] **i) 3-(9-브로모디벤조퓨란-2-일)-9-페닐-9H-카바졸**



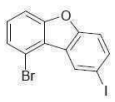
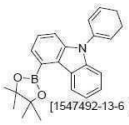
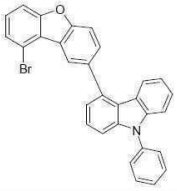
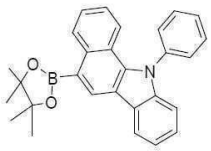
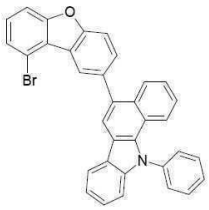
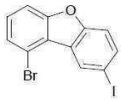
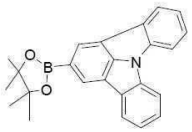
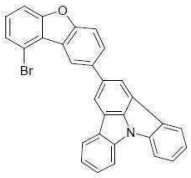
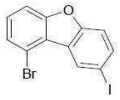
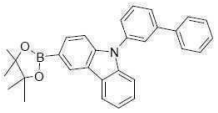
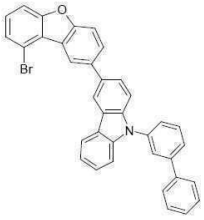
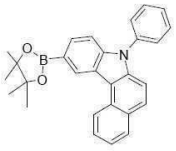
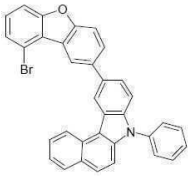
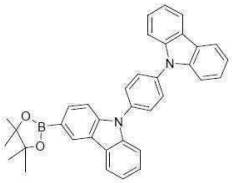
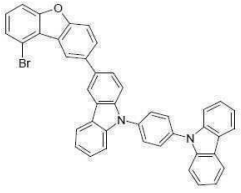
[0309]

[0310] 1-브로모-8-아이오도디벤조퓨란 58 g (156 mmol), N-페닐카바졸-3-보론산 50 g (172 mmol) 및 소디움 카보네이트 36 g (340 mmol)을 에틸렌 글리콜 디메틸 에테르 1000 ml 및 물 280 ml 에 현탁시켰다. 이 현탁액에 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) 1.8 g (1.5 mmol)을 첨가하고, 반응 혼합물을 환류 하에 16 시간 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 유기상을 제거하고, 실리카겔을 통해 여과하고, 물 200 ml로 3 회 세척한 다음, 농축 건조시켰다. 수율은 이론치의 64 %에 상응하는 48 g (89 mmol)이다.

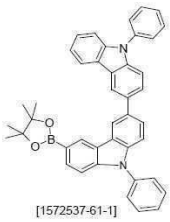
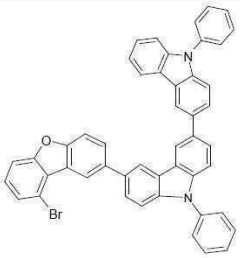
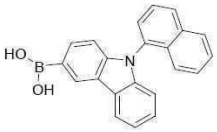
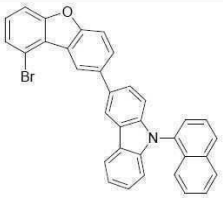
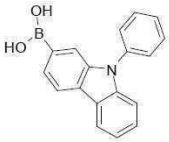
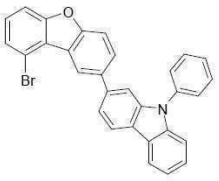
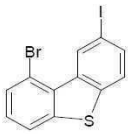
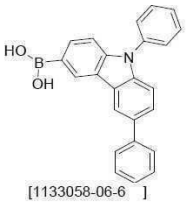
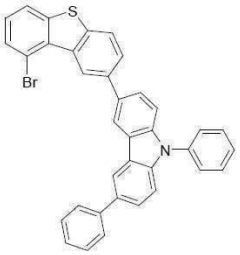
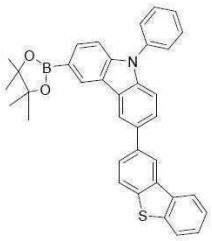
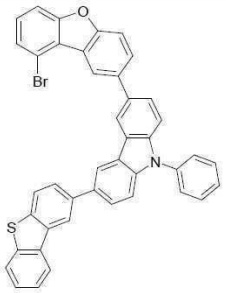
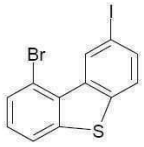
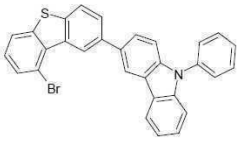
[0311] 하기 화합물을 유사한 방식으로 제조하였다:

	반응물 1	반응물 2	생성물	수율
i1		 [1807978-29-5]		67%
i2		 [1807910-31-1]		65 %
i3		 [1807910-29-7]		60%
i4		 [1801609-54-0]		63%
i5		 1493716-02-1]		61%

[0312]

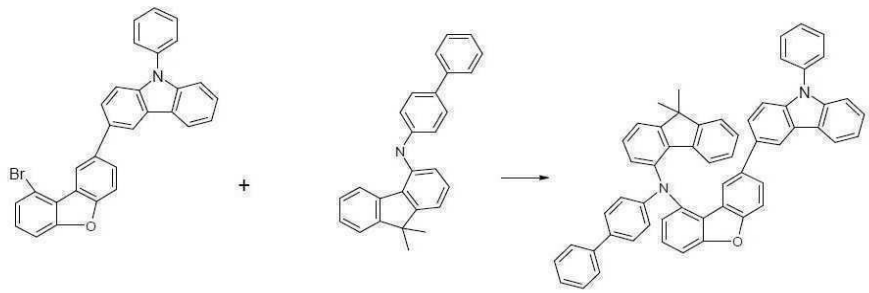
i6		 [1547492-13-6]		60%
i7		 [1493715-37-9]		56%
i8		 [1369369-44-7]		54%
i9		 [1416814-68-0]		68%
i10		 [1246562-39-9]		67%
i11		 [1240963-83-0]		66%

[0313]

i12		 [1572537-61-1]		60%
i13		 [1133057-97-2]		63%
i14		 [1001911-63-2]		62%
i15		 [1133058-06-6]		59%
i16		 [1582801-74-8]		65%
i17		 854952-58-2		57%

[0314]

[0315] j) 비페닐-4-일-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-4-일)-[8-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)디벤조퓨란-1-일]아민

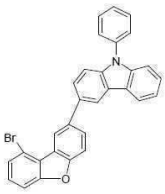
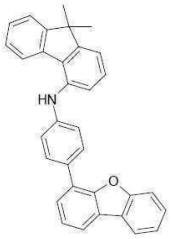
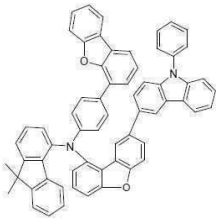
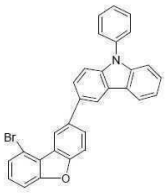
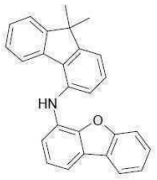
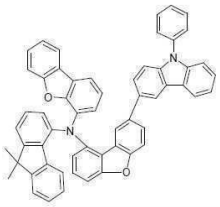
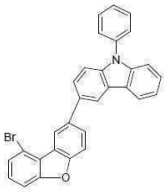
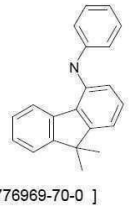
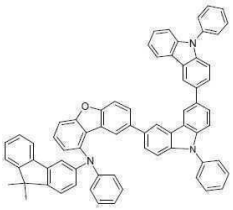
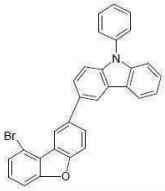
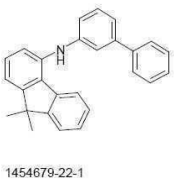
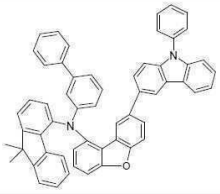
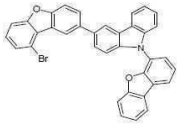
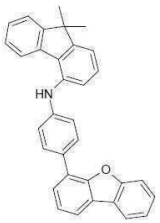
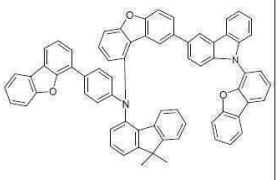
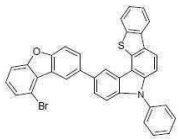
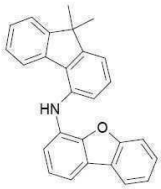
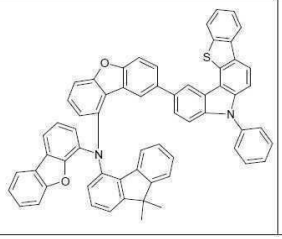


[0316]

[0317] 비페닐-4-일-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-4-일)아민 9.3 g (26 mmol), 3-(9-브로모디벤조퓨란-2-일)-9-페닐-9H-카바졸 12 g (26 mmol), 소디움 터트-부톡시드 7.7 g (80 mmol), 트리-터트-부틸포스핀 (1M, 톨루엔) 2.6 ml (78 mmol), 팔라듐 (II) 아세테이트 224 mg (2.6 mmol) 및 메시틸렌 300 ml를 환류 하에 24 시간 동안 가열한다.

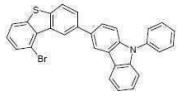
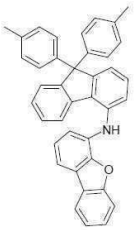
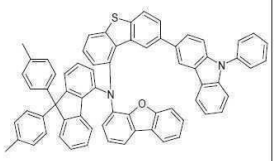
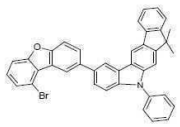
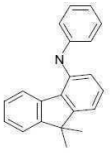
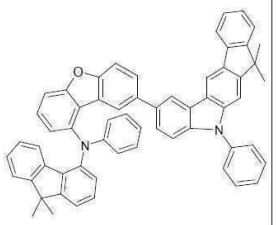
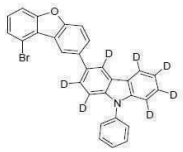
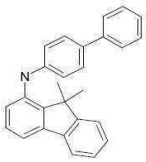
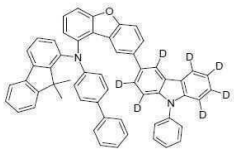
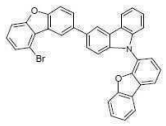
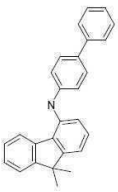
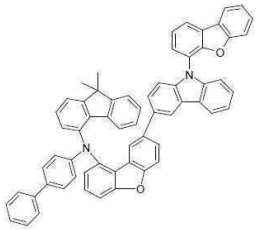
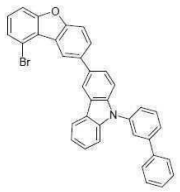
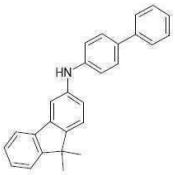
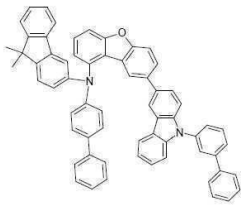
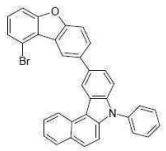
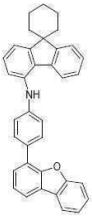
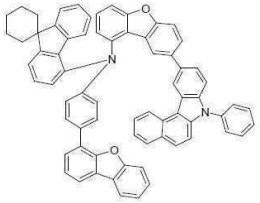
냉각 후, 물 200 ml를 첨가하고, 혼합물을 추가로 30 분 동안 교반하고, 유기상을 제거하고, 후자를 쇼트 Celite 베드를 통해 여과한 다음, 용매를 감압하에 제거하였다. 잔류물을 DMF 로부터 5 회 재결정하고 최종적으로 2 회 분별 승화시켰다 (p 약 10^{-6} mbar, T = 340-350 ℃). 수율: 13 g (17 mmol), 이론치의 68 %: HPLC에 의한 99.9 %.

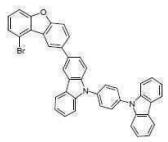
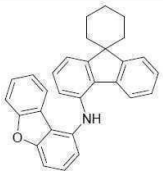
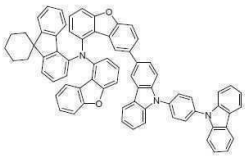
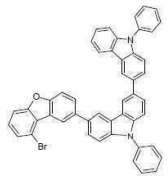
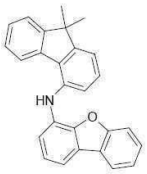
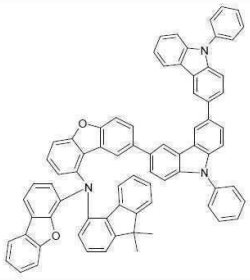
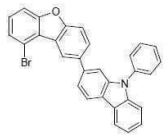
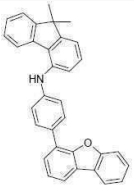
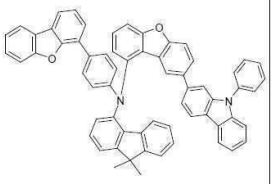
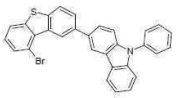
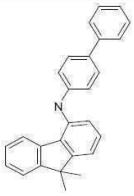
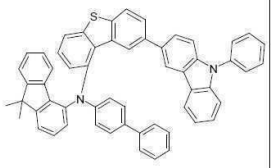
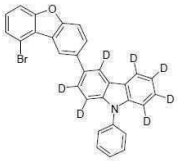
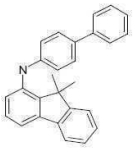
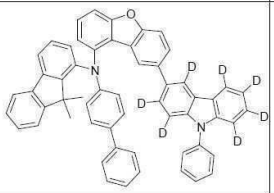
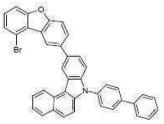
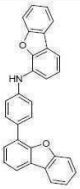
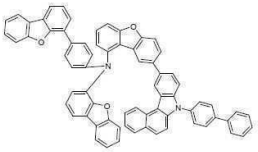
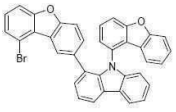
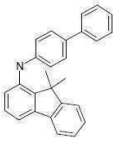
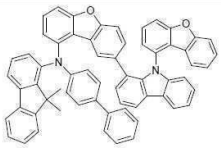
[0318] 하기 화합물을 유사한 방식으로 제조하였다:

	반응물 1	반응물 2	생성물	수율
j1				61%
j2				65%
j3		 [1776969-70-0]		57%
j4		 1454679-22-1		72%
j5				63%
j6				62%

[0319]

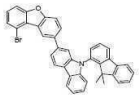
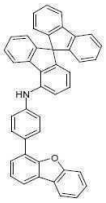
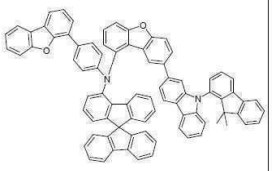
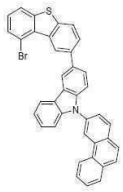
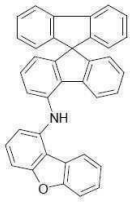
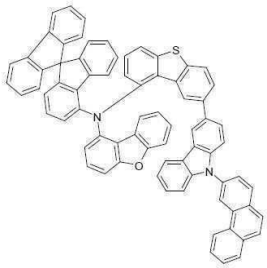
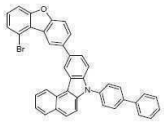
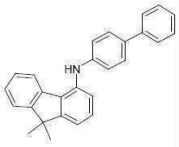
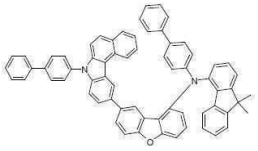
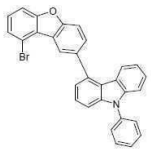
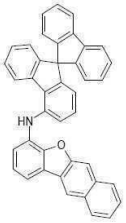
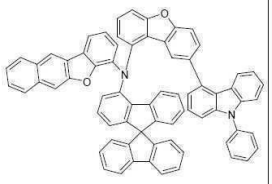
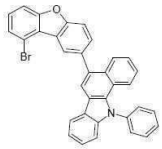
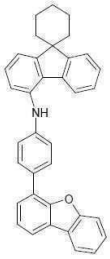
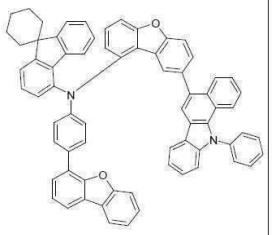
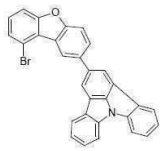
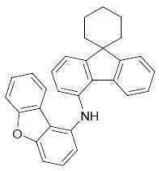
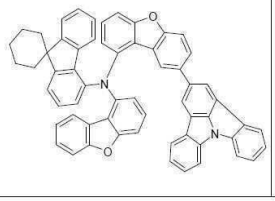
[0320]

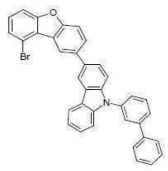
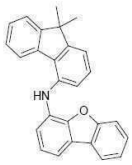
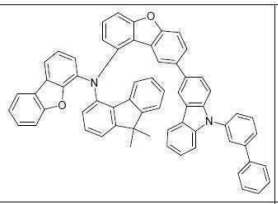
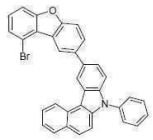
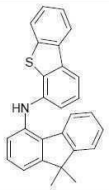
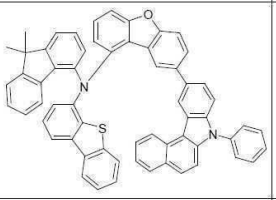
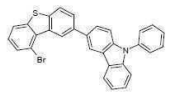
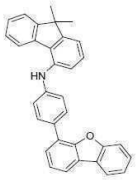
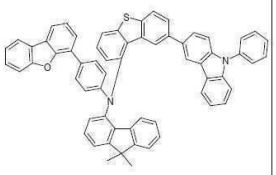
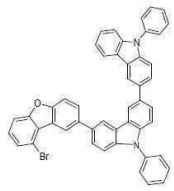
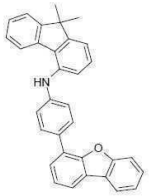
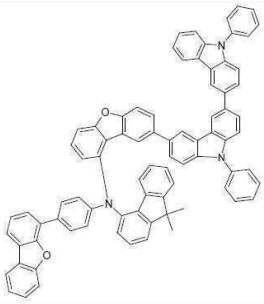
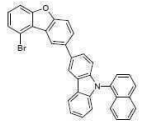
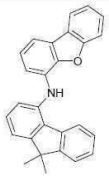
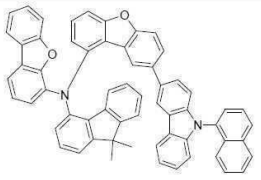
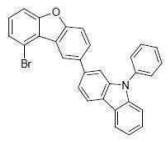
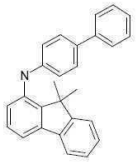
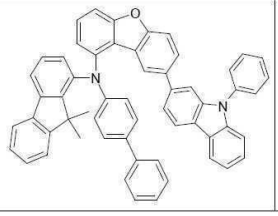
j7				54%
j8		 [1776969-70-0]		51%
j9				53%
j10				56%
j11				66%
j12				57%

j13				61%
j14				52%
j15				54%
j16				57%
j17				61%
j18				60%
j19				54%

[0321]

[0322]

j20				59%
j21	 [1579281-06-3]			62%
j22				61%
j23				53%
j24				50%
j25				66%

j26				61%
j27				65%
j28				67%
j29				52%
j30				68%
j31				71%

[0323]

[0324] **OLED의 제조**

[0325] 하기의 실시예 C1 내지 I9 (표 1 및 2 참조)에서, 다양한 OLED의 데이터가 제시된다.

[0326] **실시예 C1-I9에 대한 전처리** : 개선된 공정을 위해 두께 50 nm의 구조화된 ITO (인듐 주석 산화물)로 코팅된 유리판을 20 nm의 PEDOT:PSS (폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)폴리(스티렌설포네이트), 독일의 Heraeus Precious Metals GmbH로부터 CLEVIOS™ P VP AI 4083으로 구입, 수용액으로부터 회전시킴)로 코팅한다. 이러한 코팅된 유리판은 OLED가 적용되는 기판을 형성한다.

[0327] OLED는 기본적으로 하기 층 구조를 갖는다: 기판 / 정공 수송층 (HTL) / 임의의 사이층 (IL) / 전자 차단층 (EBL) / 방출층 (EML) / 임의의 정공 차단층 (HBL) / 전자 수송층 (ETL) / 임의의 전자 주입층 (EIL) 및 최종적인 캐소드. 캐소드는 두께 100 nm의 알루미늄 층에 의해 형성된다. OLED의 정확한 구조는 표 1에서 볼 수 있다. OLED의 제조에 필요한 재료는 표 3에 제시되어 있다.

[0328] 모든 재료는 진공 챔버에서 열 증착으로 적용된다. 이 경우, 발광층은 항상 적어도 하나의 매트릭스 재료 (호스트 재료) 및 매트릭스 재료(들)에 공증착에 의해 특정 비율 (부피) 로 첨가되는 방출 도펀트 (이미터)로 구성된다. IC5:IC3:TEG1 (45 %:45 %:10 %) 30 nm와 같은 형태로 제공되는 세부 사항은 여기에서 재료 IC5가 45 %의 부피 비율로, IC3가 45 %의 비율 및 TEG1가 10 %의 비율로 층에 존재함을 의미한다. 유사하게,

전자 수송층은 또한 두 재료의 혼합물로 이루어질 수 있다.

[0329] OLED는 표준 방식으로 특징화된다. 이를 위해, 전계 발광 스펙트럼, 전압 및 외부 양자 효율 (EQE, 퍼센트로 측정)은 Lambertian 방사 특성을 가정한 전류-전압-휘도 특성 (IUL 특성) 및 수명으로부터 계산된 휘도의 함수로서 측정된다. 전계 발광 스펙트럼은 1000 cd/m^2의 휘도에서 측정된다. 표 2의 파라미터 U1000은 1000 cd/m^2의 휘도에 필요한 전압을 나타낸다. EQE1000은 1000 cd/m^2의 작동 휘도에서 외부 양자 효율을 나타낸다. 수명 LT는 일정 전류로 작동하는 동안 휘도가 개시 휘도로부터 일정 비율 L_1으로 떨어지는 시간으로 정의된다. 표 2에서 $L_0;j_0$ = 4000 cd/m^2 및 L_1 = 70 %의 수치는 LT 칼럼에서 보고된 수명이 시작 휘도가 4000 cd/m^2에서 2800 cd/m^2로 떨어지는 시간과 일치함을 의미한다. 마찬가지로 $L_0;j_0$ = 20 mA/cm^2 , L_1= 80%는 20 mA/cm^2 에서의 작동 과정에서의 휘도가 시간 LT 이후에 시작 값의 80 %로 떨어진다는 것을 의미한다.

[0330] 다양한 OLED에 대한 데이터를 표 2에 정리하였다. 실시예 C1 내지 C8은 종래 기술에 따른 비교예이고; 실시예 I1 내지 I9는 본 발명의 OLED의 데이터를 나타낸다.

[0331] 본 발명의 OLED의 장점을 설명하기 위해, 몇몇 실시예가 하기에 상세히 설명된다.

[0332] **인광 OLED의 방출층에서 본 발명의 혼합물의 용도**

[0333] 본 발명의 재료는 인광 OLED의 발광층 (EML) 및 전자 차단층 (EBL)에 사용될 경우, 특히 OLED 구성 요소의 수명과 관련하여 종래 기술에 비해 현저한 개선을 제공한다. IC5 및 녹색 도펀트 TEG1과 조합된 본 발명의 화합물 INV-1 내지 INV-3의 사용에 의해, 종래 기술 VG-1 내지 VG-4와 비교하여 40 % 초과의 수명 증가를 관찰할 수 있다 (실시예 C1-C4와 I1-I3의 비교). EBL에서 본 발명의 화합물 (INV-1 내지 INV-3)을 사용함으로써, 종래 기술 VG-1 내지 VG-4와 비교하여 25 % 초과의 수명 증가를 관찰할 수 있다 (실시예 C5-C8과 I4-I6의 비교).

[0334] 표 1: OLED의 구조

실시예	HIL 두께	IL 두께	HTL 두께	EBL 두께	EML 두께	HBL 두께	ETL 두께	EIL 두께
C1	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 70nm	---	IC5:VG-1:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
C2	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 70nm	---	IC5:VG-2:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
C3	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 70nm	---	IC5:VG-3:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
C4	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 70nm	---	IC5:VG-4:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
C5	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 50nm	VG-1 20nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
C6	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 70nm	VG-2 20nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
C7	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 70nm	VG-3 20nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
C8	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 70nm	VG-4 20nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
I1	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 70nm	---	IC5:INV-3:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
I2	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 70nm	---	IC5:INV-1:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
I3	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 70nm	---	IC5:INV-2:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---

[0335]

I4	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 70nm	INV-3 20nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
I5	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 70nm	INV-1 20nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
I6	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 70nm	INV-2 20nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
I7	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 50nm	INV-3 20nm	IC5:IC3:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
I8	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 50nm	INV-1 20nm	IC5:IC3:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
I9	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 70nm	INV-2 20nm	IC5:IC3:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---

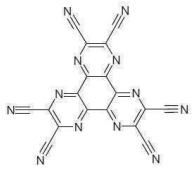
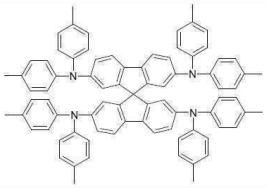
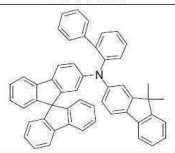
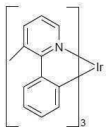
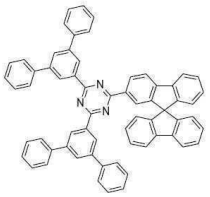
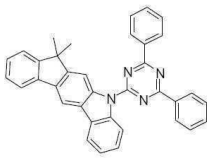
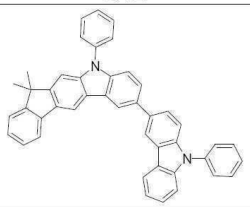
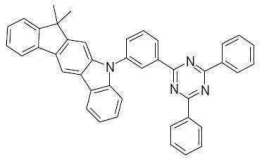
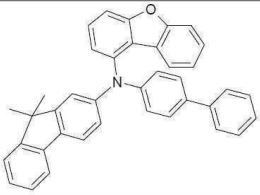
[0336]

[0337] 표 2: OLED의 데이터

실시예	U1000 (V)	EQE 1000	L_0:j_0	L_1 %	LT (시간)
C1	3.1	15.3%	20 mA/cm²	80	200
C2	3.2	15.4%	20 mA/cm²	80	180
C3	3.2	15.2%	20 mA/cm²	80	150
C4	3.3	15.5%	20 mA/cm²	80	140
C5	3.1	16.8%	20 mA/cm²	80	105
C6	3.2	15.7%	20 mA/cm²	80	100
C7	3.1	15.6%	20 mA/cm²	80	90
C8	3.2	15.1%	20 mA/cm²	80	85
I1	3.2	16.1%	20 mA/cm²	80	280
I2	3.3	16.3%	20 mA/cm²	80	260
I3	3.3	16.2%	20 mA/cm²	80	240
I4	3.2	17.2%	20 mA/cm²	80	135
I5	3.3	17.0%	20 mA/cm²	80	130
I6	3.2	17.5%	20 mA/cm²	80	120
I7	3.2	17.0%	20 mA/cm²	80	255
I8	3.3	16.8%	20 mA/cm²	80	250
I9	3.4	17.3%	20 mA/cm²	80	240

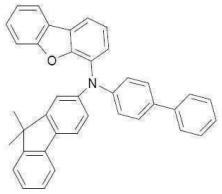
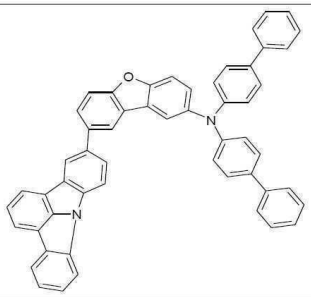
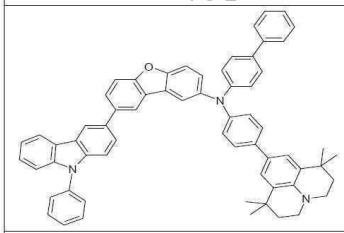
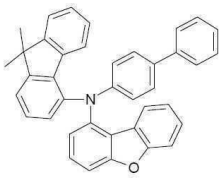
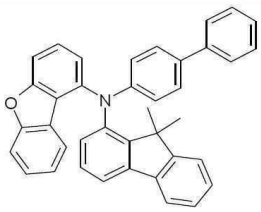
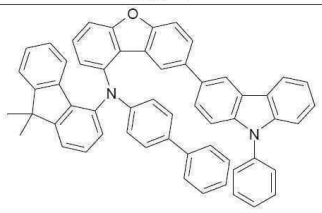
[0338]

[0339] 표 3: 사용된 재료

	
HATCN	SpA1
	
SpMA1	LiQ
	
TEG1	ST2
	
IC1	IC3
	
IC5	VG-1

[0340]

[0341]

	
VG-2	VG-3
	
VG-4	
	
INV-1	INV-2
	
INV-3	