



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2017년01월06일  
(11) 등록번호 10-1693903  
(24) 등록일자 2017년01월02일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C07F 7/08 (2006.01) C07F 9/572 (2006.01)  
C07F 9/655 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)  
(21) 출원번호 10-2011-7018426  
(22) 출원일자(국제) 2009년12월14일  
심사청구일자 2014년12월12일  
(85) 번역문제출일자 2011년08월05일  
(65) 공개번호 10-2012-0057556  
(43) 공개일자 2012년06월05일  
(86) 국제출원번호 PCT/EP2009/067120  
(87) 국제공개번호 WO 2010/079051  
국제공개일자 2010년07월15일  
(30) 우선권주장  
09150176.7 2009년01월07일  
유럽특허청(EPO)(EP)  
09150181.7 2009년01월07일  
유럽특허청(EPO)(EP)  
(56) 선행기술조사문헌  
US20070224446 A1  
US20070262704 A1

(73) 특허권자  
바스프 에스이  
독일 루트빅샤펜, 칼-보쉬-스트라쎄 38 (우:  
67056)  
오스람 옵토 세미컨덕터스 게엠베하  
독일 레겐스부르크 라이브니츠슈트라쎄 4 (우:  
93055)  
오엘이디웍스 게엠베하  
독일 52068 아헨 필립스스트라쎄 8  
(72) 발명자  
랑거 니콜레  
독일 64646 헵펜하임 레벤슈트라쎄 20  
쉴르크네히트 크리스티안  
독일 68307 만하임 잔도퍼 슈트라쎄 283아  
(뒷면에 계속)  
(74) 대리인  
김태홍, 김진희

전체 청구항 수 : 총 19 항

심사관 : 방성철

(54) 발명의 명칭 카르바졸, 디벤조푸란, 디벤조티오펜 및 디벤조포스포로부터 선택된 실릴 및 이중원자 치환된 화합물, 및 이의 유기 전자 장치에서의 용도

(57) 요약

본 발명은 화학식 (I) 또는 (I\*)의 카르바졸, 디벤조푸란, 디벤조티오펜 및 디실릴벤조포스포로부터 선택된 실릴 및 이중원자 치환된 화합물, 유기 전자 장치 용도, 바람직하게는 유기 발광 다이오드에서의 화학식 (I) 또는 (I\*)의 용도, 화학식 (I) 및 (I\*)의 1 이상의 화합물을 포함하는 유기 발광 다이오드, 화학식 (I) 또는 (I\*)의 1 이상의 화합물을 포함하는 유기 발광층, 화학식 (I) 또는 (I\*)의 1 이상의 화합물을 포함하는 정공/여기자의 차단층, 1 이상이 본 발명의 유기 발광 다이오드를 포함하는, 고정식 영상 디스플레이 장치, 이동식 영상 디스플레이 장치, 조명 장치, 키보드, 옷 물품, 가구 및 벽지로 구성된 군으로부터 선택되는 장치에 관한 것이다.

(72) 발명자

**와타나베 소이치**

독일 68161 만하임 34 에스6

**폭스 에벨린**

독일 68199 만하임 탄내우저링 75

**바겐블라스트 게르하르트**

독일 67157 바헨하임 암 유테나커 8

**렌나르츠 크리스티안**

독일 67105 쉬퍼슈타트 한스-푸르만-슈트라쎈 24

**몰트 올리버**

독일 69469 바인하임 빈테르가쎈 46

**도르만 코린나**

독일 67098 바트 뒤르크하임 포르투기저 슈트라쎈 21

**로 추안지에**

싱가포르 55054 싱가포르시 애비뉴 4 넘버 10-33  
세랑군 노스 비엘케이 542

**훈체 아르비트**

독일 91056 에를랑겐 하인리히-키르크너-슈트라쎈 32 압파르테멘트 62

**크라우제 랄프**

독일 91058 에를랑겐 라티보러슈트라쎈 10

**슈미트 쿤터**

독일 91334 험오펜 랑게 슈트라쎈 13

**호이저 카르스텐**

독일 91056 에를랑겐 게오르그-프랑크-슈트라쎈 17

**엘스베르겐 반 볼커**

독일 52080 아헨 아우프 데르 휠스 94베

**뵘르너 헤르버르트 프리드리히**

독일 52076 아헨 마아르백 7

**키르쉬 슈테판**

독일 85386 디터샤임 마이젠백 5

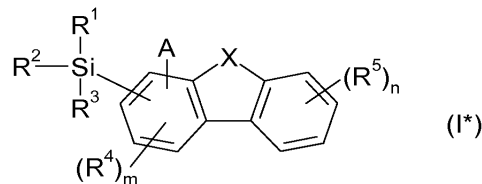
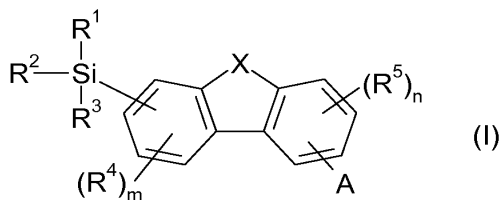
# 명세서

## 청구범위

### 청구항 1

하기 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물이거나, 또는

화학식 (I), 화학식 (I\*) 또는 화학식 (I) 및 화학식 (I\*)의 두 개의 단위가, 1 이상의 이중원자가 임의로 개재된 선형 또는 분지형의 포화 또는 불포화 가교를 통해 또는 O를 통해 서로 가교되고, 여기서 화학식 (I), 화학식 (I\*) 또는 화학식 (I) 및 화학식 (I\*) 내의 그러한 가교가 각 경우에 R<sup>2</sup> 대신에 규소 원자에 결합되는 것인 화합물:



상기 식 중,

X는 NR, S, O 또는 PR이고;

R은 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이며;

A는 -NR<sup>6,7</sup>, -P(O)R<sup>8,9</sup>, -PR<sup>10,11</sup>, -S(O)<sub>2</sub>R<sup>12</sup>, -S(O)R<sup>13</sup>, -SR<sup>14</sup> 또는 -OR<sup>15</sup>이고;

R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup>은 각각 독립적으로 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기이며, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> 라디칼 중 1 이상은 2 이상의 탄소 원자 또는 OR<sup>22</sup>를 포함하고;

R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup>는 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기, A 기, 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기이며;

n, m은 각각 독립적으로 0, 1, 2, 3이고;

-NR<sup>6,7</sup>은 피롤릴, 2,5-디히드로-1-피롤릴, 피롤리디닐, 인돌릴, 인돌리닐, 이소인돌리닐, 카르바졸릴, 아자카르바졸릴, 디아자카르바졸릴, 이미다졸릴, 이미다졸리닐, 벤즈이미다졸릴, 피라졸릴, 인다졸릴, 1,2,3-트리아졸릴, 벤조트리아졸릴, 1,2,4-트리아졸릴, 테트라졸릴, 1,3-옥사졸릴, 1,3-티아졸릴, 피페리딜, 모르폴리닐, 9,10-디히드로아크리디닐 및 1,4-옥사지닐로 구성된 군으로부터 선택되고, 여기서 전술한 기는 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택된 1 이상의 치환기에 의해 치환되거나 비치환될 수 있으며;

R<sup>22</sup>는 독립적으로 SiR<sup>23,24,25</sup>, 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬, 스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기이며, OR<sup>28</sup> 기에 의해 임의로 치환되고;

R<sup>28</sup>은 독립적으로 SiR<sup>23,24,25</sup>, 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬, 스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기이며;

$R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{23}, R^{24}, R^{25}$ 는 각각 독립적으로 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬, 스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기이고,

스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기는 화학식  $-(Sp)_{x1}-[PG']_x$ 의 기이고, 여기서

Sp는 가교 단위이고,

PG'는 가교결합성 또는 중합성 기이며,

$x1$ 은 0 또는 1이고,

$x$ 는 1 내지 4의 정수이며, 여기서

Sp는  $-Ar-$ ,  $-ArY-$ ,  $-YAr-$ ,  $-YAr(CR^{26}R^{27})_n-$ ,  $-(CR^{26}R^{27})_n-$ ,  $-(YCR^{26}R^{27})_n-$  또는  $-(CR^{26}R^{27}Y)_n-$ 로 구성된 군으로부터 선택되고, 여기서

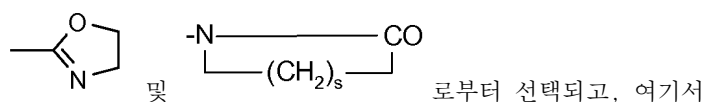
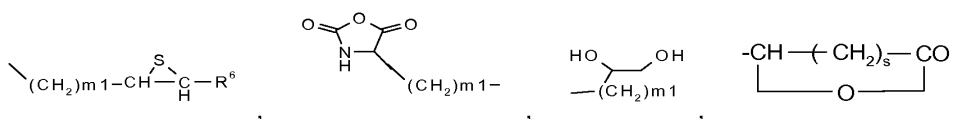
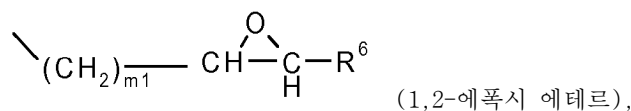
Y는  $NR^5$ , O, S, C=O, C(=O)O이고, 여기서,  $R^5$ 는 H이고; 1 이상의  $C_1-C_{18}$ -알킬 또는  $C_1-C_{18}$ -알콕시에 의해 임의로 치환된  $C_6-C_{18}$ -아릴, -O-가 임의로 개재한  $C_1-C_{18}$ -알킬이며;

$R^{26}$  및  $R^{27}$ 은 각각 독립적으로 수소, 불소 또는  $C_1-C_{20}$ -알킬이고,

$n$ 은 1 내지 20의 정수이며,

Ar은 알킬, 시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴이고, 이는 임의로 치환될 수 있으며,

PG'는  $-C(R^{44})=CH_2$ ,  $-NHC(O)-C(R^{45})=CH_2$ ,  $-OCH_2CH_2OC(O)-C(R^{45})=CH_2$ ,  $-OC(O)-C(R^{45})=CH_2$ ,  $-C(O)-C(R^{46})=CH_2$ ,  $-C\equiv C-$ ,  $-N\equiv C$ ,  $-O-CH(CH_2CH_2CH=CH_2)_2$ ;  $C_5-C_8$ -시클로알케닐, 임의로 치환되거나 비치환되고 5~30개의 탄소 원자를 가진 비시클로알케닐,



$s$ 는 1 내지 6의 정수이며,  $m1$ 은 1 내지 6의 정수이고,  $R^6$ 는 수소 또는  $C_1-C_{20}$ -알킬이며,

$R^{44}$ 는 수소,  $C_1-C_4$ -알킬 또는 할로젠이고,

$R^{45}$ 는 수소,  $C_1-C_4$ -알킬 또는 할로젠이며,

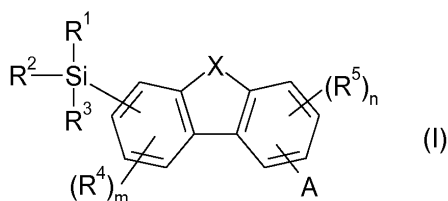
$R^{46}$ 는 수소,  $C_1-C_4$ -알킬 또는  $C_6-C_{12}$ -아릴이고, 또는

추가 실시양태에서 PG'는 중합성  $\begin{array}{c} R^{47} \\ | \\ R^{48}-AHG \\ | \end{array}$ 로부터 얻을 수 있는 기로, 여기서 AHG는 방향족 또는 헤테로방향족인 라디칼이고,

공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기는 메톡시, 페닐옥시, 할로젠화 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬, 할로젠, CN, SiR<sup>19</sup>R<sup>20</sup>R<sup>21</sup> (여기서 R<sup>19</sup>, R<sup>20</sup> 및 R<sup>21</sup>은 각각 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-알킬 또는 페닐임), NR<sup>19</sup>R<sup>20</sup> (여기서 R<sup>19</sup>, R<sup>20</sup>은 각각 C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>-아릴, -C(O)OC<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬 및 P(O)Ph<sub>2</sub>임)로 구성된 군으로부터 선택된다.

## 청구항 2

하기 화학식 (I)의 화합물:



상기 식 중,

X는 NR, S, O 또는 PR이고;

R은 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이며;

A는 -NR<sup>6</sup>R<sup>7</sup>, -P(O)R<sup>8</sup>R<sup>9</sup>, -PR<sup>10</sup>R<sup>11</sup>, -S(O)<sub>2</sub>R<sup>12</sup>, -S(O)R<sup>13</sup>, -SR<sup>14</sup> 또는 -OR<sup>15</sup>이고;

R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup>은 각각 독립적으로 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이며, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup> 및 R<sup>3</sup> 라디칼 중 1 이상은 아릴 또는 헤테로아릴이고;

R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup>는 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, A 기, 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기이며;

n, m은 각각 독립적으로 0, 1, 2, 3이고;

-NR<sup>6</sup>R<sup>7</sup>은 피롤릴, 2,5-디히드로-1-피롤릴, 피롤리디닐, 인돌릴, 인돌리닐, 이소인돌리닐, 카르바졸릴, 아자카르바졸릴, 디아자카르바졸릴, 이미다졸릴, 이미다졸리닐, 벤즈이미다졸릴, 피라졸릴, 인다졸릴, 1,2,3-트리아졸릴, 벤조트리아졸릴, 1,2,4-트리아졸릴, 테트라졸릴, 1,3-옥사졸릴, 1,3-티아졸릴, 피페리딜, 모르폴리닐, 9,10-디히드로아크리디닐 및 1,4-옥사지닐로 구성된 군으로부터 선택되고, 여기서 전술한 기는 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택된 1 이상의 치환기에 의해 치환되거나 비치환될 수 있으며;

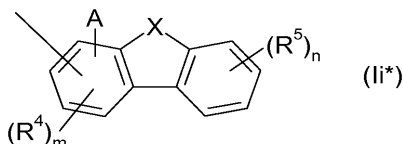
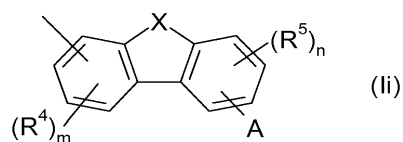
R<sup>8</sup>, R<sup>9</sup>, R<sup>10</sup>, R<sup>11</sup>, R<sup>12</sup>, R<sup>13</sup>, R<sup>14</sup> 및 R<sup>15</sup>는 각각 독립적으로 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이고,

공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기는 메톡시, 페닐옥시, 할로젠화 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬, 할로젠, CN, SiR<sup>19</sup>R<sup>20</sup>R<sup>21</sup> (여기서 R<sup>19</sup>, R<sup>20</sup> 및 R<sup>21</sup>은 각각 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-알킬 또는 페닐임), NR<sup>19</sup>R<sup>20</sup> (여기서 R<sup>19</sup>, R<sup>20</sup>은 각각 C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>-아릴, -C(O)OC<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬 및 P(O)Ph<sub>2</sub>임)로 구성된 군으로부터 선택된다.

## 청구항 3

제1항 또는 제2항에 있어서, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> 및 이의 조합은 하기 화학식 (Ii) 또는 (Ii<sup>\*</sup>)의 방향족 단위인 것인 화합

물:



상기 식 중,  $R^4$ ,  $R^5$ , A, X, n 및 m은 각각 제1항에서 정의된 바와 같다.

#### 청구항 4

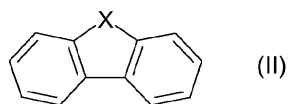
제1항에 있어서,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^8$ ,  $R^9$ ,  $R^{10}$ ,  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$ ,  $R^{14}$ ,  $R^{15}$ ,  $R^{22}$ ,  $R^{23}$ ,  $R^{24}$ ,  $R^{25}$  또는  $R^{28}$  라디칼 중 하나 이상은 독립적으로 스페이서를 통해 결합된 중합성 또는 가교결합성 기이고, 자유 라디칼, 양이온 또는 첨가중합 또는 커플링 반응에 의해 중합가능하거나 가교결합가능한 작용기들의 군으로부터 선택되는 것인 화합물.

#### 청구항 5

제1항에 있어서,  $R^1$ ,  $R^2$  및  $R^3$ 의 기로부터 선택된 1 이상의 라디칼은 독립적으로 스페이서를 통해 결합된 중합성 또는 가교결합성 기인 것인 화합물.

#### 청구항 6

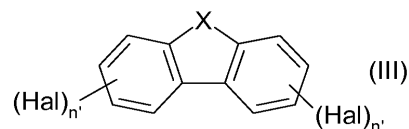
제1항 또는 제2항에 따른 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물의 제조 방법으로서, 식 중, R,  $SiR^1R^2R^3$ , A, 및 존재하는 경우,  $R^4$  및  $R^5$  라디칼 및 기는 하기 변형 공정 (a), (b), (c) 또는 (d) 중 하나에 따라 화학식 (II)의 기본 골격으로 도입되는 것인 제조 방법:



[상기 식 중, X는 NR, S, O 또는 PR 또는 NH 또는 PH 또는 PPh임]

변형 공정 (a)

(ia) 화학식 (III)의 할로젠화된 화합물의 제조 단계,



[상기 식 중, Hal은 할로젠이며, n'은 각 경우에 0 또는 1이고, 여기서, 1 이상의 n'이 1이고, X는 NR, S, O 또는 PR임]

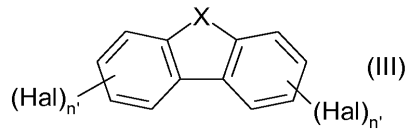
(iia) R 라디칼의 도입 단계,

(iiaa) 존재하는 경우  $R^4$ ,  $R^5$  라디칼, 및  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼의 도입 단계; 또는

변형 공정 (b)

(ib) R 라디칼의 도입 단계,

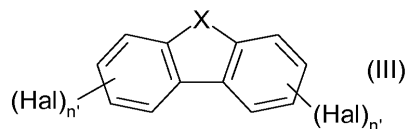
(iib) 화학식 (III)의 할로겐화된 화합물의 제조 단계,



[상기 식 중, Hal은 할로젠이며,  $n'$ 은 각 경우에 0 또는 1이고, 여기서, 1 이상의  $n'$ 이 1이고, X는 NR, S, O 또는 PR임]

(iiib) 존재하는 경우  $R^4$ ,  $R^5$  라디칼, 및  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼의 도입 단계; 또는  
변형 공정 (c)

(ic) 화학식 (III)의 할로겐화된 화합물의 제조 단계,



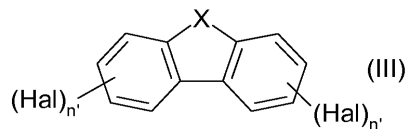
[상기 식 중, Hal은 할로젠이며,  $n'$ 은 각 경우에 0 또는 1이고, 여기서, 1 이상의  $n'$ 이 1이고, X는 NR, S, O 또는 PR임]

(iic) 존재하는 경우  $R^4$ ,  $R^5$  라디칼, 및  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼의 도입 단계,

(iiic) R 라디칼의 도입 단계; 또는

변형 공정 (d)

(id) 화학식 (III)의 할로겐화된 화합물의 제조 단계,



[상기 식 중, Hal은 할로젠이며,  $n'$ 은 각 경우에 0 또는 1이고, 여기서, 1 이상의  $n'$ 이 1이고, X는 NR, S, O 또는 PR임]

(iid) 존재하는 경우  $R^4$ ,  $R^5$  라디칼, 및  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼의 도입 단계.

## 청구항 7

제1항 또는 제2항에 따른 화학식 (I) 또는 ( $I^*$ )의 화합물을 포함하는, 유기 전자 장치에서의 액체 가공된 용도를 위한 제제.

## 청구항 8

제1항에 따른 화학식 (I) 또는 ( $I^*$ )의 1 이상의 화합물을 가교결합 또는 중합된 형태로 포함하는 가교결합 또는 중합된 물질의 제조 방법으로서,

(A)  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^8$ ,  $R^9$ ,  $R^{10}$ ,  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$ ,  $R^{14}$ ,  $R^{15}$ ,  $R^{22}$ ,  $R^{23}$ ,  $R^{24}$ ,  $R^{25}$  또는  $R^{28}$  중 1 이상이 스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기인 화학식 (I) 또는 ( $I^*$ )의 가교결합성 또는 중합성 화합물의 제조 단계, 및

(B) 단계 (A)로부터 얻은 화학식 (I) 또는 ( $I^*$ )의 화합물의 가교결합 또는 중합 단계를 포함하는 제조 방법.

### 청구항 9

제1항에 따른 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 단위를 가교결합 또는 중합된 형태로 포함하는 가교결합 또는 중합된 물질.

### 청구항 10

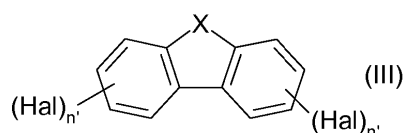
제1항에 따른 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물을 포함하는 유기 전자 장치 용도물.

### 청구항 11

제1항에서 특정된 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 1 이상의 화합물을 포함하는 유기 발광 다이오드.

### 청구항 12

제11항에 있어서, 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물은 하기 화학식 (III)의 화합물이고, 여기서 Hal은 할로젠이며, n'은 각 경우에 0 또는 1이고, 여기서, 1 이상의 n'이 1이고, X는 NR, S, O 또는 PR인 유기 발광 다이오드:



### 청구항 13

제1항에서 특정된 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 1 이상의 화합물을 포함하는 발광층.

### 청구항 14

제1항에서 특정된 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 1 이상의 화합물을 포함하는 정공/여기자용 차단층.

### 청구항 15

제11항에 따른 1 이상의 유기 발광 다이오드를 포함하는, 컴퓨터의 영상 디스플레이 장치, 텔레비전, 프린터, 주방 가전 및 광고판에서의 영상 디스플레이 장치, 조명, 정보 표시판과 같은 고정식 영상 디스플레이 장치, 및 핸드폰, 랩톱, 디지털 카메라, MP3 플레이어, 차량에서의 영상 디스플레이 장치, 및 버스 및 기차의 목적지 디스플레이와 같은 이동식 영상 디스플레이 장치; 조명 장치; 키보드; 의류 물품; 가구; 카펫으로 구성된 군으로부터 선택되는 디바이스.

### 청구항 16

제9항에 따른 물질을 포함하는 유기 전자 장치 용도물.

### 청구항 17

제9항에 따른 물질을 포함하는 유기 발광 다이오드.

### 청구항 18

제9항에 따른 물질을 포함하는 발광층.

### 청구항 19

제9항에 따른 물질을 포함하는 정공/여기자용 차단층.

### 청구항 20

삭제



청구항 21

삭제

청구항 22

삭제

청구항 23

삭제

청구항 24

삭제

청구항 25

삭제

청구항 26

삭제

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 발명은 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 카르바졸, 디벤조푸란, 디벤조티오펜 및 디실릴벤조포스폴로부터 선택된 실릴 및 이중원자 치환된 화합물, 유기 전자 장치 용도, 바람직하게는 유기 발광 다이오드에서의 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 용도, 화학식 (I) 및 (I<sup>\*</sup>)의 1 이상의 화합물을 포함하는 유기 발광 다이오드, 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 1 이상의 화합물을 포함하는 유기 발광층, 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 1 이상의 화합물을 포함하는 정공/여기자의 차단층, 1 이상이 본 발명의 유기 발광 다이오드를 포함하는, 고정식 영상 디스플레이 장치, 이동식 영상 디스플레이 장치, 조명 장치, 키보드, 옷 물품, 가구 및 벽지로 구성된 군으로부터 선택되는 장치에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0002] 유기 전자 장치는 전자 장치의 하위 분야이며, 중합체 또는 보다 작은 유기 화합물을 포함하는 전자 회로를 이용한다. 유기 전자 장치의 적용 분야로는, 유기 발광 다이오드(OLED)에서의 중합체 또는 보다 작은 유기 화합물의 용도, 유기 태양 전지(유기 광전지) 및 스위칭 부재, 예컨대 유기 트랜지스터, 예를 들어 유기 FET 및 유기 TFT에서의 용도가 있다.

[0003] 따라서, 적합한 신규한 유기 물질을 사용하여, 제공하려는 유기 전자 장치, 예컨대 디스플레이, 센서, 트랜지스터, 데이터 저장 장치, 또는 광전류 전지를 기반으로 하는 다양한 새로운 유형의 성분이 가능하다. 이로써 얇고, 가볍고, 가요성이며, 저렴하게 생산가능한 새로운 용도를 개발할 수 있다.

[0004] 본 발명에 따른 용도의 바람직한 분야는 유기 발광 다이오드의 상대적으로 작은 유기 화합물의 용도이다.

[0005] 유기 발광 다이오드(OLED)는 전류에 의해 여기되었을 때 발광하는 물질의 특성을 이용한다. OLED는 평판 영상 디스플레이 장치의 생산을 위한 음극선 관 및 액정 디스플레이로서 특별한 관심의 대상이다. 매우 컴팩트한 디자인 및 본질적으로 낮은 전력 소모로 인해, OLED를 포함하는 디바이스는 이동식 용도, 예를 들어 휴대폰, 랩톱 등, 및 조명에 특히 적합하다.

[0006] OLED가 작용하는 기본 원리 및 OLED의 적합한 구조(층)이, 예를 들어 WO 2005/113704 및 이에 인용된 문헌에 기술되어 있다.

[0007] 사용되는 발광 물질(발광체)뿐만 아니라, 형광성 물질(형광 발광체)은 인광성 물질(인광 발광체)이다. 싱글릿 발광을 나타내는 형광 발광체와는 대조적으로 트리플릿 발광을 나타내는 전형적인 유기금속 착물이다(M. A. Baldow et al., Appl. Phys. Lett. 1999, 75, 4 to 6). 양자-기계적 이유로, 인광 발광체가 사용되는 경우, 4

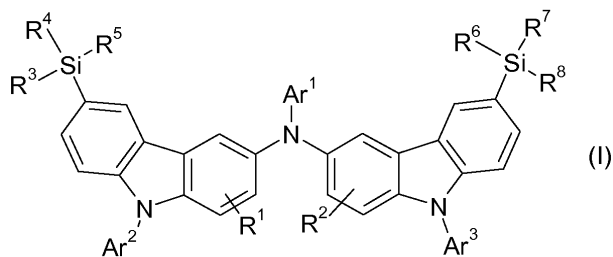
배까지, 양자 효율, 에너지 효율 및 전력 효율이 가능하다.

[0008] 상대적으로 긴 동 수명, 우수한 효율, 열응력에 높은 안정성, 및 낮은 사용 및 작동 전압을 갖는 유기 발광 다이오드가 특히 관심의 대상이다.

[0009] 진술한 특성을 실질적으로 실현시키기 위해서, 적합한 발광체 물질을 제공하는 것이 필요할 뿐만 아니라, 상기 OLED의 다른 성분(상보 물질)이 또한 적합한 디바이스 조성물 중에서 서로 균형을 이루어야 한다. 이러한 디바이스 조성물은, 예를 들어 실질 발광체가 분산 형태로 존재하는 특정 매트릭스 물질을 포함한다. 또한, 상기 조성물은 차단체 물질을 포함할 수 있으며, 정공 차단체, 기여자 차단체 및/또는 전자 차단체가 상기 디바이스 조성물에 존재하는 것이 가능하다. 추가적으로 또는 대안적으로, 상기 디바이스 조성물은 정공 주입 물질 및/또는 전자 주입 물질 및/또는 전하 이송 물질, 예컨대 정공 전도체 물질 및/또는 전자 전도체 물질을 포함할 수 있다. 실질 발광체와 병용되는 진술한 물질의 선택은 OLED의 효율 및 수명, 및 사용 및 작동 전압을 비롯한 파라미터에 상당한 영향을 미친다.

[0010] 종래 기술은 OLED의 상이한 층에 사용하기 위한 다수의 상이한 물질을 제안한다.

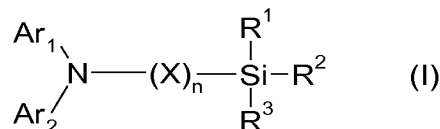
[0011] US 2008/0171227 A1은 화학식 (I)의 실라닐아민계 화합물, 및 그 실라닐아민계 화합물을 포함하는 OLED에 관한 것이다.



[0012]

[0013] 2개의 실란기 및 2개 이상의 카르바줄기를 갖는 실라닐아민계 화합물은 전기 안정성, 우수한 전하 이송능 및 높은 유리 전이 온도를 가지며, 정공 주입 물질, 정공 이송 물질 및/또는 발광 물질로서 사용될 수 있다.

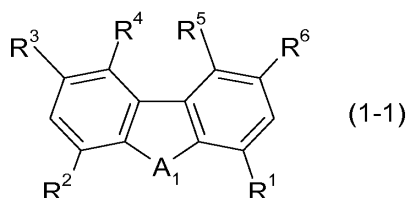
[0014] EP 1 921 082 A1은 하기 화학식 (I)의 실라닐아민계 화합물, 및 하기 화학식 (I)의 실라닐아민계 화합물을 포함하는 유기 발광 다이오드에 관한 것이다.



[0015]

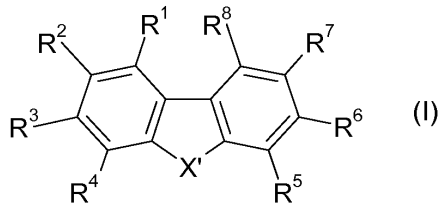
[0016] 화학식 (I)의 실라닐아민계 화합물은 정공 주입층, 정공 이송층으로서, 또는 정공 주입 특성과 정공 이송 특성 둘 모두를 갖는 단일층으로서 사용될 수 있다. 또한, 화학식 (I)의 실라닐아민계 화합물은 인광성 또는 형광성 물질을 추가로 포함할 수 있는 발광체에 사용될 수 있다.

[0017] JP 2006-321750 A는 방향족 화합물, 예를 들어 화학식 (1-1)의 디벤조푸란 유도체, 디벤조티오펜 유도체 또는 카르바줄 유도체에 관한 것이다.



[0018]

[0019] 화학식 (1-1)의 화합물은 JP 2006-321750 A에 따라 약제의 중간생성물, 전하 이송 물질 또는 발광 물질로서 사용된다. US 2007/0224446 A1은 유기 발광 다이오드에 사용하는 데 적합하며, 상기 화합물은 하기 화학식 (I)을 가진다.



[0020]

[0021]

상기 화학식 (I) 중  $R^1 \sim R^8$  라디칼은 8~40개의 탄소 원자를 갖는 아릴실릴기를 포함하는 기일 수 있다. US 2007/0224446 A1의 실시예에 따르면, 화학식 (I)의 화합물은 발광층에서 매트릭스 물질로서 사용된다.

[0022]

따라서, 종래 기술로부터, 카르바졸, 디벤조푸란 및 디벤조티오펜 유도체가 공지되어 있으며, 특히 발광층 중 정공 주입 물질, 정공 이송 물질, 및 적절한 경우, 매트릭스 물질로서 사용된다.

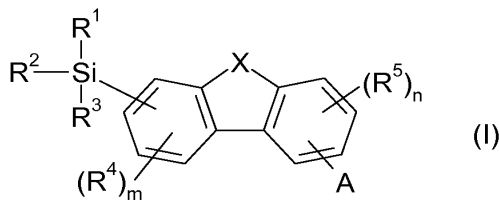
[0023]

종래 기술과 관련하여, 본 발명의 목적은, OLED, 및 유기 전자 장치에서의 추가 용도에 사용하기에 적합한 추가 물질을 제공하는 것이다. 더욱 특히, OLED에 사용하기 위한 정공/여기자 차단체 물질 및 매트릭스 물질을 제공하는 것이 가능해야 한다. 이러한 물질은 1 이상의 인광성 발광체, 특히 1 이상의 녹색 발광체, 또는 1 이상의 청색 발광체를 포함하는 OLED에 특히 적합해야 한다. 더욱이, 상기 물질은 OLED의 우수한 효율, 우수한 작동 수명, 열응력에 대한 높은 안정성, 및 낮은 사용 및 작동 전압을 확보하는 OLED를 제공하는 데 적합해야 한다.

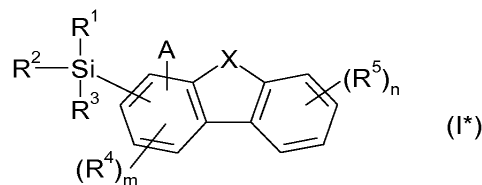
### 발명의 내용

[0024]

이러한 목적은 화학식 (I) 또는 ( $I^*$ )의 화합물이거나, 또는 화학식 (I) 및/또는 ( $I^*$ )의 두개의 단위가, 1 이상의 이중원자가 임의로 개재된 선형 또는 분지형의 포화 또는 불포화 가교를 통해 또는 0를 통해 서로 가교되고, 여기서 화학식 (I) 및/또는 ( $I^*$ ) 내의 가교가 각 경우에  $R^2$  대신에 규소 원자에 결합되는 것인 화학식 (I) 및/또는 ( $I^*$ )을 제공하여 달성된다.



[0025]



[0026]

[0027]

상기 식 중,

[0028]

X는 NR, S, O 또는 PR이고;

[0029]

R은 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이며;

[0030]

A는  $-NR^6R^7$ ,  $-P(O)R^8R^9$ ,  $-PR^{10}R^{11}$ ,  $-S(O)_2R^{12}$ ,  $-S(O)R^{13}$ ,  $-SR^{14}$  또는  $-OR^{15}$ 이고;

[0031]

$R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ 는 각각 독립적으로 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기이며,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  라디칼 중 1 이상은 2 이상의 탄소 원자 또는  $OR^{22}$ 를 포함하고;

[0032]

$R^4$ ,  $R^5$ 는 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기, A 기, 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기이며;

[0033]

n, m은 각각 독립적으로 0, 1, 2, 3이고;

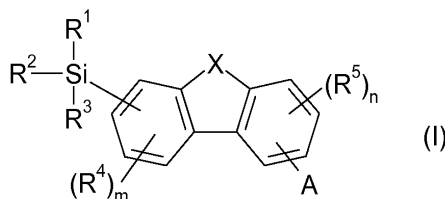
[0034]  $R^6$ ,  $R^7$ 은 질소 원자와 함께 3~10개의 고리 원자를 갖는 환형 라디칼을 형성하고, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택된 1 이상의 치환기에 의해 치환되거나 비치환될 수 있고/있거나 3~10개의 고리 원자를 갖는 1 이상의 추가 환형 라디칼에 융합될 수 있으며, 상기 융합된 라디칼은 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기, 및 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택된 1 이상의 치환기에 의해 치환되거나 비치환될 수 있고,

[0035]  $R^{22}$ 는 독립적으로  $SiR^{23}R^{24}R^{25}$ , 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬, 스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기이며,  $OR^{28}$  기에 의해 임의로 치환되고;

[0036]  $R^{28}$ 은 독립적으로  $SiR^{23}R^{24}R^{25}$ , 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬, 스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기이며,

[0037]  $R^8$ ,  $R^9$ ,  $R^{10}$ ,  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$ ,  $R^{14}$ ,  $R^{15}$ ,  $R^{23}$ ,  $R^{24}$ ,  $R^{25}$ 는 각각 독립적으로 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬, 스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기이다.

[0038] 본 발명의 목적은 화학식 (2)의 화합물에 의해 달성된다.



[0039]

[0040] 상기 식 중,

[0041] X는 NR, S, O 또는 PR이고;

[0042] R은 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이며;

[0043] A는  $-NR^6R^7$ ,  $-P(O)R^8R^9$ ,  $-PR^{10}R^{11}$ ,  $-S(O)_2R^{12}$ ,  $-S(O)R^{13}$ ,  $-SR^{14}$  또는  $-OR^{15}$ 이고;

[0044]  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ 는 각각 독립적으로 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이며,  $R^1$ ,  $R^2$  및  $R^3$  라디칼 중 1 이상은 아릴 또는 헤테로아릴이고;

[0045]  $R^4$ ,  $R^5$ 는 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, A 기, 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기이며;

[0046] n, m은 각각 독립적으로 0, 1, 2, 3이고;

[0047]  $R^6$ ,  $R^7$ 은, 질소 원자와 함께, 3~10개의 고리 원자를 갖는 환형 라디칼을 형성하고, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기에 의해 치환되거나 비치환될 수 있고, 및/또는 3~10개의 고리 원자를 갖는 1 이상의 추가 환형 라디칼에 융합될 수 있으며, 상기 융합된 라디칼은 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 및 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택되는 1 이상의 치환기에 의해 치환되거나 비치환될 수 있으며,

[0048]  $R^8$ ,  $R^9$ ,  $R^{10}$ ,  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$ ,  $R^{14}$  및  $R^{15}$ 는 각각 독립적으로 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬이다.

[0049] 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 특정 실리 및 이종원자 치환된 화합물은 특히 전하 이송 전도성이 요구되는 용도, 유기 전자 용도, 예를 들어 유기 FET 및 유기 TFT와 같은 스위칭 부재, 유기 태양 전지 및 유기 발광 다이오드(OLED)로부터 선택되는 용도에 사용하는 데 특히 적합하며, 상기 화합물 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물은 특히 형광 발광체와의 조합에서 발광층 중 매트릭스 물질로서, 및/또는 정공 및/또는 여기자 차단체 물질로서, 및/또는 전자 및/또는 여기자 차단체 물질로서 사용하는 데 OLED에 특히 적합하다. OLED 중 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 본 발명

의 화합물을 사용하는 경우, 효율이 우수하고 수명이 길며, 특히 낮은 사용 및 작용 전압에서 작동될 수 있는 OLED가 얻어진다. 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 본 발명의 화합물은 특히 청색 및 녹색 발광체, 예를 들어 담청색 또는 심청색(deep blue) 발광체를 위한 매트릭스 및/또는 정공/여기자 차단체 물질로서 사용하는 데 적합하며, 이들은 특히 인광성 발광체이다. 또한, 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물은 스위칭 부재 및 유기 태양 전지로부터 선택되는 유기 전자 용도에 전도체/상보 물질로서 사용될 수 있다.

[0050] 본 발명의 내용에서, 용어 아릴 라디칼 또는 기, 헤테로아릴 라디칼 또는 기, 알킬 라디칼 또는 기, 시클로알킬 라디칼 또는 기, 헤테로시클로알킬 라디칼 또는 기, 알케닐 라디칼 또는 기, 알키닐 라디칼 또는 기, 아랄킬 라디칼 또는 기, 및 공여체 및/또는 수용체 작용을 갖는 기는 각각 하기와 같이 정의된다:

[0051] 아릴 라디칼(또는 기)은 6~30개의 탄소 원자, 바람직하게는 6~18개의 탄소 원자의 기본 골격을 갖고, 방향족 고리 또는 복수의 융합된 방향족 고리로부터 형성되는 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다. 적합한 기본 골격으로는, 예를 들어 페닐, 나프틸, 안트라세닐 또는 페난트레닐, 인데닐 또는 플루오레닐이 있다. 이러한 기본 골격은 비치환되거나(즉, 치환가능한 모든 탄소 원자가 수소 원자를 가짐), 그 기본 골격의 하나, 하나 이상 또는 모든 치환가능한 위치에서 치환될 수 있다.

[0052] 적합한 치환기로는, 예를 들어 듀테튬, 알콕시 라디칼, 아릴옥시 라디칼, 알킬아미노기, 아릴아미노기, 카르바졸릴기, 실릴기, SiR<sup>16</sup>R<sup>17</sup>R<sup>18</sup> (적합한 실릴기 SiR<sup>16</sup>R<sup>17</sup>R<sup>18</sup>는 하기 명시됨), 알킬 라디칼, 바람직하게는 1~8개의 탄소 원자를 갖는 알킬 라디칼, 더욱 바람직하게는 메틸, 에틸 또는 i-프로필, 아릴 라디칼, 바람직하게는 C<sub>6</sub>-아릴 라디칼 (이는 결과적으로 치환되거나 비치환될 수 있음), 헤테로아릴 라디칼, 바람직하게는 1 이상의 질소 원자를 포함하는 헤테로아릴 라디칼, 더욱 바람직하게는 피리딜 라디칼 및 카르바졸릴 라디칼, 알케닐 라디칼, 바람직하게는 하나의 이중 결합을 갖는 알케닐 라디칼, 더욱 바람직하게는 하나의 이중 결합 및 1~8개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 라디칼, 알키닐 라디칼, 바람직하게는 하나의 삼중 결합을 갖는 알키닐 라디칼, 더욱 바람직하게는 하나의 삼중 결합 및 1~8개의 탄소 원자를 갖는 알키닐 라디칼, 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기, 또는 스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기가 있다. 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 적합한 기는 하기 명시되어 있다. 더욱 바람직하게는, 치환된 아릴 라디칼은 메틸, 에틸, 이소프로필, 알콕시, 헤테로아릴, 할로젠, 유사할로젠 및 아미노, 바람직하게는 아릴아미노로 구성된 군으로부터 선택되는 치환기를 가진다. 상기 아릴 라디칼 또는 아릴 기는 바람직하게는 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>-아릴 라디칼, 더욱 바람직하게는 C<sub>6</sub>-아릴 라디칼이고, 이는 전술한 치환기들 중 1 이상 또는 1 초과에 의해 임의로 치환된다. 더욱 바람직하게는, 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>-아릴 라디칼, 바람직하게는 C<sub>6</sub>-아릴 라디칼은 전술한 치환기들 중 0개, 1개, 2개, 3개 또는 4개, 가장 바람직하게는 0개, 1개 또는 2개를 가진다.

[0053] 헤테로아릴 라디칼 또는 헤테로아릴 기는, 상기 아릴 라디칼의 기본 골격에서 1 이상의 탄소 원자가 이종원자와 치환되고, 상기 헤테로아릴 라디칼의 기본 골격이 바람직하게는 5~18개의 고리 원자를 가진다는 점에서, 전술한 아릴 라디칼과 상이한 라디칼을 의미한다. 바람직한 이종원자는 N, O 및 S이다. 특히 바람직한 적합한 헤테로아릴 라디칼은 질소 함유 헤테로아릴 라디칼이다. 더욱 바람직하게는, 상기 기본 골격 중 1개 또는 2개의 탄소 원자를 이종원자, 바람직하게는 질소에 의해 치환된다. 특히 바람직하게는, 상기 기본 골격은 피리딘, 피리미딘 및 5원 헤테로방향족, 예컨대 피롤, 푸란, 피라졸, 이미다졸, 티오펜, 옥사졸, 티아졸, 트리아졸과 같은 시스템으로부터 선택된다. 또한, 상기 헤테로아릴 라디칼은 융합된 고리계, 예를 들어 벤조푸릴, 벤조티에닐, 벤조피롤릴, 디벤조푸릴, 디벤조티에닐, 페난트롤리닐, 카르바졸릴 라디칼, 아자카르바졸릴 라디칼 또는 디아자카르바졸릴 라디칼일 수 있다. 상기 기초 골격은 그 기본 골격의 하나, 하나 초과 또는 모든 치환가능한 위치에 치환될 수 있다. 적합한 치환기는 상기 아릴기에 대해서 이미 명시된 것과 동일하다.

[0054] 알킬 라디칼 또는 알킬 기는 1~20개의 탄소 원자, 바람직하게는 1~10개의 탄소 원자, 더욱 바람직하게는 1~8개, 가장 바람직하게는 1~4개의 탄소 원자를 갖는 라디칼을 갖는 것으로 이해된다. 이러한 알킬 라디칼은 분지쇄형이거나, 비분지쇄형이며, 1 이상의 이종원자, 바람직하게는 Si, N, O 또는 S, 더욱 바람직하게는 N, O 또는 S가 임의로 개재할 수 있다. 또한, 이러한 알킬 라디칼은 상기 아릴기에 대해서 명시된 1 이상의 치환기에 의해 치환될 수 있다. 또한, 본 발명에 따라 존재하는 알킬 라디칼은 1 이상의 할로젠 원자, 예를 들어, F, Cl, Br 또는 I, 특히 F를 가질 수 있다. 추가 실시양태에서, 본 발명에 따라 존재하는 알킬 라디칼은 완전히 불화될 수 있다. 마찬가지로, 상기 알킬 라디칼은 1 이상의 (헤테로)아릴기를 갖는 것이 가능하다. 따라서, 본 원의 내용에서, 예를 들어 벤질 라디칼은 치환된 알킬 라디칼이다. 전술된 모든 (헤테로)아릴기가 적합하다. 상기 알킬 라디칼은 메틸, 에틸, 이소프로필, n-프로필, n-부틸, 이소부틸 및 t-부틸로 구성된 군으로부터 선택되는 것이

더욱 바람직하며; 메틸 및 에틸이 매우 특히 바람직하다.

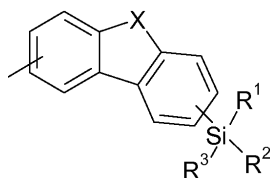
- [0055] 시클로알킬 라디칼 또는 시클로알킬 기는 3~20개의 탄소 원자, 바람직하게는 3~10개의 탄소 원자, 더욱 바람직하게는 3~8개의 탄소 원자를 갖는 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다. 이러한 기본 골격은 비치환되거나(즉, 치환가능한 모든 탄소 원자는 수소 원자를 가짐), 그 기본 골격의 하나, 하나 초과 또는 모든 치환가능한 위치에서 치환될 수 있다. 적합한 치환기는 아릴 라디칼에 대해서 이미 상기 명시된 기이다. 마찬가지로, 상기 시클로알킬 라디칼은 1 이상의 (헤테로)아릴 기를 가지는 것이 가능하다. 적합한 시클로알킬 라디칼의 예로는 시클로프로필, 시클로펜틸 및 시클로헥실이 있다.
- [0056] 헤테로시클로알킬 라디칼 또는 헤테로시클로알킬 기는, 상기 시클로알킬 라디칼의 기본 골격에서 1 이상의 탄소 원자가 이종원자로 치환된다는 점에서 전술한 시클로알킬 라디칼과 다른 라디칼을 의미한다. 바람직한 이종원자는 N, O 및 S이다. 가장 바람직하게는, 시클로알킬 라디칼의 기본 골격의 1개 또는 2개의 탄소 원자가 이종원자에 의해 치환된다. 적합한 헤테로시클로알킬 라디칼의 예로는 피롤리딘, 피페리딘, 피페라진, 테트라히드로푸란, 디옥산으로부터 유도된 라디칼이다.
- [0057] 알케닐 라디칼 또는 알케닐 기는, 상기 알킬 라디칼의 1 이상의 C-C 단일 결합이 C-C 이중 결합으로 대체된다는 점이 다른, 2 이상의 탄소 원자를 갖는 전술한 알킬 라디칼에 해당하는 라디칼을 의미한다. 상기 알킬 라디칼은 바람직하게는 하나 또는 2개의 이중 결합을 가진다.
- [0058] 알키닐 라디칼 또는 알키닐 기는, 상기 알킬 라디칼의 1 이상의 C-C 단일 결합이 C-C 삼중 결합으로 대체된다는 점이 다른, 2 이상의 탄소 원자를 갖는 전술한 알킬 라디칼에 해당하는 라디칼을 의미한다. 상기 알케닐 라디칼은 바람직하게는 하나 또는 2개의 삼중 결합을 가진다.
- [0059]  $\text{SiR}^{16}\text{R}^{17}\text{R}^{18}$  기는 실릴 라디칼을 의미하는 것으로 이해되며, 여기서
- [0060]  $\text{R}^{16}$ ,  $\text{R}^{17}$  및  $\text{R}^{18}$ 는 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 또는  $\text{OR}^{22}$ 이다.
- [0061]  $\text{SiR}^{23}\text{R}^{24}\text{R}^{25}$  기는 실릴 라디칼을 의미하는 것으로 이해되며, 여기서
- [0062]  $\text{R}^{23}$ ,  $\text{R}^{24}$  및  $\text{R}^{25}$ 는 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴 또는  $\text{OR}^{22}$ 이다.
- [0063] 본 원의 내용에서, 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기 또는 치환기는 하기 기를 의미하는 것으로 이해된다:
- [0064] 공여체 작용을 갖는 기는 +I 및/또는 +M 효과를 갖는 기를 의미하는 것으로 이해되고, 수용체 작용을 갖는 기는 -I 및/또는 +M 효과를 갖는 기를 의미하는 것으로 이해된다. 바람직한 적합한 기는  $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ -알콕시,  $\text{C}_6\text{-C}_{30}$ -아릴옥시,  $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ -알킬티오,  $\text{C}_6\text{-C}_{30}$ -아릴티오,  $\text{SiR}^{19}\text{R}^{20}\text{R}^{21}$ ,  $\text{OR}^{22}$ , 할로젠 라디칼, 할로젠화  $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ -알킬 라디칼, 카르보닐( $-\text{CO}(\text{R}^{19})$ ), 카르보닐티오( $-\text{C}=\text{O}(\text{SR}^{19})$ ), 카르보닐옥시( $-\text{C}=\text{O}(\text{OR}^{19})$ ), 옥시카르보닐( $-\text{OC}=\text{O}(\text{R}^{19})$ ), 티오키카르보닐( $-\text{SC}=\text{O}(\text{R}^{19})$ ), 아미노( $-\text{NR}^{19}\text{R}^{20}$ ), 유사할로젠 라디칼, 아미도( $-\text{C}=\text{O}(\text{NR}^{19})$ ),  $-\text{NR}^{19}\text{C}=\text{O}(\text{R}^{21})$ , 포스포네이트( $-\text{P}(\text{O})(\text{OR}^{19})_2$ ), 포스페이트( $-\text{OP}(\text{O})(\text{OR}^{19})_2$ ), 포스핀( $-\text{PR}^{19}\text{R}^{20}$ ), 포스핀 옥사이드( $-\text{P}(\text{O})\text{R}^{19}_2$ ), 셀레이트( $-\text{OS}(\text{O})_2\text{OR}^{19}$ ), 설폭사이드( $-\text{S}(\text{O})\text{R}^{19}$ ), 설포네이트( $-\text{S}(\text{O})_2\text{OR}^{19}$ ), 설포닐( $-\text{S}(\text{O})_2\text{R}^{19}$ ), 설포나미드( $-\text{S}(\text{O})_2\text{NR}^{19}\text{R}^{20}$ ),  $\text{NO}_2$ , 보론산 에스테르( $-\text{OB}(\text{OR}^{19})_2$ ), 이미노( $-\text{C}=\text{NR}^{19}\text{R}^{20}$ ), 보란 라디칼, 스타난 라디칼, 히드라진 라디칼, 히드라존 라디칼, 옥심 라디칼, 니트로소 기, 디아조 기, 비닐 기, 설폭시민, 알란, 게르만, 보록심 및 보라진으로부터 선택된다.
- [0065] 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 전술한 기에서 언급된  $\text{R}^{19}$ ,  $\text{R}^{20}$  및  $\text{R}^{21}$  라디칼은 각각 독립적으로 하기와 같다:
- [0066] 치환되거나 비치환된  $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ -알킬 또는 치환되거나 비치환된  $\text{C}_6\text{-C}_{30}$ -아릴 또는  $\text{OR}^{22}$ , 적합하고 바람직한 알킬 및 아릴 라디칼은 상기 명시됨. 상기  $\text{R}^{19}$ ,  $\text{R}^{20}$  및  $\text{R}^{21}$  라디칼은 더욱 바람직하게는 각각  $\text{C}_1\text{-C}_6$ -알킬, 예를 들어 메틸, 에틸 또는 i-프로필 또는 페닐이다. 바람직한 실시양태에서,  $\text{SiR}^{19}\text{R}^{20}\text{R}^{21}$ 의 경우에,  $\text{R}^{19}$ ,  $\text{R}^{20}$  및  $\text{R}^{21}$ 은 바람직하게는 각각 독립적으로 치환되거나 비치환된  $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ -알킬 또는 치환되거나 비치환된 아릴, 바람직하게는 페닐이다.
- [0067] 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 바람직한 치환체는 하기로 구성된 군으로부터 선택된다:



- [0068] C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>-알콕시, 바람직하게는 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-알콕시, 더욱 바람직하게는 에톡시 또는 메톡시; C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>-아릴옥시, 바람직하게는 C<sub>6</sub>-C<sub>10</sub>-아릴옥시, 더욱 바람직하게는 페닐옥시; SiR<sup>19</sup>R<sup>20</sup>R<sup>21</sup>, 여기서, R<sup>19</sup>, R<sup>20</sup> 및 R<sup>21</sup>은 바람직하게는 각각 독립적으로 치환되거나 비치환된 알킬 또는 치환되거나 비치환된 아릴. 바람직하게는 페닐임; 더욱 바람직하게는 상기 R<sup>19</sup>, R<sup>20</sup> 또는 R<sup>21</sup> 중 1 이상은 치환되거나 비치환된 페닐이며, 적합한 치환기는 상기 명시됨; 할로젠 라디칼, 바람직하게는 F, Cl, 더욱 바람직하게는 F, 할로젠화 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>-알킬 라디칼, 바람직하게는 할로젠화 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-알킬 라디칼, 가장 바람직하게는 불화 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-알킬라디칼, 예를 들어, CF<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>F, CHF<sub>2</sub> 또는 C<sub>2</sub>F<sub>5</sub>; 아미노, 바람직하게는 디메틸아미노, 디에틸아미노 또는 디아릴아미노, 더욱 바람직하게는 디아릴아미노; 유사할로젠 라디칼, 바람직하게는 CN, -C(O)OC<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬, 바람직하게는 -C(O)OMe, P(O)R<sub>2</sub>, 바람직하게는 P(O)Ph<sub>2</sub>.
- [0069] 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 매우 특히 바람직한 치환기는 메톡시, 페닐옥시, 할로젠화 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬, 바람직하게는 CF<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>F, CHF<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>F<sub>5</sub>, 할로젠, 바람직하게는 F, CN, SiR<sup>19</sup>R<sup>20</sup>R<sup>21</sup>(적합한 R<sup>19</sup>, R<sup>20</sup> 및 R<sup>21</sup> 기는 이미 명시되어 있음), 디아릴아미노(NR<sup>19</sup>R<sup>20</sup>, 여기서 R<sup>19</sup>, R<sup>20</sup>은 각각 C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>-아릴임), -C(O)OC<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬, 바람직하게는 -C(O)OMe, P(O)Ph<sub>2</sub>로 구성된 군으로부터 선택된다.
- [0070] 할로젠 기는 바람직하게는 F, Cl 및 Br, 더욱 바람직하게는 F 및 Cl, 가장 바람직하게는 F를 의미하는 것으로 이해된다.
- [0071] 유사할로젠 기는 바람직하게는 CN, SCN 및 OCN, 더욱 바람직하게는 CN이다.
- [0072] 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 전술한 기는, 본 발명에서 명시되어 있으나 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기들의 상기 목록에 포함되지 않은 추가 라디칼 및 치환기가 공여체 또는 수용체 작용을 갖는다는 것을 배제하지 않는다.
- [0073] 상기 아릴 라디칼 또는 기, 헤테로아릴 라디칼 또는 기, 알킬 라디칼 또는 기, 시클로알킬 라디칼 또는 기, 헤테로시클로알킬 라디칼 또는 기, 알케닐 라디칼 또는 기, 및 공여체 및/또는 수용체 작용을 갖는 기는 전술한 바와 같이 치환되거나 비치환될 수 있다. 본 발명의 내용에서, 비치환된 기는 상기 기의 치환가능한 원자가 수소 원자를 갖는 기를 의미하는 것을 이해된다. 본 원의 내용에서, 1 이상의 치환가능한 원자(들)은 1 이상의 위치에서 수소 원자 대신에 치환기를 가지는 기를 의미하는 것으로 이해된다. 적합한 치환기는 아릴 라디칼 또는 기에 대해서 이미 전술한 치환기이다.
- [0074] 동일한 숫자를 갖는 라디칼이 본 발명의 화합물에서 1회 이상 발생하는 경우, 이러한 라디칼은 각각 독립적으로 명시된 정의를 가질 수 있다.
- [0075] 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 중 X 라디칼은 NR, S, O 또는 PR, 바람직하게는 NR, S 또는 O이며, 더욱 바람직하게는 O 또는 S, 가장 바람직하게는 O이다.
- [0076] R 라디칼은 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬, 바람직하게는 아릴, 헤테로아릴 또는 알킬, 더욱 바람직하게는 아릴이며, 여기서 전술한 라디칼은 비치환되거나 치환될 수 있다. 적합한 치환기가 상기 명시되어 있다. R은 더욱 바람직하게는 전술한 치환기에 의해 치환되거나 비치환될 수 있는 페닐이다. R은 가장 바람직하게는 비치환된 페닐이다.
- [0077] 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 중 A 기는 -NR<sup>6,7</sup>, -P(O)R<sup>8,9</sup>, -PR<sup>10,11</sup>, -S(O)<sub>2</sub>R<sup>12</sup>, -S(O)R<sup>13</sup>, -SR<sup>14</sup> 또는 -OR<sup>15</sup>; 바람직하게는 NR<sup>6,7</sup>, -P(O)R<sup>8,9</sup> 또는 -OR<sup>15</sup>, 더욱 바람직하게는 -NR<sup>6,7</sup>이다.
- [0078] 상기 R<sup>6</sup>~R<sup>15</sup>는 각각 하기와 같이 정의된다:
- [0079] R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup>은 질소 원자와 함께, 3~10개의 고리 원자를 갖는 환형 라디칼을 형성하고, 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기의 군으로부터 선택되는 1 이상의 치환기에 의해 비치환되거나 치환될 수 있고, 및/또는 3~10개의 고리 원자를 갖는 1 이상의 추가 환형 라디칼에 융합될 수 있으며, 여기서 상기 융합된 라디칼은 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기, 및 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택되는 1 이상의 치환

기에 의해 치환되거나 비치환될 수 있고;

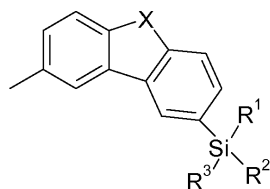
- [0080]  $R^8$ ,  $R^9$ ,  $R^{10}$ ,  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$ ,  $R^{14}$ ,  $R^{15}$ ,  $R^{23}$ ,  $R^{24}$ ,  $R^{25}$ 는 각각 독립적으로 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬, 스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기, 바람직하게는 아릴 또는 헤테로아릴 (여기서 상기 라디칼 기는 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택되는 라디칼 중 1 이상에 의해 치환되거나 비치환될 수 있음), 더욱 바람직하게는 비치환되거나 치환된 페닐(적합한 치환기는 상기 명시됨), 예를 들어 톨릴 또는 하기 화학식의 기이다.



[0081]

- [0082] 상기 식 중, X 기 및  $R^1$ ,  $R^2$  및  $R^3$ 는 각각 독립적으로 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물에 대해 정의된 바와 같다.

- [0083]  $R^8$ ,  $R^9$ ,  $R^{10}$ ,  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$ ,  $R^{14}$  및  $R^{15}$ 는 가장 바람직하게는 각각 독립적으로 페닐, 톨릴 또는 하기 화학식의 기이다.



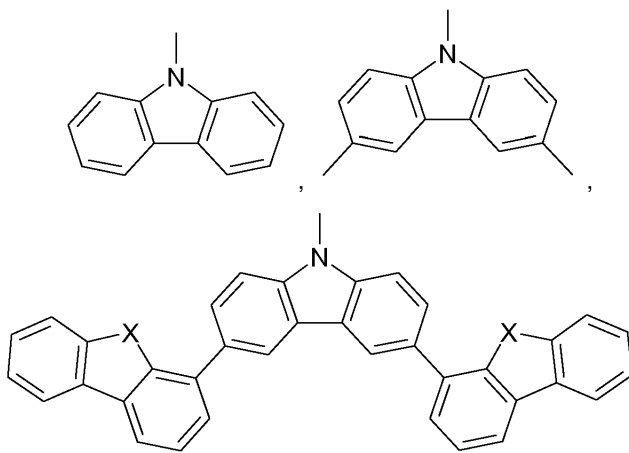
[0084]

- [0085] 상기 식 중, X는 NPh, S 또는 O이다.

- [0086] 적합한  $-NR^6R^7$  기의 예로는 바람직하게는 피롤릴, 2,5-디히드로-1-피롤릴, 피롤리디닐, 인돌릴, 인돌리닐, 이소인돌리닐, 카르바졸릴, 아자카르바졸릴, 디아자카르바졸릴, 이미다졸릴, 이미다졸리닐, 벤즈이미다졸릴, 피라졸릴, 인다졸릴, 1,2,3-트리아졸릴, 벤조트리아졸릴, 1,2,4-트리아졸릴, 테트라졸릴, 1,3-옥사졸릴, 1,3-티아졸릴, 피페리딜, 모르폴리닐, 9,10-디히드로아크리디닐 및 1,4-옥사지닐로부터 선택되고, 여기서 전술한 기는 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택된 1 이상의 치환기에 의해 치환되거나 비치환될 수 있으며, 상기  $-NR^6R^7$  기는 바람직하게는 카르바졸릴, 피롤릴, 인돌릴, 이미다졸릴, 벤즈이미다졸릴, 아자카르바졸릴 및 디아자카르바졸릴로부터 선택되고, 여기서 전술한 기는 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택된 1 이상의 치환기에 의해 치환되거나 비치환될 수 있으며, 상기  $-NR^6R^7$  기는 더욱 바람직하게는 카르바졸릴이고, 이는 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 및 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기로부터 선택된 1 이상의 치환기에 의해 치환되거나 비치환될 수 있다.

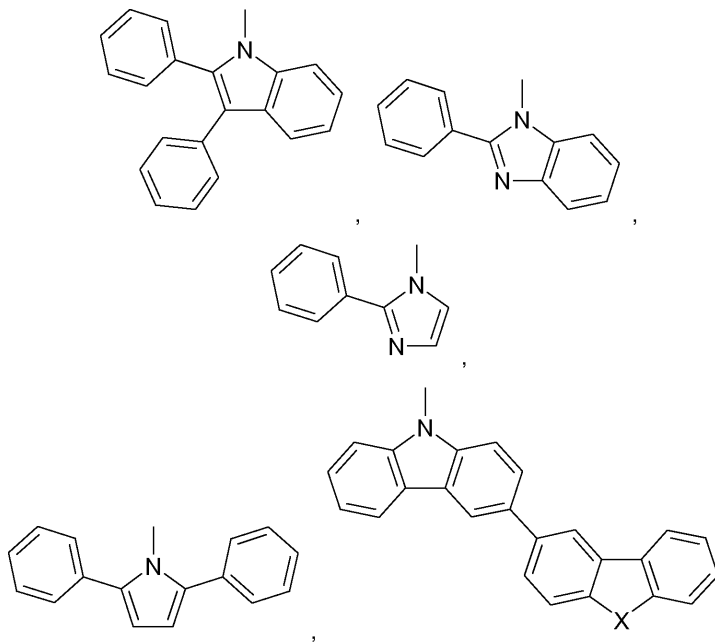


[0087] 더욱 바람직하게는  $-NR^6R^7$ 은 하기 기가 있다:



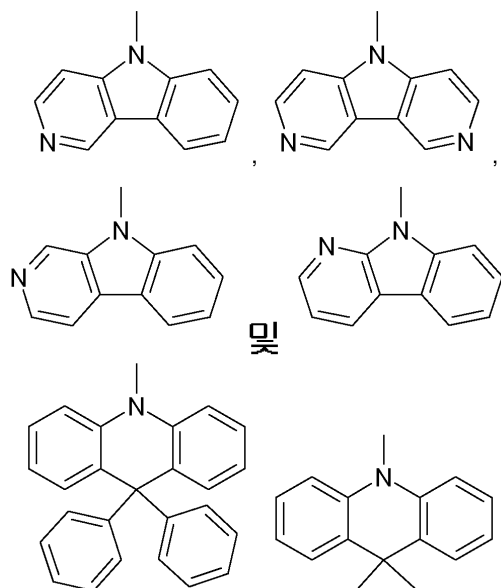
[0088]

[0089] [상기 식 중, X는 NPh, S 또는 O임],



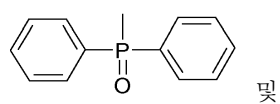
[0090]

[0091] [상기 식 중, X는 NPh, S 또는 O임],

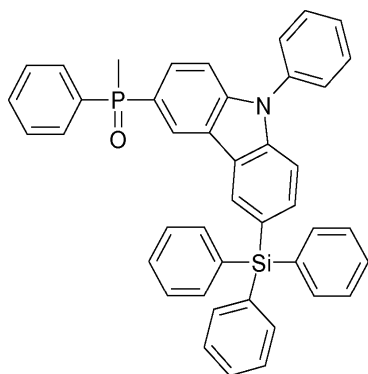


[0092]

[0093] 특히 바람직한  $-P(O)R^8R^9$  기는 하기 기가 있다:

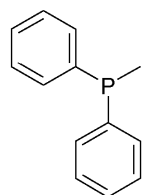


[0094]



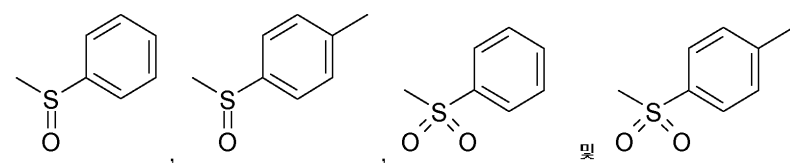
[0095]

[0096] 특히 바람직한  $PR^{10}R^{11}$  기는 하기 기가 있다:



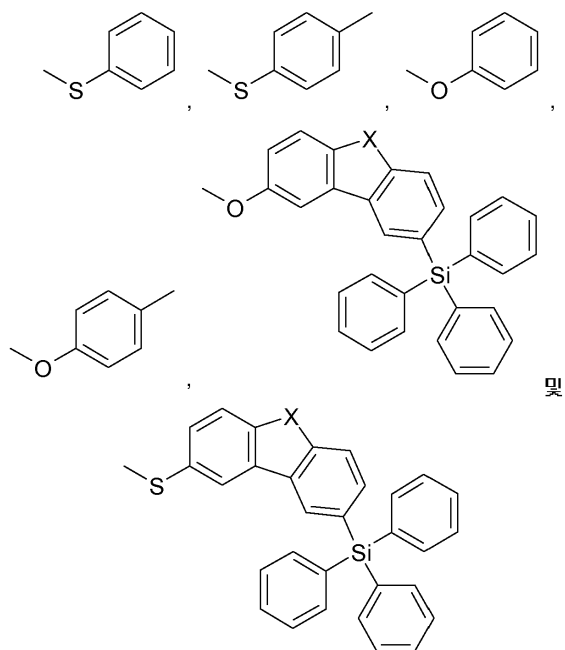
[0097]

[0098] 특히 바람직한  $-S(O)_2R^{12}$  및  $-S(O)R^{13}$  기는 하기 기가 있다:



[0099]

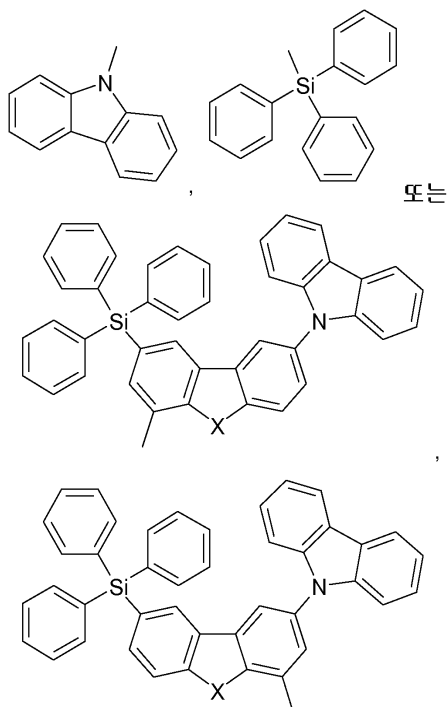
[0100] 특히 바람직한  $-SR^{14}$  및  $-OR^{15}$  는 하기 기가 있다:



[0101]

[0102] 상기 식 중, X는 각 경우에 NPh, S 또는 O이다.

[0103] 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물에서의  $R^4$ ,  $R^5$ 는 각각 독립적으로 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 추가 A 기, 스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기, 또는 공여체 또는 수용체 작용기를 갖는 기; 바람직하게는 각각 독립적으로 알킬, 아릴, 헤테로아릴, 또는 공여체 또는 수용체 작용을 갖는 기이다. 예를 들어,  $R^4$  또는  $R^5$ 는 각각 독립적으로 하기의 기일 수 있다:



[0104]

[0105] 상기 식 중, X는 NPh, S 또는 O이다.

[0106] 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물에서,  $nR^4$  기 및/또는  $mR^5$  기가 존재하며, 여기서

[0107] n, m은 각각 독립적으로 0, 1, 2 또는 3; 바람직하게는 각각 독립적으로 0, 1 또는 2이다. 가장 바람직하게는

적어도 n 또는 m은 0이다.

[0108] 일반적으로 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물에서의  $R^{22}$ 는 독립적으로  $SiR^{23}R^{24}R^{25}$ , 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬, 스페이서에 의해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기이며, 이는  $OR^{28}$  기, 바람직하게는 아릴, 알킬, 임의로  $OR^{28}$ 에 의해 치환되고, 더욱 바람직하게는 아릴, 알킬에 의해 임의로 치환된다.

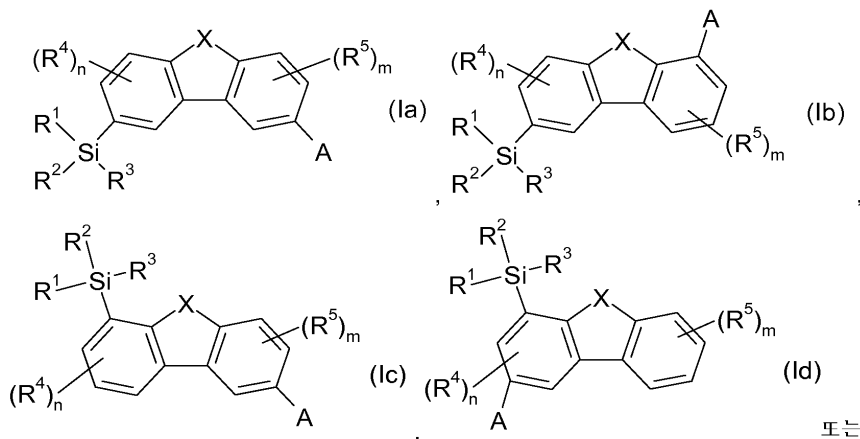
[0109] 일반적으로 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물에서의  $R^{28}$ 은 독립적으로  $SiR^{23}R^{24}R^{25}$ , 독립적으로 아릴, 헤테로아릴, 알킬, 시클로알킬 또는 헤테로시클로알킬, 스페이서를 통한 가교결합성 또는 중합성 기이다.

[0110] 임의로 존재하는  $OR^{28}$  치환기는 당업자에게 적합한 것으로 확인된 모든 위치에서, 일반적으로 언급되는 라디칼에 존재할 수 있다.

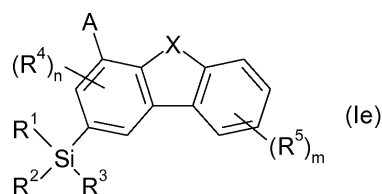
[0111] 본 발명의 추가의 바람직한 실시양태에서, 화학식 (I) 및/또는 (I\*)의 2개의 단위는, 1 이상의 이중원자가 개재하는 선형 또는 분지형의 포화 또는 불포화 가교를 통해 또는 O를 통해 서로 가교되며, 여기서 화학식 (I) 및/또는 (I\*)에서의 이러한 가교는 각 경우에  $R^2$  대신에 규소 원자에 결합된다.

[0112] 상기 가교는  $-CH_2-$ ,  $-C_2H_4-$ ,  $-C_3H_6-$ ,  $-C_4H_8-$ ,  $-C_8H_{12}-$ ,  $-C_8H_{16}-$ ,  $-C_9H_{18}-$ ,  $-CH(C_8H_{17})CH_2-$ ,  $-C_2H_4(CF_2)_8C_2H_4-$ ,  $-C\equiv C-$ ,  $-1,4-(CH_2)_2-$ -페닐- $(CH_2)_2-$ ,  $1,3-(CH_2)_2-$ -페닐- $(CH_2)_2-$ ,  $-1,4-$ -페닐-,  $-1,3-$ -페닐-,  $-O-$ ,  $-O-Si(CH_3)_2-O-$ ,  $-O-Si(CH_3)_2-O-Si(CH_3)_2-O-$ ,  $-O-$ 로 구성된 군으로부터 선택된다.

[0113] 본 발명의 바람직한 실시양태에서, 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물은 화학식 (Ia), (Ib) 또는 (Ic)을 가진다:



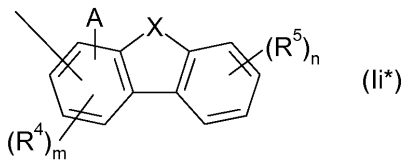
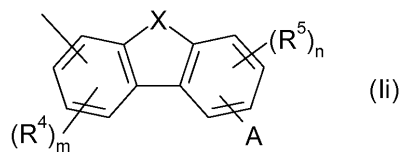
[0114]



[0115]

[0116] 상기 식 중, A, X,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$  및  $R^5$  라디칼은 각각 상기 정의한 바와 같다.

[0117] 본 발명의 추가의 바람직한 실시양태에서,  $R^1$  및/또는  $R^2$  및/또는  $R^3$ 는 하기 화학식 (Ii) 및/또는 (Ii\*)의 방향족 단위이다:



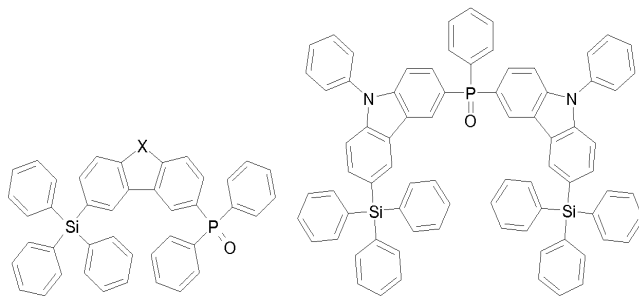
[0118]

[0119]

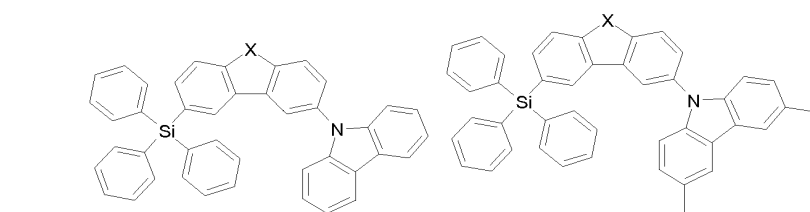
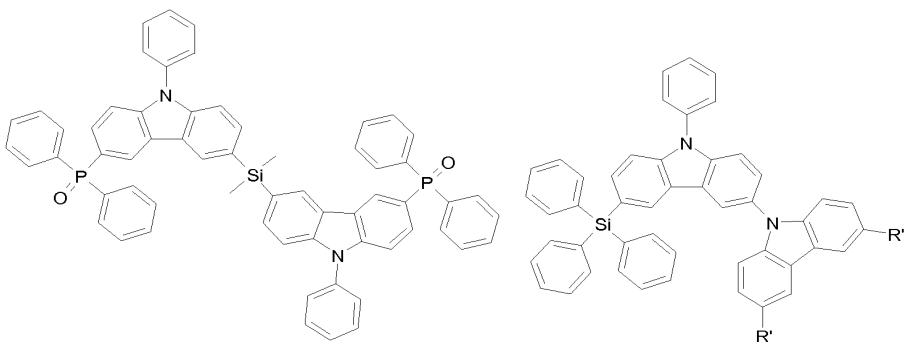
상기 식 중,  $R^4$ ,  $R^5$ , A 및 X는 각각 상기 정의한 바와 같다.

[0120]

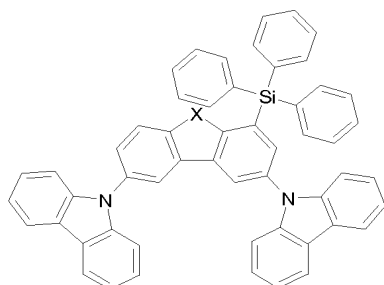
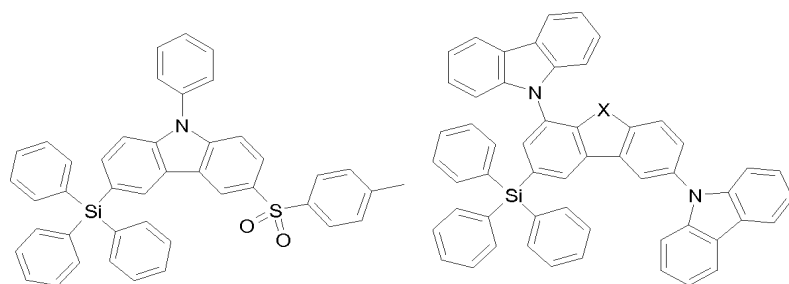
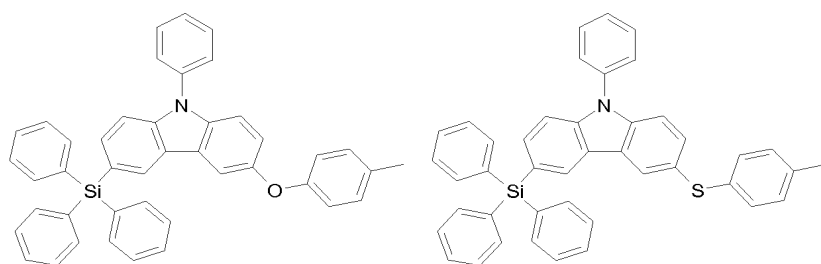
화학식 (I) 또는 (I\*)의 적합한 화합물은, 예를 들어 하기 화합물이 있다:



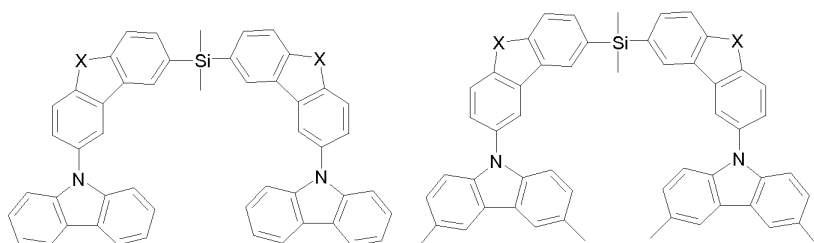
[0121]



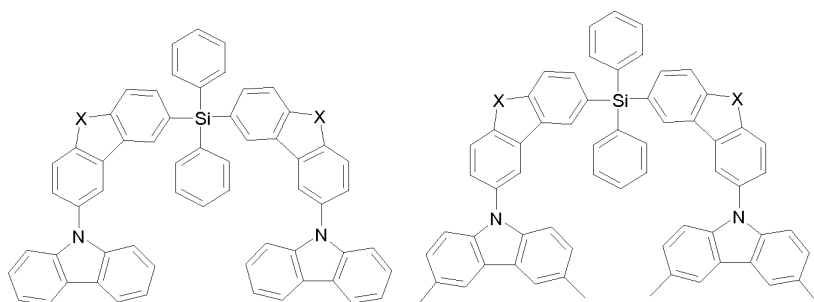
[0122]

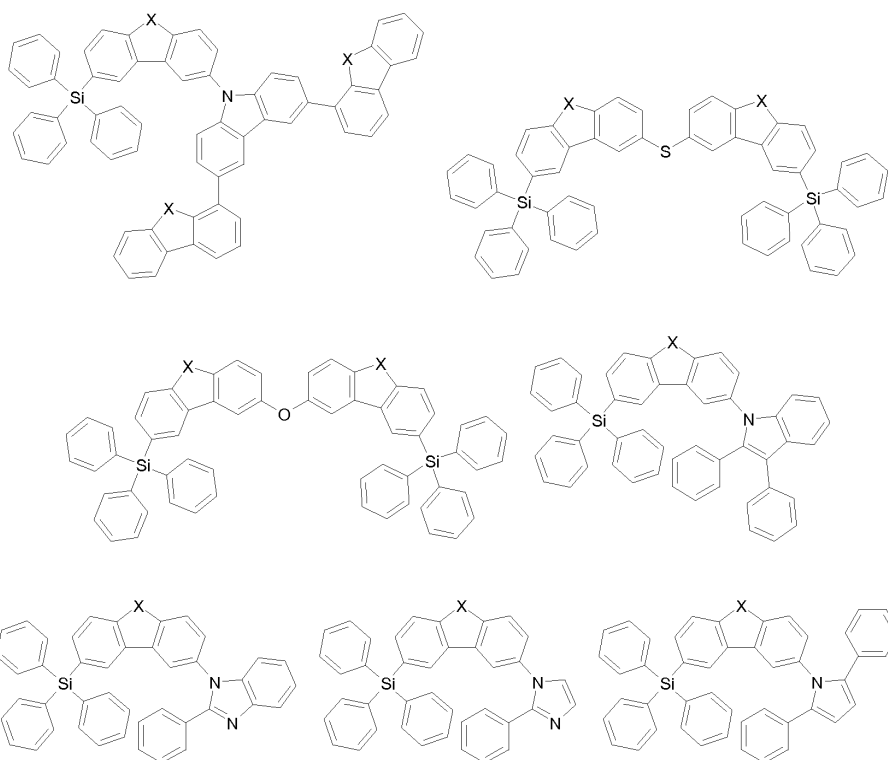


[0123]

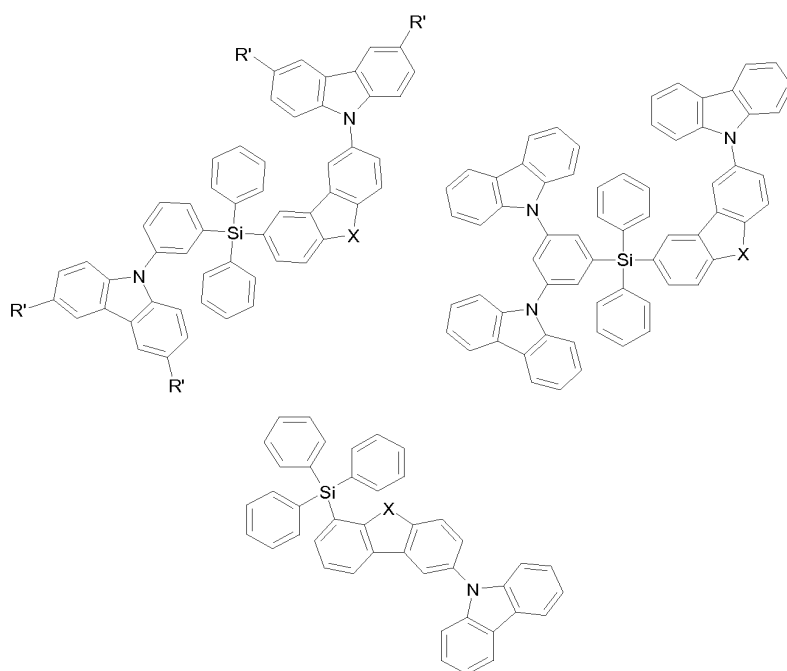


[0124]

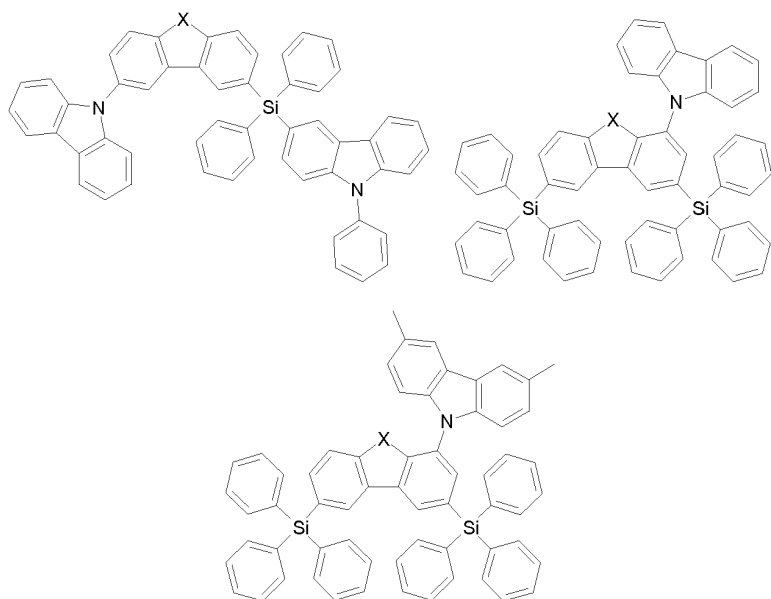




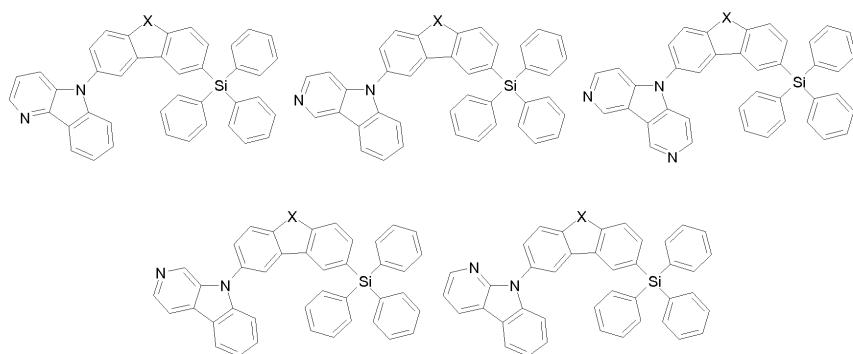
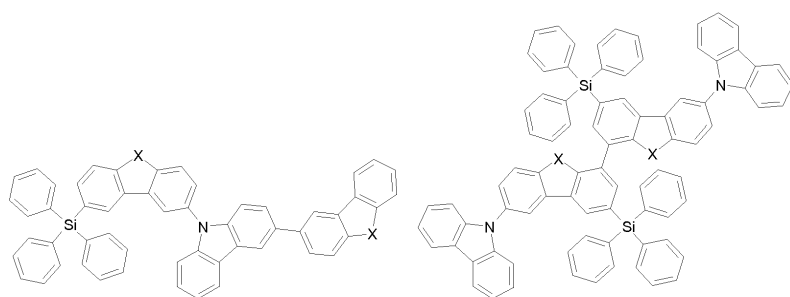
[0125]



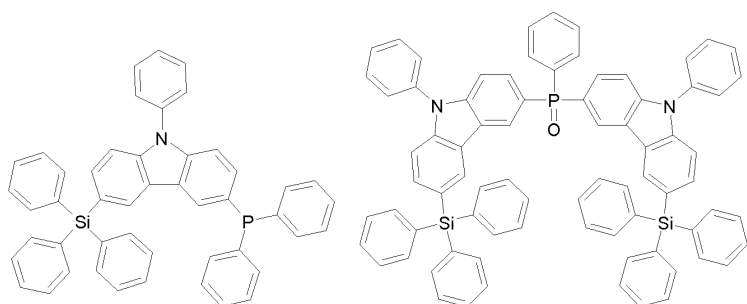
[0126]



[0127]



[0128]



[0129]

[0130]

[0131]

[0132]

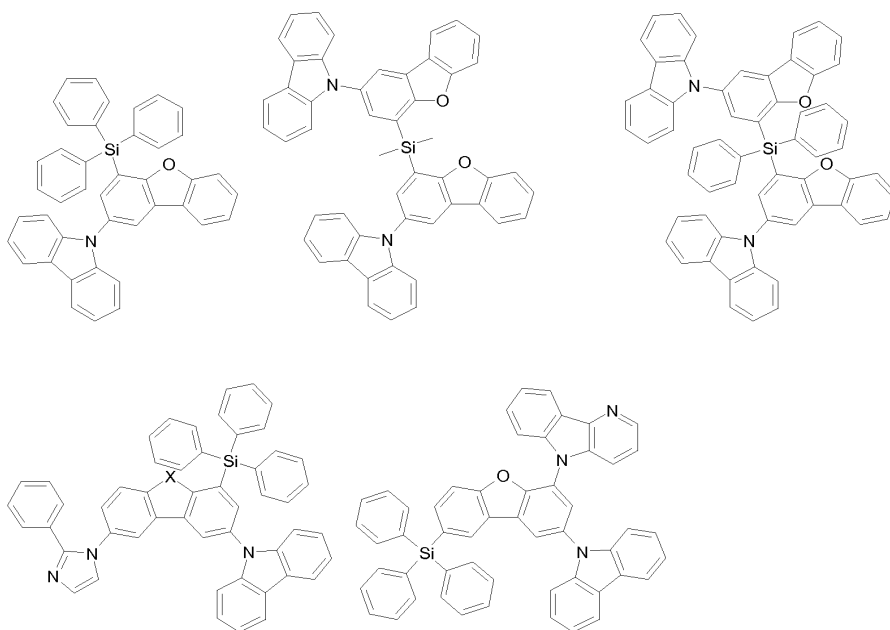
상기 식 중,

X는 S 또는 O이고,

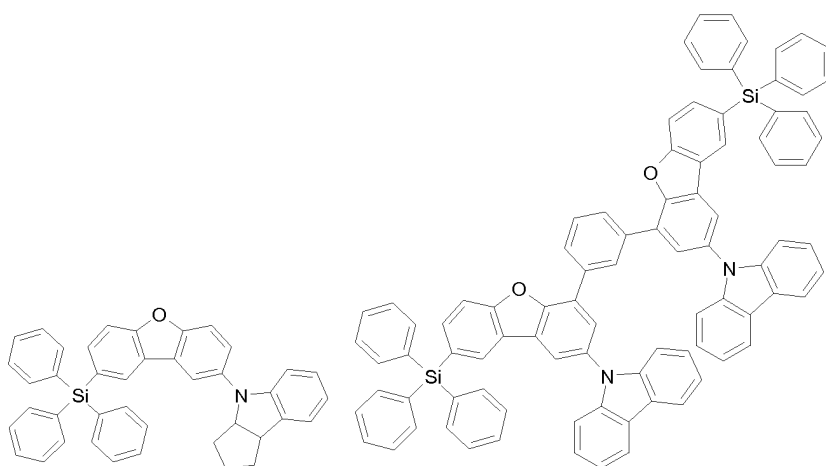
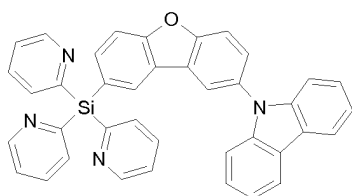
R'은 H 또는 CH<sub>3</sub>이다.



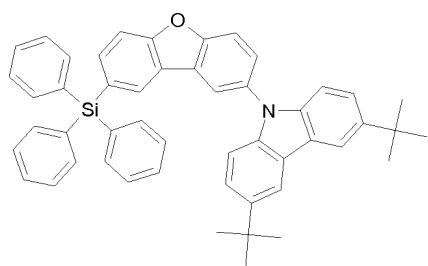
[0133] 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 추가의 특히 적합한 화합물로는 하기의 화합물이 있다:



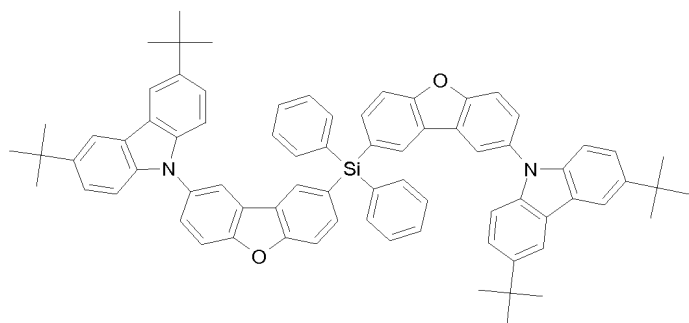
[0134]



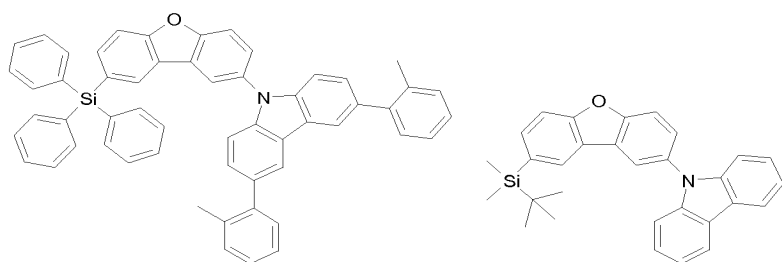
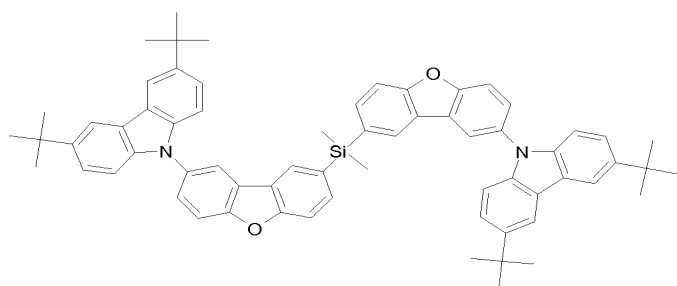
[0135]



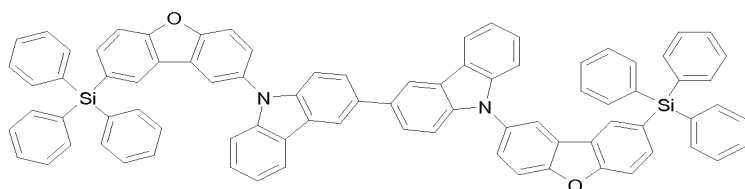
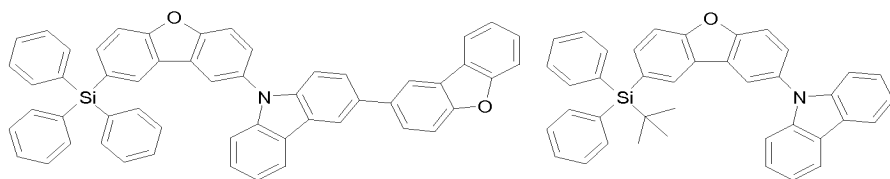
,



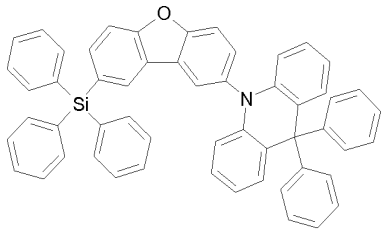
[0136]



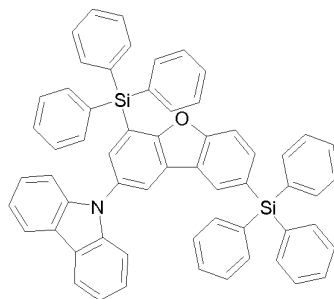
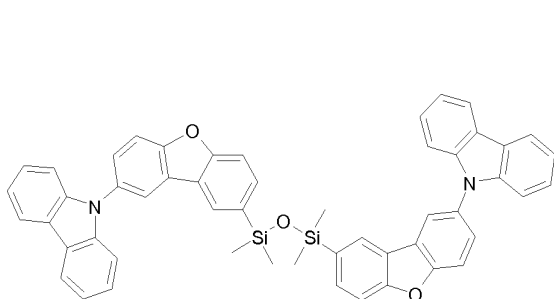
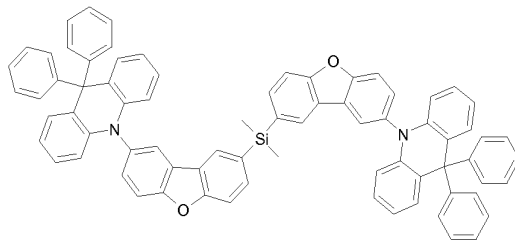
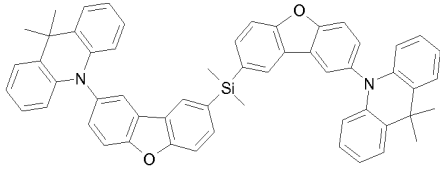
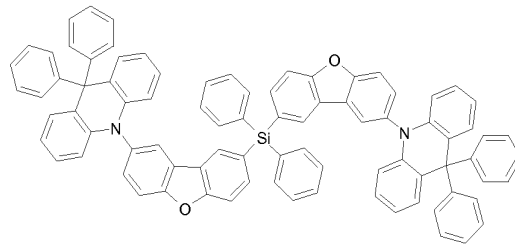
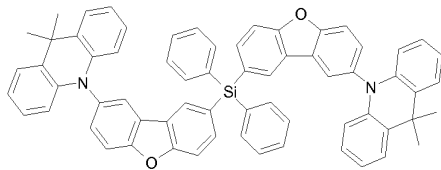
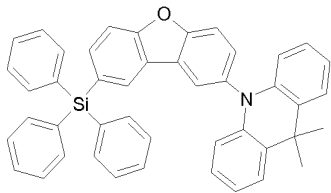
,



[0137]



,

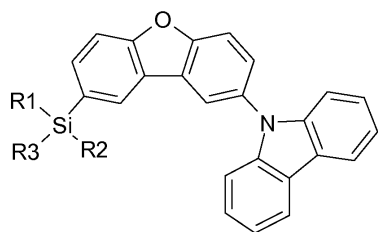


.

[0138]

[0139]

화학식 (I) 또는 (I\*)의 추가 본 발명의 화합물은 하기 화학식 (X)에 해당한다:



(X).

[0140]

[0141] 상기 화학식 (X)에서,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ 은 각각 하기 정의된 바와 같다:

No	R1	R2	R3
35	메틸	메틸	메틸
36	메틸	메틸	i-프로필
37	메틸	메틸	n-프로필
38	메틸	메틸	n-부틸
39	메틸	메틸	i-부틸
40	메틸	메틸	t-부틸
41	메틸	메틸	n-펜틸
42	메틸	메틸	n-헥실
43	메틸	메틸	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>
44	메틸	메틸	n-C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>
45	메틸	메틸	i-C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>
46	메틸	메틸	n-C <sub>10</sub> H <sub>21</sub>
47	메틸	메틸	n-C <sub>12</sub> H <sub>25</sub>
48	메틸	메틸	n-C <sub>18</sub> H <sub>37</sub>
49	메틸	메틸	n-C <sub>30</sub> H <sub>61</sub>
50	메틸	메틸	시클로헥실
51	메틸	메틸	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> Ph
52	메틸	메틸	-C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>
53	메틸	메틸	-CCH <sub>2</sub> CH(CH <sub>3</sub> )(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> )
54	메틸	메틸	-CH <sub>2</sub> CH(C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> ) <sub>2</sub>
55	메틸	메틸	-CH <sub>2</sub> CH(C <sub>12</sub> H <sub>25</sub> ) <sub>2</sub>
56	메틸	메틸	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (C <sub>3</sub> F <sub>6</sub> )CF <sub>3</sub>
57	메틸	메틸	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (C <sub>7</sub> F <sub>14</sub> )CF <sub>3</sub>
58	메틸	메틸	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> F <sub>16</sub> )CF <sub>3</sub>
59	메틸	메틸	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>
60	메틸	메틸	페닐
61	메틸	메틸	2-비페닐
62	메틸	메틸	p-톨릴
63	메틸	메틸	C <sub>6</sub> F <sub>5</sub>
64	메틸	메틸	3,5-(CF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> 페닐
65	메틸	메틸	-CH <sub>2</sub> C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> 페닐
66	메틸	메틸	9-플루오렌
67	메틸	메틸	3,6-Di(tert-butyl)-9-플루오렌
15	메틸	메틸	R5
68	메틸	메틸	-OMe
69	메틸	메틸	-OEt
70	메틸	메틸	2,4,6-t-부틸페녹시

[0142]

71	메틸	메틸	-O-tBu (tert-부톡시)
72	메틸	메틸	-OSiEt <sub>3</sub>
73	메틸	메틸	메틸
74	메틸	메틸	페닐
75	메틸	메틸	R5
76	메틸	n-프로필	n-프로필
77	메틸	n-프로필	페닐
78	메틸	n-프로필	R5
79	메틸	i-프로필	i-프로필
80	메틸	i-프로필	페닐
81	메틸	i-프로필	R5
82	메틸	n-부틸	n-부틸
83	메틸	n-부틸	페닐
84	메틸	n-부틸	R5
85	메틸	i-부틸	i-부틸
86	메틸	i-부틸	페닐
87	메틸	i-부틸	R5
88	메틸	t-부틸	t-부틸
89	메틸	t-부틸	페닐
90	메틸	t-부틸	R5
91	메틸	n-펜틸	n-펜틸
92	메틸	n-펜틸	n-헥실
93	메틸	n-펜틸	페닐
94	메틸	n-펜틸	R5
95	메틸	n-헥실	헥실
96	메틸	n-헥실	페닐
97	메틸	n-헥실	R5
98	메틸	n-헵틸	R5
99	메틸	n-옥틸	R5
100	메틸	n-데실	R5
101	메틸	n-C <sub>12</sub> H <sub>25</sub>	R5
102	메틸	n-C <sub>18</sub> H <sub>37</sub>	R5
103	메틸	n-C <sub>22</sub> H <sub>45</sub>	R5
104	메틸	n-C <sub>30</sub> H <sub>61</sub>	R5
105	메틸	시클로펜틸	시클로펜틸
106	메틸	시클로펜틸	페닐
107	메틸	시클로펜틸	R5
108	메틸	시클로헥실	시클로헥실
109	메틸	시클로헥실	페닐
110	메틸	시클로헥실	R5

[0143]

111	메틸	-CF <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>	R5
112	메틸	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	R5
113	메틸	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CF <sub>3</sub>	R5
114	메틸	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> CF <sub>3</sub>	R5
115	메틸	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> CF <sub>3</sub>	R5
116	메틸	페닐	페닐
117	메틸	페닐	p-톨릴
118	메틸	페닐	메시틸
119	메틸	페닐	R5
120	메틸	p-톨릴	p-톨릴
121	메틸	p-톨릴	R5
122	메틸	메시틸	메시틸
123	메틸	메시틸	R5
124	메틸	R5	R5
125	메틸	에톡시	에톡시
126	메틸	에톡시	에톡시
127	메틸	-OSiEt <sub>3</sub>	-OSiEt <sub>3</sub>
128	메틸	-O-SiMe <sub>2</sub> - CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-SiMe <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>
129	에틸	에틸	에틸
130	에틸	에틸	n-프로필
131	에틸	에틸	i-프로필
132	에틸	에틸	n-부틸
133	에틸	에틸	i-부틸
134	에틸	에틸	t-부틸
135	에틸	에틸	페닐
136	에틸	에틸	R5
137	에틸	페닐	페닐
138	에틸	페닐	R5
139	에틸	R5	R5
140	에틸	에톡시	에톡시
141	n-프로필	n-프로필	n-프로필
142	n-프로필	n-프로필	페닐
143	n-프로필	n-프로필	R5
144	n-프로필	페닐	페닐
145	n-프로필	페닐	R5
146	n-프로필	R5	R5
147	i-프로필	i-프로필	i-프로필
148	i-프로필	i-프로필	페닐
149	i-프로필	i-프로필	R5

[0144]

150	i-프로필	i-프로필	2-비페닐
151	i-프로필	i-프로필	에톡시
152	i-프로필	페닐	페닐
153	i-프로필	페닐	R5
154	i-프로필	R5	R5
155	n-부틸	n-부틸	n-부틸
156	n-부틸	n-부틸	페닐
157	n-부틸	n-부틸	R5
158	n-부틸	n-헥실	R5
159	n-부틸	페닐	페닐
160	n-부틸	페닐	R5
161	n-부틸	R5	R5
162	sec-부틸	sec-부틸	sec-부틸
163	sec-부틸	sec-부틸	페닐
164	sec-부틸	sec-부틸	R5
165	sec-부틸	페닐	페닐
166	sec-부틸	페닐	R5
167	sec-부틸	R5	R5
168	i-부틸	i-부틸	i-부틸
169	i-부틸	i-부틸	n-C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>
170	i-부틸	i-부틸	n-C <sub>18</sub> H <sub>37</sub>
171	i-부틸	i-부틸	페닐
172	i-부틸	i-부틸	R5
173	i-부틸	페닐	페닐
174	i-부틸	페닐	R5
175	i-부틸	R5	R5
176	t-부틸	t-부틸	t-부틸
177	t-부틸	t-부틸	n-C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>
178	t-부틸	t-부틸	페닐
179	t-부틸	t-부틸	R5
180	t-부틸	페닐	페닐
181	t-부틸	페닐	R5
182	t-부틸	R5	R5
183	n-펜틸	n-펜틸	n-펜틸
184	n-펜틸	n-펜틸	페닐
185	n-펜틸	n-펜틸	R5
186	n-펜틸	페닐	페닐
187	n-펜틸	페닐	R5
188	n-펜틸	R5	R5
189	시클로펜틸	시클로펜틸	시클로펜틸

[0145]

190	시클로펜틸	시클로펜틸	페닐
191	시클로펜틸	시클로펜틸	R5
192	시클로펜틸	페닐	페닐
193	시클로펜틸	페닐	R5
194	시클로펜틸	R5	R5
195	n-헥실	n-헥실	n-헥실
196	n-헥실	n-헥실	페닐
197	n-헥실	n-헥실	R5
198	n-헥실	페닐	페닐
199	n-헥실	페닐	R5
200	n-헥실	R5	R5
201	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>
202	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	R5
203	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	R5	R5
204	t-헥실	t-헥실	t-헥실
205	t-헥실	t-헥실	R5
206	t-헥실	R5	R5
207	n-헵틸	n-헵틸	n-헵틸
208	n-헵틸	n-헵틸	R5
209	n-헵틸	R5	R5
210	n-옥틸	n-옥틸	n-옥틸
211	n-옥틸	n-옥틸	R5
212	n-옥틸	R5	R5
213	i-옥틸	i-옥틸	i-옥틸
214	i-옥틸	i-옥틸	R5
215	i-옥틸	R5	R5
216	n-노닐	n-노닐	n-노닐
217	n-노닐	n-노닐	R5
218	n-노닐	R5	R5
219	시클로헥실	시클로헥실	시클로헥실
220	시클로헥실	시클로헥실	R5
221	시클로헥실	R5	R5
222	시클로옥틸	시클로옥틸	시클로옥틸
223	시클로옥틸	시클로옥틸	R5
224	시클로옥틸	R5	R5
225	n-C <sub>10</sub> H <sub>21</sub>	n-C <sub>10</sub> H <sub>21</sub>	n-C <sub>10</sub> H <sub>21</sub>
226	n-C <sub>10</sub> H <sub>21</sub>	n-C <sub>10</sub> H <sub>21</sub>	R5
227	n-C <sub>10</sub> H <sub>21</sub>	R5	R5
228	n-C <sub>11</sub> H <sub>23</sub>	n-C <sub>11</sub> H <sub>23</sub>	n-C <sub>11</sub> H <sub>23</sub>
229	n-C <sub>11</sub> H <sub>23</sub>	n-C <sub>11</sub> H <sub>23</sub>	R5

[0146]



230	n-C <sub>11</sub> H <sub>23</sub>	R5	R5
231	n-C <sub>12</sub> H <sub>25</sub>	n-C <sub>12</sub> H <sub>25</sub>	n-C <sub>12</sub> H <sub>25</sub>
232	n-C <sub>12</sub> H <sub>25</sub>	n-C <sub>12</sub> H <sub>25</sub>	R5
233	n-C <sub>12</sub> H <sub>25</sub>	R5	R5
234	n-C <sub>14</sub> H <sub>29</sub>	n-C <sub>14</sub> H <sub>29</sub>	n-C <sub>14</sub> H <sub>29</sub>
235	n-C <sub>14</sub> H <sub>29</sub>	n-C <sub>14</sub> H <sub>29</sub>	R5
236	n-C <sub>14</sub> H <sub>29</sub>	R5	R5
237	n-C <sub>16</sub> H <sub>33</sub>	n-C <sub>16</sub> H <sub>33</sub>	n-C <sub>16</sub> H <sub>33</sub>
238	n-C <sub>16</sub> H <sub>33</sub>	n-C <sub>16</sub> H <sub>33</sub>	R5
239	n-C <sub>16</sub> H <sub>33</sub>	R5	R5
240	n-C <sub>18</sub> H <sub>37</sub>	n-C <sub>18</sub> H <sub>37</sub>	R5
241	n-C <sub>18</sub> H <sub>37</sub>	R5	R5
242	n-C <sub>18</sub> H <sub>37</sub>	OEt	OEt
243	n-C <sub>18</sub> H <sub>37</sub>	R5	OMe
244	n-C <sub>20</sub> H <sub>41</sub>	n-C <sub>20</sub> H <sub>41</sub>	n-C <sub>20</sub> H <sub>41</sub>
245	n-C <sub>20</sub> H <sub>41</sub>	n-C <sub>20</sub> H <sub>41</sub>	R5
246	n-C <sub>20</sub> H <sub>41</sub>	R5	R5
247	n-C <sub>22</sub> H <sub>45</sub>	n-C <sub>22</sub> H <sub>45</sub>	n-C <sub>22</sub> H <sub>45</sub>
248	n-C <sub>22</sub> H <sub>45</sub>	n-C <sub>22</sub> H <sub>45</sub>	R5
249	n-C <sub>22</sub> H <sub>45</sub>	R5	R5
250	n-C <sub>26</sub> H <sub>53</sub>	n-C <sub>26</sub> H <sub>53</sub>	n-C <sub>26</sub> H <sub>53</sub>
251	n-C <sub>26</sub> H <sub>53</sub>	n-C <sub>26</sub> H <sub>53</sub>	R5
252	n-C <sub>26</sub> H <sub>53</sub>	R5	R5
253	n-C <sub>30</sub> H <sub>61</sub>	n-C <sub>30</sub> H <sub>61</sub>	n-C <sub>30</sub> H <sub>61</sub>
254	n-C <sub>30</sub> H <sub>61</sub>	n-C <sub>30</sub> H <sub>61</sub>	R5
255	n-C <sub>30</sub> H <sub>61</sub>	R5	R5
256	-CH <sub>2</sub> - 시클로헥실	-CH <sub>2</sub> - 시클로헥실	R5
257	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>
258	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	R5
259	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	R5	R5
260	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CF <sub>3</sub>
261	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CF <sub>3</sub>	R5
262	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CF <sub>3</sub>	R5	R5
263	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> CF <sub>3</sub>
264	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> CF <sub>3</sub>	R5
265	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> CF <sub>3</sub>	R5	R5
266	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> CF <sub>3</sub>
267	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> CF <sub>3</sub>	R5
268	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> CF <sub>3</sub>	R5	R5
269	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> CF <sub>3</sub>

[0147]

270	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> CF <sub>3</sub>	R5
271	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> CF <sub>3</sub>	R5	R5
272	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>11</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>11</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>11</sub> CF <sub>3</sub>
273	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>11</sub> CF <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>11</sub> CF <sub>3</sub>	R5
274	-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>11</sub> CF <sub>3</sub>	R5	R5
275	-CF <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>	-CF <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>	-CF <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>
276	-CF <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>	-CF <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>	R5
277	-CF <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>	R5	R5
278	-(CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CHF <sub>2</sub>	-(CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CHF <sub>2</sub>	-(CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CHF <sub>2</sub>
279	-(CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CHF <sub>2</sub>	-(CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CHF <sub>2</sub>	R5
280	-(CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CHF <sub>2</sub>	R5	R5
14	페닐	페닐	페닐
281	페닐	페닐	p-톨릴
282	페닐	페닐	m-톨릴
283	페닐	페닐	o-톨릴
284	페닐	페닐	2-크실릴
285	페닐	페닐	5-크실릴
286	페닐	페닐	메시틸
287	페닐	페닐	9-플루오레닐
18	페닐	페닐	R5
288	페닐	페닐	-O-tBu (tert-부톡시 )
289	페닐	p-톨릴	p-톨릴
290	페닐	m-톨릴	m-톨릴
291	페닐	o-톨릴	o-톨릴
292	페닐	2-크실릴	2-크실릴
293	페닐	5-크실릴	5-크실릴
294	페닐	메시틸	메시틸
295	페닐	R5	R5
296	페닐	에톡시	에톡시
297	p-톨릴	p-톨릴	p-톨릴
298	p-톨릴	p-톨릴	R5
299	p-톨릴	R5	R5
300	m-톨릴	m-톨릴	m-톨릴
301	m-톨릴	m-톨릴	R5
302	o-톨릴	o-톨릴	o-톨릴
303	o-톨릴	o-톨릴	R5
304	2-크실릴	2-크실릴	2-크실릴
305	2-크실릴	2-크실릴	R5
306	5-크실릴	5-크실릴	5-크실릴
307	5-크실릴	5-크실릴	R5

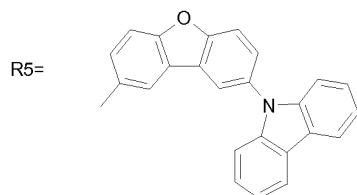
[0148]

308	메시틸	메시틸	메시틸
309	메시틸	메시틸	R5
310	C <sub>6</sub> F <sub>5</sub>	C <sub>6</sub> F <sub>5</sub>	C <sub>6</sub> F <sub>5</sub>
311	C <sub>6</sub> F <sub>5</sub>	C <sub>6</sub> F <sub>5</sub>	R5
312	C <sub>6</sub> F <sub>5</sub>	R5	R5
313	R5	R5	R5
314	R5	메톡시	메톡시
315	R5	n-부톡시	n-부톡시
316	R5	R5	메톡시
317	R5	R5	메톡시
318	R5	R5	OSiMe <sub>3</sub>
319	R5	R5	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>11</sub> O-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> OCH <sub>3</sub>
320	메톡시	메톡시	메톡시
321	메톡시	메톡시	메톡시
322	i-프로폭시	i-프로폭시	i-프로폭시
323	t-부톡시	t-부톡시	t-부톡시
324	OSiMe <sub>3</sub>	OSiMe <sub>3</sub>	OSiMe <sub>3</sub>
325	시클로부틸		메틸
326	시클로부틸		R5
327	시클로부틸		p-메톡시페닐
328	시클로펜틸		메틸
329	시클로펜틸		R5
330	시클로펜틸		메틸
331	시클로펜틸		R5

[0149]

[0150]

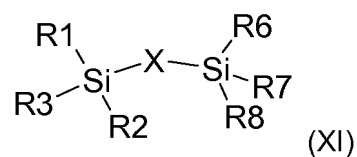
상기 표에서,



[0151]

[0152]

화학식 (I) 및/또는 (I<sup>\*</sup>)의 2개의 단위가, 1 이상의 이종원자가 임의로 개재하는 선형 또는 분지형의 포화 또는 불포화 가교를 통해 또는 O를 통해 서로 가교되어 있고, 상기 화학식 (I) 및/또는 (I<sup>\*</sup>)에서의 가교가 각 경우에 R<sup>2</sup> 대신에 규소 원자에 결합되어 있는, 상기 된 본 발명의 특히 바람직한 화합물은 하기 화학식 (XI)에 해당한다:



[0153]

[0154] 상기 식 (XI)에서,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$  및  $R^8$ 은 각각 하기와 같이 정의된다:

No.	R1	R2	R3	R6	R7	R8	X
332	메틸	R5	R5	메틸	R5	R5	-CH <sub>2</sub> -
333	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5	-CH <sub>2</sub> -
334	R5	R5	R5	R5	R5	R5	-CH <sub>2</sub> -
335	메틸	R5	R5	메틸	R5	R5	-C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> -
336	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5	-C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> -
337	R5	R5	R5	R5	R5	R5	-C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> -
338	메틸	R5	R5	메틸	R5	R5	-C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> -
339	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5	-C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> -
340	R5	R5	R5	R5	R5	R5	-C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> -
341	메틸	R5	R5	메틸	R5	R5	-C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> -
342	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5	-C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> -
343	R5	R5	R5	R5	R5	R5	-C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> -
344	메틸	R5	R5	메틸	R5	R5	-C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> -
345	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5	-C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> -
346	R5	R5	R5	R5	R5	R5	-C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> -
347	메틸	R5	R5	메틸	R5	R5	-C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> -
348	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5	-C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> -
349	R5	R5	R5	R5	R5	R5	-C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> -
350	메틸	R5	R5	메틸	R5	R5	-C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> -
351	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5	-C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> -
352	R5	R5	R5	R5	R5	R5	-C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> -
353	R5	R5	R5	R5	R5	R5	- CH(C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> )CH <sub>2</sub> -
354	메틸	R5	R5	메틸	R5	R5	-C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>8</sub> C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> -
355	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5	-C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>8</sub> C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> -
356	R5	R5	R5	R5	R5	R5	-C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>8</sub> C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> -
357	메틸	R5	R5	메틸	R5	R5	-C≡C-
358	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5	-C≡C-
359	R5	R5	R5	R5	R5	R5	-C≡C-
360	메틸	R5	R5	메틸	R5	R5	-1,4-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> - 페닐 - (CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -
361	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5	-1,4-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -

[0155]

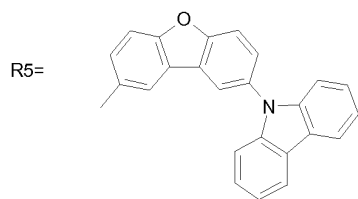
						페닐 - (CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -
362	R5	R5	R5	R5	R5	R5 -1,4-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> - 페닐 - (CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -
363	메틸	R5	R5	메틸	R5	R5 -1,3-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> - 페닐 - (CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -
364	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5 -1,3-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> - 페닐 - (CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -
365	R5	R5	R5	R5	R5	R5 -1,3-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> - 페닐 - (CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -
366	메틸	R5	R5	메틸	R5	R5 -1,4-(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> - 페닐 - (CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> -
367	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5 -1,4-(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> - 페닐 - (CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> -
368	R5	R5	R5	R5	R5	R5 -1,4-(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> - 페닐 - (CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> -
369	메틸	R5	R5	메틸	R5	R5 -1,3-(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> - 페닐 - (CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> -
370	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5 -1,3-(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> - 페닐 - (CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> -
371	R5	R5	R5	R5	R5	R5 -1,3-(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> - 페닐 - (CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> -
372	메틸	R5	R5	메틸	R5	R5 -1,4- 페닐 -
373	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5 -1,4- 페닐 -
374	R5	R5	R5	R5	R5	R5 -1,4- 페닐 -
375	메틸	R5	R5	메틸	R5	R5 -1,3- 페닐 -
376	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5 -1,3- 페닐 -
377	R5	R5	R5	R5	R5	R5 -1,3- 페닐 -
28	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5 -O-
378	메틸	R5	R5	메틸	R5	R5 -O-
379	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5 -O-Si(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -O-

[0156]

380	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5 -O- Si(CH <sub>3</sub> )(Ph)-O-
381	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5 -O-Si(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -O- Si(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> - O-
382	메틸	메틸	R5	메틸	메틸	R5 -O-Si(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -O- Si(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> - O- Si(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -O-
383	메틸	-OSiMe <sub>3</sub>	R5	메틸	-OSiMe <sub>3</sub>	R5 -O-
384	메틸	페닐	R5	메틸	페닐	R5 -O-
385	i-프로필	i-프로필	R5	i-프로필	i-프로필	R5 -O-
386	시클로펜틸	시클로펜틸	R5	시클로펜틸	시클로펜틸	R5 -O-
387	페닐	페닐	R5	페닐	페닐	R5 -O-
388	페닐	R5	R5	페닐	R5	R5 -O-
389	R5	R5	R5	R5	R5	R5 -O-

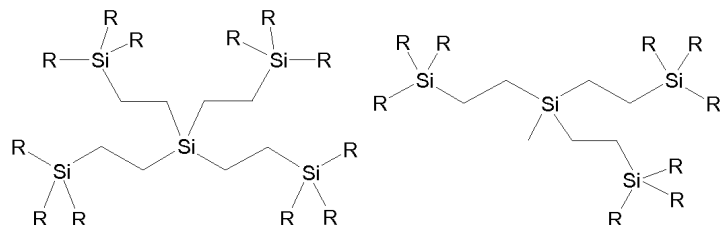
[0157]

[0158] 상기 표에서,

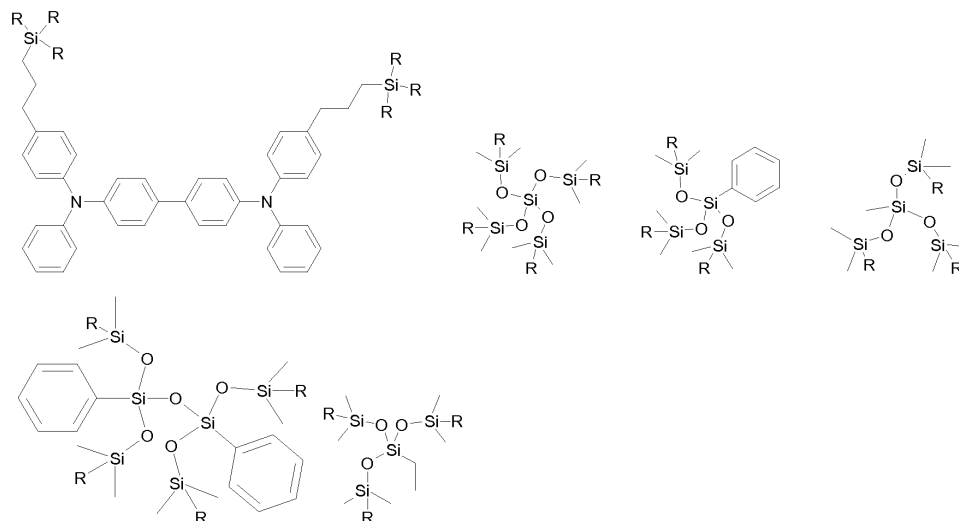


[0159]

[0160] 추가 예: R은 각각 독립적으로 Me, 페닐 또는 R5이고, 여기서 1 이상의 R이 R5이다:



[0161]



[0162]

[0163] 본 발명에 따라, 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물에서,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$ ,  $R^8$ ,  $R^9$ ,  $R^{10}$ ,  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$ ,  $R^{14}$ ,  $R^{15}$ ,  $R^{23}$ ,  $R^{24}$  및  $R^{25}$ 는 각각 독립적으로 스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기이거나, 치환기로 서 이러한 기를 포함한다.

[0164] 본 발명의 바람직한 실시양태에서,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$  및  $R^5$ 는 각각 독립적으로 스페이서를 통해 결합된 중합성 또는 가교성 기이며, 더욱 바람직하게는 중축합 또는 첨가중합에 의해 중합가능하거나 가교가능한 작용기들의 군으로부터 선택된다.

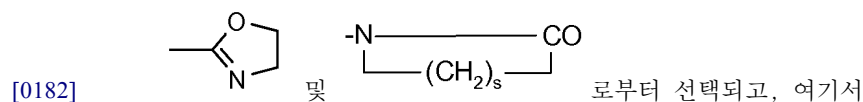
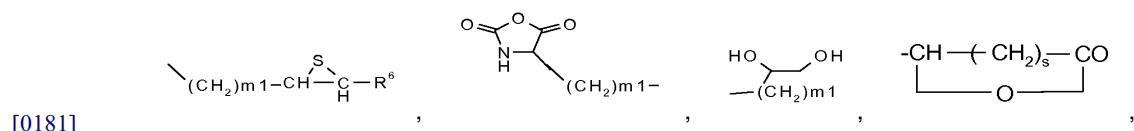
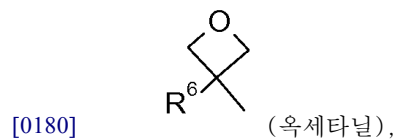
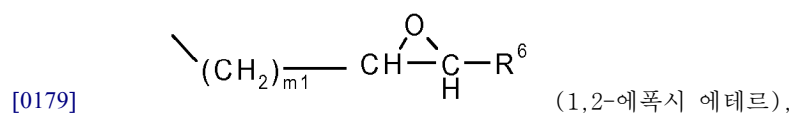
[0165] 더욱 구체적으로, 본 발명은  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^8$ ,  $R^9$ ,  $R^{10}$ ,  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $R^{13}$ ,  $R^{14}$ ,  $R^{15}$ ,  $R^{22}$ ,  $R^{23}$ ,  $R^{24}$  또는  $R^{25}$  또는  $R^{28}$  라디칼 중 1 이상이 독립적으로 스페이서를 통해 결합된 중합성 또는 가교성 기이고, 이는 자유 라디칼, 양 이온 또는 첨가중합 또는 커플링 반응에 의해 중합가능하거나 가교가능한 작용기들의 군으로부터 선택되는 본 발명의 화합물에 관한 것이다.

[0166] 더욱 구체적으로, 본 발명은  $R^1$ ,  $R^2$  및  $R^3$ 의 군으로부터 선택되는 1 이상의 라디칼은 독립적으로 스페이서를 통해 결합된 중합성 또는 가교성 기이다.

[0167] 본 발명에 따라, 스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기는 일반적으로 화학식  $-(Sp)_{x1}-[PG']_x$ 의 기이다.

[0168] 상기 식 중,

- [0169] Sp는 가교 단위이고,
- [0170] PG'는 가교결합성 또는 중합성 기이며,
- [0171] x1은 0 또는 1이고,
- [0172] x는 1~4의 정수이다.
- [0173] Sp는, 예를 들어 -Ar-, -ArY-, -YAr-, -YAr(CR<sup>26</sup>R<sup>27</sup>)<sub>n</sub>-, -(CR<sup>26</sup>R<sup>27</sup>)<sub>n</sub>-, -(YCR<sup>26</sup>R<sup>27</sup>)<sub>n</sub>- 또는 -(CR<sup>26</sup>R<sup>27</sup>Y)<sub>n</sub>-로 구성된 군으로부터 선택되고, 여기서
- [0174] Y는 NR<sup>5</sup>, O, S, C=O, C(=O)O(여기서, R<sup>5</sup>는 H임); 1 이상의 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>-알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>-알콕시에 의해 임의로 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>-아릴, -O-가 임의로 개재한 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>-알킬이며;
- [0175] R<sup>26</sup> 및 R<sup>27</sup>은 각각 독립적으로 수소, 불소 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>-알킬이고,
- [0176] n은 1~20의 정수이며,
- [0177] Ar은 알킬, 시클로알킬, 아릴 또는 헤테로아릴이고, 이는 임의로 치환될 수 있다.
- [0178] 가교성 또는 중합성 PG'은 바람직하게는 -C(R<sup>44</sup>)=CH<sub>2</sub>, -NHC(O)-C(R<sup>45</sup>)=CH<sub>2</sub>, -OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>OC(O)-C(R<sup>45</sup>)=CH<sub>2</sub>, -OC(O)-C(R<sup>45</sup>)=CH<sub>2</sub>, -C(O)-C(R<sup>46</sup>)=CH<sub>2</sub>, -C≡C-, -N≡C-, -O-CH(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH=CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>; C<sub>5</sub>-C<sub>8</sub>-시클로알케닐, 비시클로알케닐(이는 임의로 치환되거나 비치환되고 5~30개의 탄소 원자를 가짐),

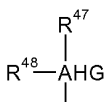


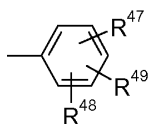
- [0183] s는 1~6의 정수이며, m1은 1~6의 정수이고, R<sup>6</sup>는 수소 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>-알킬이다.

- [0184] R<sup>44</sup>는 수소, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬 또는 할로젠이고,

- [0185] R<sup>45</sup>는 수소, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬 또는 할로젠이며,

- [0186] R<sup>46</sup>는 수소, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬 또는 C<sub>6</sub>-C<sub>12</sub>-아릴이고, 또는

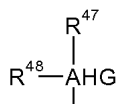
- [0187] 추가 실시양태에서의 PG'은 중합성 , AHG가 임의로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족인 기,



예를 들어 로부터 얻을 수 있는 기며,

[0188]  $R^{47}$  및  $R^{48}$  은 각각 독립적으로 할로젠,  $-C\equiv CH$ , 붕산, 붕산 에스테르,  $-Mg-Hal$ ,  $-Zn-Hal$ ,  $-Sn(R^{52})_3$ 이고, 여기서  $Hal$ 은 할로젠이며,  $R^{52}$ 는  $C_1-C_{18}$ -알킬이다.

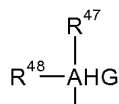
[0189]  $R^{49}$ 는 독립적으로 수소,  $-O-$ 가 임의로 개재한  $C_1-C_{18}$ -알킬,  $C_1-C_{18}$ -퍼플루오로알킬,  $-O-$ 가 임의로 개재한  $C_1-C_{18}$ -알콕시 또는  $C_7-C_{25}$ -아랄킬이다.



[0190]  $PG'$ 가 상기 중합성 기 와 다른 경우, 상기 중합체는 상기 언급된 단위 이외에 1 이상의 반복 단위  $RG^I$  및/또는  $RG^{II}$ 를 포함한다:

[0191]  $RG^I$ : 상기 중합체의 정공 주입 또는 정공 이송 특성을 향상시키는 단위;

[0192]  $RG^{II}$ : 상기 중합체의 전자 주입 또는 전자 이송 특성을 향상시키는 단위.



[0193]  $PG'$ 이 에 따른 중합체 기인 경우, 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물은 하기와 같이 중합될 수 있다.

[0194] 디할로젠 작용기화된 기재를 사용하는 중합 방법이, 예를 들어 문헌[J. Pol. Sci., Part A, Polymer Chemistry Edition 28 (1990) 367] 및 문헌[Colon et al. in J. Org. Chem. 51 (1986) 2627]에 따라 니켈 매개된 커플링 조건 하에 실시될 수 있다. 상기 반응은 일반적으로 극성 비양성자성 용매, 예를 들어 디메틸아세트아미드에서, 촉매량의 니켈 염, 트리페닐포스핀 및 과량의 아연 분말(zinc dust)에 의해 실시된다. 상기 방법의 한 변형예가 문헌[loyda et al. in Bull. Chem. Soc. Jpn, 63 (1990) 80]에 기술되어 있으며, 여기서 유기 가용성 요오드화물이 촉진제로서 사용된다. 추가의 니켈 커플링 반응이 문헌[Yamamoto, Progress in Polymer Science 17 (1992) 1153]에 기술되어 있으며, 여기서 디할로방향족 화합물의 혼합물이 비활성 용매 중 과량의 니켈-(1,5-시클로옥타디엔) 착물에 의해 처리된다. 모든 니켈 커플링 반응에서, 실질적으로 랜덤인 중합체가 2 이상의 방향족 디할라이드의 물질 혼합물이 사용되는 경우에 얻어진다.

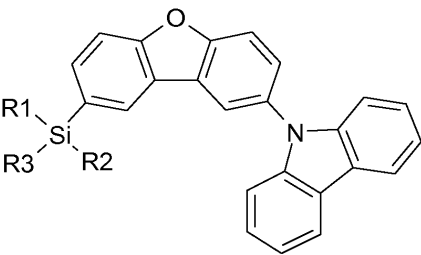
[0195] 이러한 중합 반응은 소량의 물을 첨가하여 종결시킬 수 있다. 대안적으로, 사슬 종결 시약으로서 1작용성 아릴 할라이드를 사용하는 것이 또한 가능하다.

[0196] 니켈 커플링 중합은 화학식 (I) 및/또는 (I\*)의 단위로 구성된 실질적으로 랜덤인 중합체를 제공한다.

[0197] 또한, 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물은 또한 당업자에게 공지된 스즈키(Suzuki) 커플링에 의해 중합될 수 있다. 이러한 중합 반응은 예를 들어, 문헌[N. Miyaura and A. Suzuki in Chemical Reviews, Vol. 95, pp. 457-2483 (1995)]에 기술되어 있다. 이러한 목적으로, 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물의 디요오다이드 또는 디브로마이드는 바람직하게는 적절한 이불산 또는 이불산 에스테르와 반응한다. 상기 반응은 바람직하게는 방향족 탄화수소 용매, 예컨대 톨루엔 중에서 Pd 촉매 및 트리페닐포스핀의 존재 하에  $70\sim 180^\circ C$ 에서 실시된다. 디메틸포름아미드 또는 테트라히드로푸란이 또한 적합하다. 수성 염기, 예컨대 탄산나트륨 또는 중탄산나트륨이 HBr 스캐빈저로서 사용된다. 상응하는 방법이, 예를 들어 문헌[Leadbeater & Marco; Angew. Chem. Int. Ed. Eng. 42 (2003) 1407, T. I. Wallow und B. M. Novak in J. Org. Chem. 59 (1994) 5034-5037]; 및 문헌[M. Remmers, M. Schulze, and G. Wegner in Macromol. Rapid Commun. 17 (1996) 239-252]에 기술되어 있다.

[0198] 특히 바람직한 실시양태에서,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$  및  $R^5$ , 특히  $R^1$ ,  $R^2$  및  $R^3$ 는 각각 독립적으로 자유 라디칼 가교성 또는 중합성인 작용기, 특히 C-C 이중 결합을 포함하는 기이다. 특히 바람직한 실시양태에서, 해당 가교결합성 또는 중합성 기, 또는 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물은 하기로부터 선택된다:

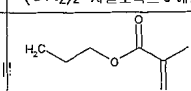
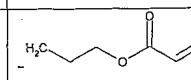
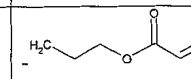
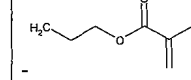
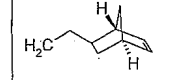
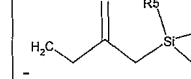




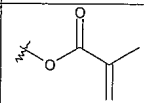
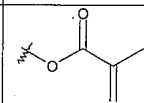
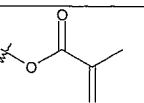
[0199]

No	R1	R2	R3
390	메틸	메틸	-CH=CH <sub>2</sub>
391	메틸	메틸	-CH <sub>2</sub> -CH=CH <sub>2</sub>
392	메틸	메틸	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> -CH=CH <sub>2</sub>
393	메틸	메틸	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> -CH=CH <sub>2</sub>
394	메틸	메틸	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -CH=CH <sub>2</sub>
395	메틸	메틸	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>6</sub> -CH=CH <sub>2</sub>
396	메틸	메틸	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> -CH=CH <sub>2</sub>
397	메틸	메틸	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -시클로헥스-3-에닐
398	메틸	메틸	
399	메틸	메틸	-OSiMe <sub>2</sub> CH=CH <sub>2</sub>
400	메틸	메틸	
401	메틸	페닐	-CH=CH <sub>2</sub>
402	메틸	R5	-CH=CH <sub>2</sub>
403	메틸	R5	-CH <sub>2</sub> -CH=CH <sub>2</sub>

[0200]

404	메틸	R5	-CH=CH-CH <sub>2</sub>
405	메틸	R5	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -CH=CH <sub>2</sub>
406	메틸	R5	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -시클로헥스-3-에닐
407	메틸	R5	
408	메틸	R5	
409	메틸	-CH=CH <sub>2</sub>	-O-SiMe(R5)-CH=CH <sub>2</sub>
410	메틸	R5	-CH=CH <sub>2</sub>
411	n-헥실	R5	-CH <sub>2</sub> -CH=CH <sub>2</sub>
412	n-옥틸	R5	-CH=CH <sub>2</sub>
413	페닐	페닐	-CH=CH <sub>2</sub>
414	페닐	R5	-CH=CH <sub>2</sub>
415	페닐	R5	-CH <sub>2</sub> -CH=CH <sub>2</sub>
416	C <sub>6</sub> F <sub>5</sub>	R5	-CH=CH <sub>2</sub>
417	R5	-CH=CH <sub>2</sub>	-CH=CH <sub>2</sub>
418	R5	-CH <sub>2</sub> -CH=CH <sub>2</sub>	-CH <sub>2</sub> -CH=CH <sub>2</sub>
419	R5	R5	-CH=CH <sub>2</sub>
420	R5	R5	-CH <sub>2</sub> -CH=CH <sub>2</sub>
421	R5	R5	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> -CH=CH <sub>2</sub>
422	R5	R5	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>6</sub> -CH=CH <sub>2</sub>
423	R5	R5	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>8</sub> -CH=CH <sub>2</sub>
424	R5	R5	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -시클로헥스-3-에닐
425	R5	R5	시클로펜트-2-에닐
426	R5	R5	시클로헥스-3-에닐
427	R5	R5	Z-시클로옥트-4-에닐
428	R5	R5	
429	R5	R5	
430	R5	R5	
431	R5	R5	
432	R5	R5	-(CF <sub>2</sub> ) <sub>8</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -CH=CH <sub>2</sub>

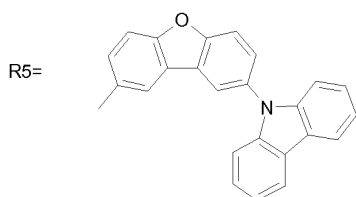
[0201]

433	R5	R5	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>8</sub> -CH=CH <sub>2</sub>
434	-CH=CH <sub>2</sub>	-CH=CH <sub>2</sub>	-CH=CH <sub>2</sub>
435	OMe	R5	-CH=CH <sub>2</sub>
436	OMe	OMe	-CH <sub>2</sub> -CH=CH <sub>2</sub>
437			

[0202]

[0203]

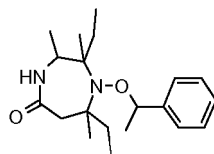
상기 표에서,



[0204]

[0205]

자유 라디칼 가교성 또는 중합 방법이 당업자에게 자체 공지되어 있다. 본 발명에 따라, 당업자에게 공지된 자



유 라디칼 개시제, 예를 들어 AIBN, 또는 을 사용하는 것이 가능하다.

[0206]

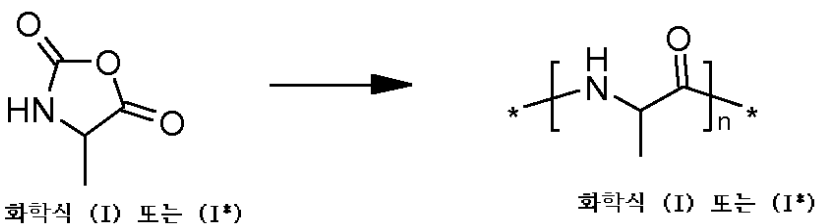
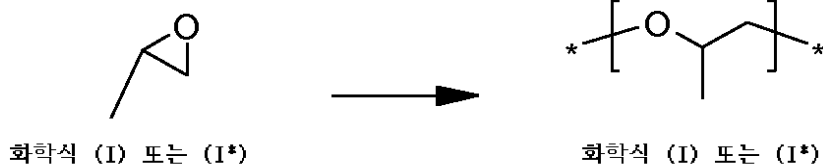
본 발명의 바람직한 실시양태에서, 상기 1 이상의 중합성 또는 가교성 기는 C-C 이중 결합, 아크릴레이트, 메타크릴레이트 또는 1,2-에폭시 에테르로 구성된 군으로부터 선택된다.

[0207]

화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물이 가교결합성 또는 중합성 기로서  $-CH=CH_2-$ , 아크릴레이트 또는 메타크릴레이트를 포함하는 경우, 상기 중합은, 예를 들어 문헌["Chemistry & Technology of UV & EB Formulations for Coatings, Inks and Paints, Vol. 3: Photoinitiators for Free Radical and Cationic Polymerization" 1991, p. 1115-325]에 기술된, 공지된 광개시제를 이용하여 광화학적으로 실시할 수 있다. 공지된 광개시제가, 예를 들어 존재하는 모든 단량체의 총량을 기준으로 0.5~5 중량%의 양으로 상기 반응 혼합물에 첨가된다.

[0208]

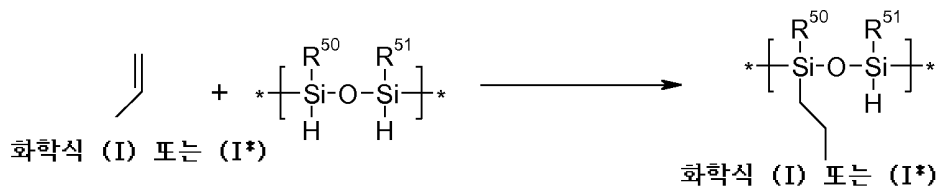
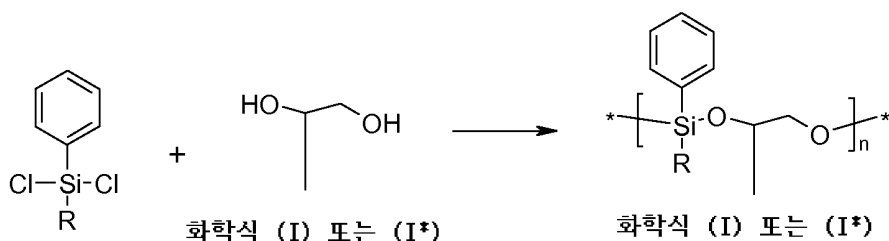
적합한 추가 중합 방법으로는 에폭시 중합, 예를 들어 문헌[Ivin, K. J. and Mol, J. C., Olefin Metathesis and Metathesis Polymerization (Academic Press 1997)]에 기술된 다양한 복분해 반응, 예를 들어 개환 복분해, ADMET(비환형 디엔 올레핀 복분해), 또는 히드로실릴화가 있다.



[0209]

[0210]

히드로실릴화는, 예를 들어 UV 방사선에 의해 개시될 수 있으며, 자유 라디칼 형성제, 전이 금속 착물 또는 루이스 염기, 예를 들어  $H_2PtCl_6$ ,  $RhCl(PPh_3)_3$  또는 트랜스- $IrCl(CO)(PPh_3)_2$ 에 의해 촉매화될 수 있다.



[0211]

[0212]

상기 식 중,  $R^{50}$  및  $R^{51}$ 는 각각 독립적으로  $C_1$ - $C_8$ -알킬,  $C_6$ - $C_{24}$ -아릴 또는  $C_7$ - $C_{12}$ -아랄킬이다.

[0213]

본 발명의 화합물로부터 형성된 화학식 (I) 또는 (I\*)의 중합체는 가교결합되거나 중합된 형태로 화학식 (I) 또

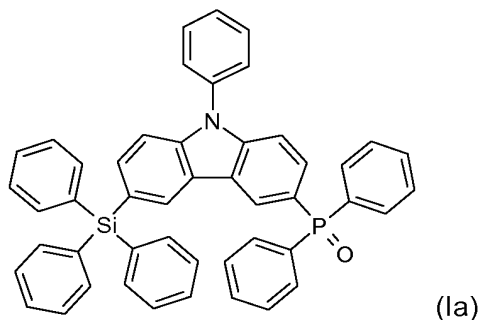
는 ( $I^*$ )의 1 이상의 화합물을 포함한다. 마찬가지로, 화학식 (I) 또는 ( $I^*$ )의 화합물 이외에, 추가 단량체가 또한 중합되어 해당 공중합체가 형성되는 것이 가능하다. 해당 예는 WO 2007/090733에 명시되어 있다.

- [0214] 추가 단량체는 또한 WO 2007/090733에 기술된 바와 같이, 정공 전도성 단위, 예컨대  $RG^I$  및/또는 전자 전도성 단위, 예컨대  $RG^{II}$ 일 수 있다.
- [0215] 본 발명은 또한 가교결합되거나 중합된 형태로 화학식 (I) 및 ( $I^*$ )의 반복 단위를 포함하는 가교 또는 중합 물질, 및 이의 전자 부품에서의 용도에 관한 것이다.
- [0216] 본 발명에 따른 가교 또는 중합 물질은 우수한 유기 용매에서의 용해도, 우수한 필름 형성 특성 및 상대적으로 높은 유리 전이 온도를 보유한다. 또한, 해당 부품의 높은 캐리어 이동도, 높은 색발광 안정성 및 오랜 작동 시간이, 본 발명에 따른 가교 또는 중합 물질이 유기 발광 다이오드(OLED)에 사용되는 경우에 확인될 수 있다.
- [0217] 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질은 코팅으로서 또는 박막 필름에서 특히 적합한데, 이는 그 물질이 열적 및 기계적으로 안정하고, 상대적으로 결함이 없기 때문이다.
- [0218] 이러한 필름의 적합한 제조 방법으로는, 예를 들어 진공 침착, 스핀 코팅, 캐스팅 방법, 랭뮤어-블로젯(LB: Langmuir-Blodgett) 방법, 잉크젯 프린팅 방법, 딥 코팅, 활판 인쇄(letterpress), 스크린 프린팅, 독터-블레이드 프린팅, 롤러 프린팅, 연행 롤러 프린팅, 오프셋 리소그래피 프린팅, 플렉소그래피 프린팅, 웹 프린팅, 스프레이 코팅, 브러쉬에 의한 코팅 또는 패드 프린팅 등이 있다. 상기 언급된 방법 중, 잉크젯 인쇄 방법 및 캐스팅 방법이 선호되며, 이는 그 방법이 특히 단순하고 저렴한 방식으로 실시될 수 있기 때문이다.
- [0219] 개별 성분 층, 특히 발광층은 본 발명의 화합물 및/또는 물질, 및 임의로 추가 화합물의 혼합물로부터 형성될 수 있다. 본 발명의 비컨주게이팅된 중합체는 유기 발광 다이오드(OLED)에서 형광성 화합물에 대한 호스트 물질 (트리플릿 발광체)로서 특히 유용하다.
- [0220] 스핀 코팅 방법, 캐스팅 방법 또는 잉크젯 인쇄 방법에 의해 층을 얻는 경우, 상기 코팅은 적합한 유기 용매, 예컨대 벤젠, 톨루엔, 크실렌, 테트라히드로푸란, 메틸테트라히드로푸란, N,N-디메틸포름아미드, 아세톤, 아세토니트릴, 아니솔, 디클로로메탄, 디메틸 설펝사이드 및 이들의 혼합물에서 0.0001~90 중량%의 농도로 상기 조성물을 용해시켜 제조한 용액을 이용하여 얻을 수 있다.
- [0221] 본 발명은 또한 특히 중합 및/또는 가교결합 반응에서의 단위로서의 화학식 (I) 또는 ( $I^*$ )의 본 발명의 화합물의 용도에 관한 것이다.
- [0222] 본 발명은 또한 화학식 (I) 또는 ( $I^*$ )의 1 이상의 본 발명의 화합물을 포함하는 가교결합되거나 중합된 물질의 제조 방법으로서,
- [0223] (A) 화학식 (I) 또는 ( $I^*$ )의 가교성 또는 중합성 화합물의 제조 단계(여기서,  $R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{22}, R^{23}, R^{24}, R^{25}$  또는  $R^{28}$  중 1 이상이 스페이서를 통해 결합된 가교결합성 또는 중합성 기임), 및
- [0224] (B) 단계 (A)에서 얻어진 화학식 (I) 또는 ( $I^*$ )의 화합물을 가교 또는 중합시키는 단계.
- [0225] 단계 (A)는 상기 가교성 또는 중합성 화합물의 제조를 포함한다. 이는 바람직하게는 본 발명에 다른 방법에 의해 실시된다.
- [0226] 본 발명은 또한 가교결합되거나 중합된 형태로 가교결합성 또는 중합성 기를 포함하는 화학식 (I) 또는 ( $I^*$ )의 단위를 포함하는 가교결합되거나 중합된 물질에 관한 것이다. 이러한 물질은 바람직하게는 상기 언급된 중합 방법에 의해 얻어진다.
- [0227] 본 발명에 따라, 상기 물질은 동족중합체일 수 있으며, 즉, 배타적으로 화학식 (I) 또는 ( $I^*$ )의 단위가 가교되거나 중합된 형태로 존재한다. 또한, 본 발명은 공중합체를 포함하며, 즉, 화학식 (I) 또는 ( $I^*$ )의 단위뿐만 아니라, 추가 단량체, 예를 들어 정공 전도성 및/또는 전자 전도성 특성을 갖는 단량체가 가교결합되거나 중합된 형태로 존재한다.
- [0228] 본 발명에 따라 얻어지며 화학식 (I) 또는 ( $I^*$ )의 단위를 포함하는 가교결합되거나 중합된 물질은 유기 전자 용

도, 특히 OLED에 사용하는 데 특히 적합하다.

[0229] 따라서, 본 발명은 또한 유기 전자 용도, 특히 OLED에서의 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 단위를 포함하는 가교결합되거나 중합된 물질의 용도에 관한 것이다.

[0230] 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 전술한 화합물에서, 부분 구조체, 예를 들어 카르바졸, 트리페닐실릴 및 산화포스핀 구조체는 하나의 분자로 조합될 수 있으며, 그 분자는 발광체 분자와의 상호작용을 향상시킬 수 있으며(상기 화합물이 매트릭스 물질로서 사용됨), 이로써 높은 양자 및 전력 효율을 유도할 수 있다. 이러한 화합물의 비대칭은 또한 상기 물질이 기상으로부터 비결정질 형태로 침착되도록 할 수 있다. 비결정질 유기 물질은 일반적으로 결정질 유기 물질보다 우수한 장기 안정성을 보유한다. 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물은, 예를 들어 하기 화합물 (Ia)일 수 있다:



[0231]

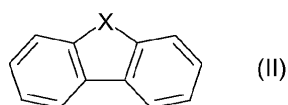
[0232] 참조 화합물을, 예를 들어 1개의 카르바졸 부분 구조체 및 2개의 트리페닐실릴 부분 구조체와 비교하며, 상기 전하 캐리어 이동도, 특히 전자 이동도는 하나의 카르바졸 단위, 하나의 트리페닐실릴 단위 및 하나의 산화포스핀 단위를 갖는 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물, 예를 들어 화합물 (Ia)에서 증가된다. 이로써, 예를 들어 OLED의 작동 전압을 휘도를 동일하게 하여 낮출 수 있다.

[0233] 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 상응하는 가교결합되거나 중합된 물질의 화합물을 백색 발광 OLED의 매트릭스 물질 및/또는 차단층 물질 및/또는 전자 및/또는 정공 전도체로서 사용될 수 있다.

[0234] 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명에 따라 사용되는 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물의 제조

[0235] 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물은 원칙적으로 당업자에게 공지된 방법에 의해 제조할 수 있으며; 예를 들어 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 카르바졸(X = NR<sup>1</sup>)은 디페닐아민(또는 이의 적합하게 치환된 유도체)으로부터의 산화성 고리 닫힘 및 적절한 경우 예를 들어 질소 상의 후속 치환에 의해 열적으로 또는 광화학적으로 제조할 수 있다. 또한, 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 카르바졸은 산화에 의해 적합하게 치환된 테트라히드로카르바졸로부터 진행시켜 얻을 수 있다. 전형적인 카르바졸 합성은 보르체-드레크셀 고리화(Borsche-Drechsel cyclization)이다 (Borsche, Ann., 359, 49 (1908); Drechsel, J. prakt. Chem., [2], 38, 69, 1888). 언급된 테트라히드로카르보졸은 당업자에게 공지된 방법, 예를 들어 임의로 적합하게 치환된 페닐히드라진을 임의로 적합하게 치환된 시클로헥사논에 의해 축합시켜 상응하는 이민을 얻는 것에 의해 제조할 수 있다. 이후 단계에서, 산 촉매화 재배열 및 고리 닫힘 반응을 실시하여 상응하는 테트라히드로카르보졸을 얻는다. 마찬가지로, 하나의 단계에서 상기 이민의 제조 및 재배열 및 고리 닫힘 반응을 실시하는 것이 가능하다. 상기 이민은 상기 언급한 바와 같이 소정의 카르바졸로 산화된다.

[0236] 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물은 바람직하게는 하기 화학식 (II)의 해당 기본 골격로부터 진행하여 제조한다:



[0237]

[0238] 상기 식 중, X는 NR, S, O 또는 PR 또는 NH 또는 PH 또는 PPh이다. 화학식 (II)의 적합한 기본 골격은 시판되고 있거나(특히 이러한 경우 X는 S, O, NH 또는 PPh임) 당업자에게 공지된 방법에 의해 제조할 수 있다(X= PH).

[0239] X가 NH 또는 PH인 경우에, 상기 R 라디칼은 R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup>, SiR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>R<sup>3</sup> 및 A 라디칼의 도입 전 또는 후에 도입할 수 있으

며, 여기서 상기  $R^4$  및  $R^5$  라디칼은 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물, 또는  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼을 도입하는 데 적합한 전구체 화합물에 존재해야 한다. 따라서, X = NR 및 PR의 경우에 3개의 변형 공정이 가능하다:

[0240] 변형 공정 (a)

[0241] (ia)  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼을 도입하는 데 적합한 전구체 화합물의 제조 단계,

[0242] (iia) R 라디칼의 도입 단계,

[0243] (iia) 존재하는 경우  $R^4$ ,  $R^5$  라디칼, 및  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼의 도입 단계.

[0244] 변형 공정 (b)

[0245] 변형 공정 (b)는 R이 알킬 또는 아릴 또는 알킬 치환된 아릴인 경우에 특히 바람직하다.

[0246] (ib) R 라디칼의 도입 단계,

[0247] (iib)  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼 도입에 적합한 전구체 화합물의 제조 단계,

[0248] (iib) 존재하는 경우  $R^4$ ,  $R^5$  라디칼, 및  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼의 도입 단계.

[0249] 변형 공정 (c)

[0250] (ic)  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼 도입에 적합한 전구체 화합물의 제조 단계,

[0251] (iic) 존재하는 경우  $R^4$ ,  $R^5$  라디칼, 및  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼의 도입 단계,

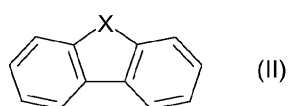
[0252] (iic) R 라디칼의 도입 단계.

[0253] 화학식 (II)의 X가 NR, S, O 또는 PR인 경우, 'R 라디칼 도입'의 단계가 생략되어, 상기 방법은 하기 단계(변형 공정 (d))를 포함한다:

[0254] (id)  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼 도입에 적합한 전구체 화합물의 제조 단계,

[0255] (iid) 존재하는 경우  $R^4$ ,  $R^5$  라디칼, 및  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼의 도입 단계.

[0256] 추가 실시양태에서, 본 발명은 따라서 화학식 (I) 또는 (I\*)의 본 발명의 화합물, 및 본 발명에 따라 사용되는 화합물을, 하기 화학식 (II)의 기본 골격으로부터 진행시켜 제조하는 방법에 관한 것이다:



[0257]

[0258] 상기 식 중, X는 NR, S, O 또는 PR 또는 NH 또는 PH 또는 PPh이고, 상기 R,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼(여기서, 상기  $R^4$  및  $R^5$  라디칼은 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물에 존재함)은 하기 변형 공정들 (a), (b), (c) 또는 (d) 중 하나에 의해 도입된다.

[0259] 변형 공정 (a)

[0260] (ia)  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼을 도입하는 데 적합한 전구체 화합물의 제조 단계,

[0261] (iia) R 라디칼의 도입 단계,

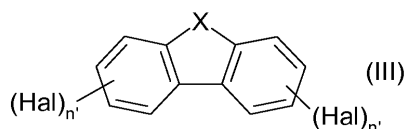
[0262] (iia) 존재하는 경우  $R^4$ ,  $R^5$  라디칼, 및  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼의 도입 단계.

[0263] 또는, 변형 공정 (b)

[0264] (ib) R 라디칼의 도입 단계,

[0265] (iib)  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼 도입에 적합한 전구체 화합물의 제조 단계,

- [0266] (iiib) 존재하는 경우  $R^4$ ,  $R^5$  라디칼, 및  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼의 도입 단계.
- [0267] 또는, 변형 공정 (c)
- [0268] (ic)  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼 도입에 적합한 전구체 화합물의 제조 단계,
- [0269] (iic) 존재하는 경우  $R^4$ ,  $R^5$  라디칼, 및  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼의 도입 단계,
- [0270] (iiic) R 라디칼의 도입 단계.
- [0271] 또는, 변형 공정 (d)
- [0272] (id)  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼 도입에 적합한 전구체 화합물의 제조 단계,
- [0273] (iid) 존재하는 경우  $R^4$ ,  $R^5$  라디칼, 및  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼의 도입 단계.
- [0274] 상기 m, n, R,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $SiR^1R^2R^3$  및 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물에서 명시된 기는 상기 정의되어 있다.
- [0275] 단계 (ia), (iib), (ic) 및 (id)
- [0276] 상기  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $SiR^1R^2R^3$  및 A 라디칼의 도입을 위한 적합한 전구체 화합물로는 특히 하기 할로겐화된, 바람직하게는 브롬화된 하기 화학식 (III)의 화합물이다:

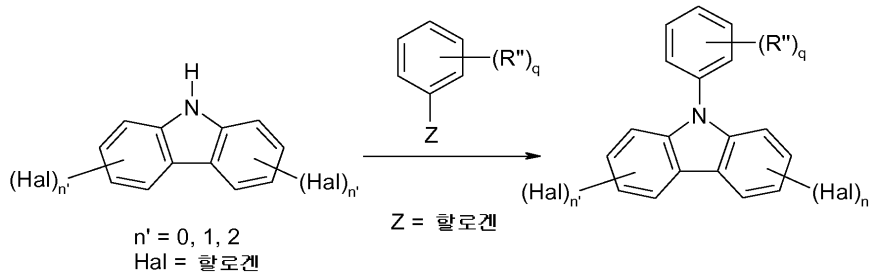
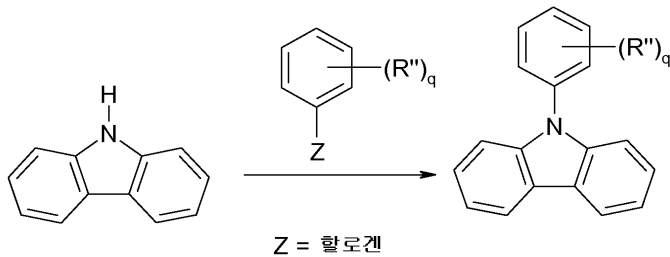


- [0277]
- [0278] 상기 식 중, Hal은 할로젠, 바람직하게는 브롬 또는 요오드, 더욱 바람직하게는 브롬이며, n'은 각 경우에 0 또는 1이고(여기서, 1 이상의 n'이 1임), 단계 (ia) 및 (ic)에서의 X는 NH 또는 PH이며, 단계 (id)에서의 X는 NR 또는 PR이고, 단계 (id)에서의 X는 NR, S, O 또는 PR이다.
- [0279] 할로겐화는 당업자에게 공지된 방법에 의해 실시할 수 있다. 화학식 (II)의 기본 골격의 3번 또는 6번 위치(일 브롬화), 2번, 8번 위치(디벤조푸란 및 디벤조티오펜), 또는 3번, 6번 위치(카르바졸)에서의 브롬화 또는 요오드화가 바람직하다.
- [0280] 임의로 치환된 디벤조푸란, 디벤조티오펜 및 카르바졸은 빙초산 또는 클로로포름 중에서 브롬 또는 NBS에 의해 2번, 8번 위치(디벤조푸란 및 디벤조티오펜) 또는 3번, 6번 위치(카르바졸)에서 이브롬화될 수 있다. 예를 들어, 예를 들어,  $Br_2$ 에 의한 브롬화는 저온, 예를 들어 0°C에서 빙초산 또는 클로로포름에서 실시할 수 있다. 적합한 방법이, 예를 들어  $X=NPh$ 에 대해서 문헌[M. Park, J. R. Buck, C.J. Rizzo, Tetrahedron, 1998, 54, 12707-12714]에, 및  $X=S$ 에 대해서 문헌[W. Yang et al., J. Mater. Chem. 2003, 73, 1351]에 기술되어 있다. 또한, 3,6-디브로모카르바졸, 3,6-디브로모-9-페닐카르바졸, 2,8-디브로모디벤조티오펜, 2,8-디브로모디벤조푸란, 2-브로모카르바졸, 3-브로모디벤조티오펜, 3-브로모디벤조푸란, 3-브로모카르바졸, 2-브로모디벤조티오펜 및 2-브로모디벤조푸란이 시판되고 있다.
- [0281] 디벤조푸란의 4번 위치에서의 (및 디벤조티오펜과 유사한) 일브롬화가, 예를 들어 문헌[J. Am. Chem. Soc. 1984, 106, 7150]에 기술되어 있다. 디벤조푸란(디벤조티오펜)이 질화, 환원 및 이후 샌드마이어 반응(Sandmeyer reaction)을 포함하는 당업자에게 공지된 순서에 의해 3번 위치에서 일브롬화될 수 있다.
- [0282] 디벤조푸란 또는 디벤조티오펜의 2번 위치에서의 일브롬화, 및 카르바졸의 3번 위치에서의 일브롬화는 상기 이브롬화와 유사하게 실시되지만, 단지 1 당량의 브롬 또는 NBS가 첨가된다는 것이 다르다.
- [0283] 요오드화 디벤조푸란, 디벤조티오펜 및 카르바졸을 이용하는 것이 또한 바람직하다. 혼합된(1회 요오드화 + 1회 브롬화) 화합물을 이용하는 것이 또한 가능하다.
- [0284] 제조는, 특히 문헌[Tetrahedron. Lett. 2006, 47, 6957-6960, Eur. J. Inorg. Chem. 2005, 24, 4976-4984, J. Heterocyclic Chem. 2002, 39, 933-941, J. Am. Chem. Soc. 2002, 124, 11900-11907, J. Heterocyclic Chem. 2001, 38, 77-87]에 기술되어 있다.



- [0285] 친핵성 치환을 위해서는, Cl 또는 F 치환된 디벤조푸란, 디벤조티오펜 및 카르바졸이 요구된다. 염소화가, 특히 문헌[J. Heterocyclic Chemistry, 1997, 34, 891-900, Org. Lett, 2004, 6, 3501-3504; J. Chem. Soc. [Section] C: Organic, 1971, 16, 2775-7, Tetrahedron Lett. 1984, 25, 5363-6, J. Org. Chem. 2004, 69, 8177-8182]에 기술되어 있다. 불화가 문헌[J. Org. Chem. 1998, 63, 878-880] 및 문헌[J. Chem. Soc, Perkin 트랜스. 2 2002, 5, 953-957]에 기술되어 있다.
- [0286] 단계 (iia), (ib) 및 (iiic)
- [0287] 상기 R 라디칼은 당업자에게 공지된 방법에 의해 투입한다.
- [0288] 상기 라디칼은 화학식 (III)의 기본 골격 또는 화학식 (III)의 화합물을 화학식 R-Hal의 알킬 할라이드 또는 아릴 할라이드 또는 헤테로아릴 할라이드(여기서, R<sup>1</sup>은 이미 상기 정의되어 있으며, Hal은 F, Cl, Br 또는 I, 바람직하게는 Br, I 또는 F임)와 반응시켜 투입하는 것이 바람직하다.
- [0289] 상기 R 라디칼의 투입은 염기의 존재 하에 실시하는 것이 일반적이다. 적합한 염기는 당업자에게 공지되어 있으며, 바람직하게는 알칼리 금속 및 알칼리 토금속 수소화물, 예컨대 NaOH, KOH, Ca(OH)<sub>2</sub>, 알칼리 금속 수소화물, 예컨대 NaH, KH, 알칼리 금속 아미드, 예컨대 NaNH<sub>2</sub>, 알칼리 금속 또는 알칼리 토금속 탄산염, 예컨대 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 또는 Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, 및 알칼리 금속 알콕사이드, 예컨대 NaOMe, NaOEt로 구성된 군으로부터 선택된다. 또한, 전술한 염기들의 혼합물이 적합하다. NaOH, KOH, NaH 또는 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>가 특히 바람직하다.
- [0290] N-알킬화(예를 들어, 문헌[M. Tosa et al., Heterocycl. Communications, 7권, 3호, 2001, 페이지 277-282]에 개시되어 있음) 또는 N-아릴화 또는 N-헤테로아릴화(예를 들어, (N-아릴화) 문헌[H. Gilman and D. A. Shirley, J. Am. Chem. Soc. 66 (1944) 888; D. Li et al., Dyes and Pigments 49 (2001) 181-186]에 개시되어 있음)는 용매에서 실시하는 것이 바람직하다. 적합한 용매로는, 예를 들어 극성 비양성자성 용매, 예컨대 디메틸 설펝사이드, 디메틸포름아미드 또는 알콜이 있다. 마찬가지로, 용매로서 알킬 할라이드 또는 (헤테로)아릴의 과량을 사용하는 것이 가능하다. 상기 반응은 또한 비극성 비양성자성 용매, 예컨대 톨루엔 중에서 실시할 수 있으며, 이때 상전이 촉매, 예를 들어 테트라-n-부틸암모늄 황산수소가 존재한다(예를 들어, 문헌[I. Gozlan et al., J. Heterocycl. Chem. 21 (1984) 613-614]에 개시되어 있는 바와 같음).
- [0291] N-(헤테로)아릴화는, 예를 들어 화학식 (II) 또는 (III)의 화합물의 (헤테로)아릴 할라이드, 예컨대 요오드화아릴로의 구리 촉매된 커플링[울만 반응(Ullmann reaction)]에 의해 실시할 수 있다.
- [0292] DMF 중 NaH의 존재 하에 불화알킬, 불화아릴 또는 불화헤테로아릴과 화학식 (II) 또는 (III)의 화합물의 반응에 의해, 또는 Cu/염기(울만, 상기 참조) 또는 Pd 촉매 작용 하의 알킬 브롬화물 또는 요오드화물, 아릴 브롬화물 또는 요오드화물, 또는 헤테로아릴 브롬화물 또는 요오드화물과의 반응에 의해 R 라디칼을 투입하는 것이 바람직하다.
- [0293] 화학식 (II) 또는 (III)의 화합물 대 화학식 R<sup>1</sup>-Hal의 알킬 할라이드 또는 (헤테로)아릴 할라이드의 몰비는 일반적으로 1:1~1:15, 바람직하게는 1:1~1:6, 더욱 바람직하게는 1:4이다.
- [0294] N-알킬화 또는 N-(헤테로)아릴화는 일반적으로 0~220℃, 바람직하게는 20~200℃의 온도에서 실시한다. 반응 시간은 일반적으로 0.5~48 시간, 바람직하게는 1~24 시간이다. 일반적으로, N-알킬화 또는 N-아릴화는 표준 압력에서 실시한다.
- [0295] 생성된 미정제 생성물은 당업자에게 공지된 방법에 의해 워크업 처리한다.
- [0296] 단계 (iia), (ib) 및 (iiic)의 바람직한 실시양태는 R = 치환된 페닐(R" = 아릴 라디칼 상의 전술된 치환기; q = 0, 1, 2, 3, 4 또는 5)의 예를 이용하여 이후 일반적으로 상술된다:



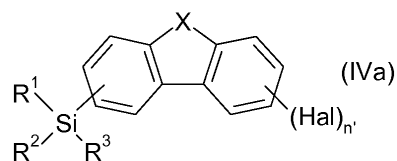


[0297]

[0298] 단계 (iia), (iib), (ic) 및 (id)

[0299] 화학식 (I) 또는 (I\*)의 소정의 화합물은 하기 화학식 (III)의 할로젠화 전구체 화합물로부터 진행시켜 일반적으로 하기 단계에 의해 제조된다:

[0300] (aa) 할로젠/금속 교환 또는 금속화, 바람직하게는 리튬화, 더욱 바람직하게는 오르토리튬화, 및 이후 당업자에게 공지된 실릴화 처리하여 하기 화학식 (IVa)의 화합물을 얻는 단계:

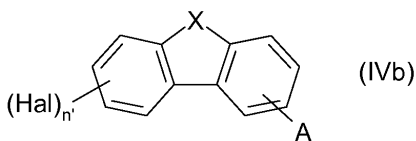


[0301]

[0302] (ab) 상기 A 라디칼을 도입하여 화학식 (I) 또는 (I\*)의 소정의 화합물을 얻는 커플링 단계.

[0303] 대안적으로, 화학식 (I) 또는 (I\*)의 소정의 화합물은 화학식 (III)의 할로젠화된 전구체 화합물로부터 진행시켜 하기 단계에 의해 일반적으로 제조할 수 있다:

[0304] (ba) 상기 A 라디칼을 도입하여 하기 화학식 (IVb)의 소정의 화합물을 얻는 커플링 단계:



[0305]

[0306] (bb) 할로젠/금속 교환 및 이후 당업자에게 공지된 방법에 의한 실릴화 처리하여 화학식 (I) 또는 (I\*)의 소정의 화합물을 얻는 단계.

[0307] 단계 (aa) 또는 (bb): 할로젠/금속 교환 및 이후 실릴화

[0308] 바람직하게는, 단계 (aa) 또는 단계 (bb)는, 제1 단계에서, 일반적으로  $-80 \sim +80^\circ\text{C}$ , 바람직하게는  $-40 \sim 30^\circ\text{C}$  (알킬리튬 화합물의 경우), 또는  $0 \sim 80^\circ\text{C}$  (Mg의 경우), 더욱 바람직하게는  $0 \sim 40^\circ\text{C}$  (Mg의 경우)의 온도에서 화학식 (III)의 할로젠화된 화합물을 알킬리튬 화합물 또는 Mg와 반응시킴으로써 할로젠/금속 교환에 의해 실시한다. 알킬리튬 화합물, 특히 n-BuLi 또는 tert-BuLi을 이용하는 것이 특히 바람직하다. 우선, (클로로)실란 및 아릴 할라이드, 즉, 할로젠화된 기본 골격(II)을 함께 충전시킨 후, n-BuLi 또는 tert-BuLi을 적가하는 것이 특히 바람직하다.

[0309] 따라서, 본 발명은 더욱 구체적으로는, 실란 시약이 초기에 상기 할로젠화된 기본 골격(II)과 동시에 충전되고,

이어서 상기 금속 시약이 첨가되는 본 발명의 방법에 관한 것이다.

- [0310] 상기 반응은 용매, 바람직하게는 THF 또는 에테르, 바람직하게는 디에틸 에테르에서 실시하는 것이 일반적이다. 본 발명에 따르면, 상기 합성 수율은 디에틸 에테르가 용매로서 사용되는 경우에 특히 우수하다.
- [0311] 따라서, 본 발명은 할로젠-금속 교환이 용매로서의 디에틸 에테르에서 할로젠화 기본 골격(II) 상에서 실시되는 본 발명에 따른 방법에 관한 것이다.
- [0312] 추가 실시양태에서, 단계 (aa)에서, 할로젠/금속 교환 대신에, 금속화, 바람직하게는 리튬화, 더욱 바람직하게는 오르토리튬화가 실시된다. 예를 들어  $-100 \sim 25^{\circ}\text{C}$ , 바람직하게는  $-78^{\circ}\text{C} \sim$  실온, 더욱 바람직하게는  $-40 \sim 0^{\circ}\text{C}$ 의 온도에서의 리튬화, 바람직하게는 오르토리튬화가 당업자에게 자체 공지되어 있다. 본 발명의 금속화는 바람직하게는 비양성자성 용매, 예를 들어 THF에서 실시된다. 금속화 완료 시, 제2 단계에서, 이후 적절한 실란 시약이 용매, 예를 들어 THF에 첨가된다. 이는 이후 상세히 설명된다.
- [0313] 직후의 제2 단계에서, 바람직하게는  $\text{SiR}_m\text{Cl}_{(4-m)}$  또는  $\text{SiR}_m\text{H}_{(4-m-n)}\text{Cl}_n$ (여기서,  $m$ 은 0, 1, 2 또는 3이고,  $n$ 은 0, 1, 2이며,  $n+m \leq 3$ 임)과의 반응에 의한 실릴화를 실시하여 화학식 (IVa)의 화합물을 산출한다. Si-H 화합물의 이용이 문헌[H. Gilman, W. J. Trepka J. Org. Chem. 1962, 27(4), 1418-1422]에 기술되어 있다. Si-H 화합물은 일반적으로 클로로실란보다 안정적이다. 상기 실릴화는 용매 중에서 실시하는 것이 일반적이다. 바람직한 용매로는, THF 또는 에테르, 바람직하게는 에틸 에테르가 있다. 일반적으로, 상기 실릴화는 제1 단계 후에 얻어지는 생성물의 워크업 또는 단리 없이, 제1 단계에서의 반응 직후에 실시된다.
- [0314] 상기 할로젠/금속 교환 및 이후 실릴화가 화학식 (III)의 화합물(여기서,  $X = \text{NH}$  또는  $\text{PH}$  (변형 공정 c)) 상에서 실시되는 경우에, 보호기에 의해 NH 또는 PH 기를 보호하고, 이를 실릴화 후에 재차 탈보호시키는 것이 필요하다.
- [0315] 상기 보호기는 당업자에게 공지된 방법에 의해 도입할 수 있다. 일반적으로, 초기 탈보호 후에, 보호기를 도입한다. 적합한 N-H 및 P-H 보호기가 당업자에게 공지되어 있으며, 이러한 방법에 특히 적합한 보호기로는 실릴 보호기, 특히  $\text{SiR}_3$ (여기서,  $R =$  알킬 또는 아릴, 바람직하게는 메틸, 에틸, 페닐)가 있다. 상기 탈양성자화는 전형적으로 염기, 예를 들어 NaH,  $n\text{BuLi}$  또는  $\text{tert-BuLi}$ 에 의해 실시한다.
- [0316] 상기 탈보호는 마찬가지로 당업자에게 공지된 방법에 의해 실시한다. 탈보호에 적합한 시약은 사용된 보호기에 의해 유도된다. 보호기로서  $\text{SiR}_3$ 를 사용하는 경우에, 상기 보호는 일반적으로 산 또는 TBAF(테트라부틸암모늄 플루오라이드)에 의해 실시된다.
- [0317] 단계 (ab) 또는 (ba): 커플링
- [0318] 상기 A기의 도입은 상기 R 라디칼의 도입에 대해 명시한 방법에 의해 실시할 수 있다. 일반적으로, 상기 A기는 염기의 존재 하에 도입된다. 적합한 염기가 당업자에게 공지되어 있으며, 바람직하게는 알칼리 금속 및 알칼릴 토금속 수산화물, 예컨대 NaOH, KOH,  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ , 알칼리 금속 수소화물, 예컨대 NaH, KH, 알칼리 금속 아미드, 예컨대  $\text{NaNH}_2$ , 알칼리 금속 또는 알칼리 토금속 탄산염, 예컨대  $\text{K}_2\text{CO}_3$  또는  $\text{Cs}_2\text{CO}_3$ , 및 알칼리 금속 알콕사이드, 예컨대 NaOMe, NaOEt로 구성된 군으로부터 선택된다. 또한, 전술한 염기의 혼합물이 적합하다. NaOH, KOH, NaH 또는  $\text{K}_2\text{CO}_3$ 가 특히 바람직하다.
- [0319] 헤테로아릴화는, 예를 들어 상기 A 기를 화학식 (III) 또는 (IVa)의 할로젠화된 화합물에 구리 촉매화 커플링(울만 반응)시켜 실시할 수 있다.
- [0320] 상기 N-아릴화는, 예를 들어 문헌[H. Gilman and D. A. Shirley, J. Am. Chem. Soc. 66 (1944) 888; D. Li et al., Dyes and Pigments 49 (2001) 181~186]에 개시되어 있다. 상기 반응은 용매 또는 용융물 중에서 실시할 수 있다. 적합한 용매로는, 예를 들어 (극성) 비양성자성 용매, 예컨대 디메틸 설폭사이드, 디메틸포름아미드, NMP, 트리데칸 또는 알콜이 있다. 마찬가지로, 상기 용매로서, 사용되는 출발 물질(화학식 (III) 또는 (IVa)의 화합물, 또는 상기 A 기의 전구체 화합물) 중 하나를 과량으로 사용하는 것이 가능하다.
- [0321] DMF 중 NaH의 존재 하에 화학식 (III) 또는 (IVa)의 화합물을 전환시켜(친핵 치환), 또는 Cu/염기(울만, 상기 참조) 또는 Pd 촉매반응 조건 하에 반응시켜, 상기 A 기를 도입하는 것이 바람직하다.
- [0322] 상기 N-알킬화 또는 N-(헤테로)아릴화는 일반적으로  $0 \sim 220^{\circ}\text{C}$ , 바람직하게는  $20 \sim 200^{\circ}\text{C}$ 의 온도에서 실시한다.

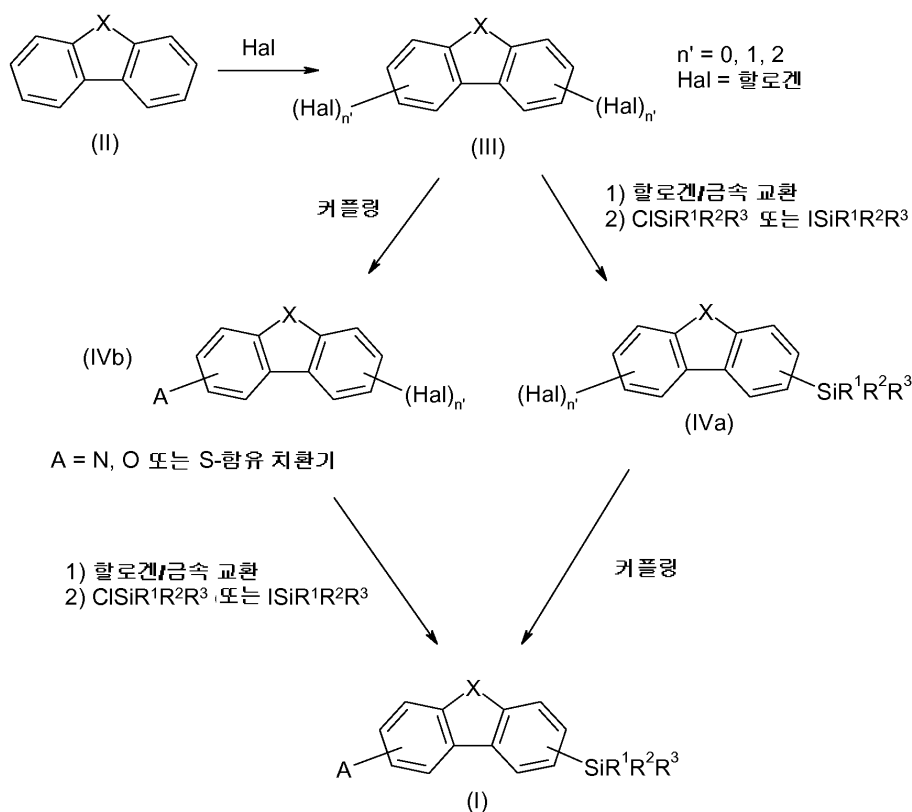
상기 반응 시간은 일반적으로 0.5~76 h, 바람직하게는 1~48 h이다.

[0323] 생성된 미정제 생성물(화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 소정의 화합물)은 당업자에게 공지된 방법에 의해 워크업된다.

[0324] 대안적으로, 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 소정의 화합물 상에서 추가의 할로겐화 단계를 실시한 후, 적절한 경우 R<sup>4</sup> 및 R<sup>5</sup> 라디칼을 도입하기 위해 커플링 및/또는 실릴화를 실시하는 것이 또한 가능하다.

[0325] 인을 통해 결합된 치환기는, 전술한 바와 같이 할로겐/금속 교환, 및 이후 클로로포스핀 화합물과의 반응에 의해 도입된다. 표적 생성물이 산화포스핀인 경우, 이후 산화는, 예를 들어 수중 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 또는 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 중 mCPBA에 의해 실시된다.

[0326] 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 본 발명의 화합물의 제조를 위한 일반적인 공정 반응식이 하기 도시되어 있다:



[0327]

[0328] 화학식 (I<sup>\*</sup>)의 화합물은 전술한 바와 같이, 동일하게 또는 오르토리튬화 및 실릴화에 의해 제조된다.

[0329] 사용되는 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 본 발명의 화합물, 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질은 스위칭 부재, 예컨대 유기 트랜지스터, 예를 들어 유기 FET 및 유기 TFT, 유기 태양 전지 및 유기 발광 다이오드(OLED)로부터 선택된 유기 전자 용도에 사용될 수 있으며, 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물을 OLED에 사용하는 것이 바람직하다.

[0330] 따라서, 본 원은 유기 전자 용도, 바람직하게는 OLED에서의 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질의 용도를 추가로 제공한다.

[0331] 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명의 가교되고 중합된 물질은 이들인 카르바졸, 디벤조푸란, 디벤조티오펜 또는 디벤조포스폴 기본 골격 상에 1 이상의 실릴 및 1 이상의 이종원자를 갖는다는 점에서 주지될 수 있다. 이러한 특성 화합물은 특히 유기 전자 용도, 특히 OLED에서의 우수한 효율, 우수한 작동 수명 및 열응력에 대한 높은 안정성 및 낮은 사용 및 작용 전압을 확보한다는 점에서 주지될 수 있다.

[0332] 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 및 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질은 유기 전자 용도, 특히 OLED에서 매트릭스 물질 및/또는 정공/여기자 차단체 물질 및/또는 전자/여기자 차단체 물질 및/또는 정공 주입 물질

및/또는 전자 주입 물질 및/또는 정공 전도체 물질 및/또는 전자 전도체 물질, 바람직하게는 매트릭스 및/또는 정공/여기자 차단체 물질로서 사용될 수 있다. 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 본 발명의 화합물은 유기 전자 용도, 특히 OLED에서 매트릭스 및/또는 정공/여기자 차단체 물질로서 사용되는 것이 더욱 바람직하다.

[0333] 매트릭스 물질로서 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 및 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질 중 하나를 발광체 물질과 병용함으로써, 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물을 갖는 매트릭스 물질을 포함하지 않는 OLED에 비해 동일한 휘도를 갖는 OLED에서 효율 수치가 향상되고 전압이 낮아진다.

[0334] OLED의 발광층 또는 발광층들 중 하나에서, 발광층 물질을, 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질의 매트릭스 물질, 및 예를 들어 우수한 정공 전도체 특성을 갖는 추가 매트릭스 물질과 조합하는 것이 또한 가능하다. 이로써 상기 발광층의 높은 양자 효율이 달성된다.

[0335] 트리플릿 수준의 이동 특성 및 위치, 따라서 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질의 여기자 차단체 특성으로 인해, 이러한 화합물은 정공/여기자 차단체 물질 및/또는 전자/여기자 차단체 물질로서 사용될 수 있다. 우수한 전자 전도 특성을 보유하는 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질이 특히 OLED의 캐소드 측에 사용될 수 있다.

[0336] 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질이 발광층 중 매트릭스 물질로서, 및 또한 정공/여기자 차단체 물질 및/또는 전자/여기자 차단체 물질로서 사용되는 경우에, 상기 물질의 화학적 동일성 및 유사성으로 인해, 상기 발광층 및 상기 인접하는 정공/여기자 차단체 물질 및/또는 전자/여기자 차단체 물질 사이의 향상된 계면이 얻어지며, 이는 동일한 휘도에서의 전압 감소 및 OLED의 수명 연장을 유도할 수 있다. 더욱이, 정공/여기자 차단체 물질 및/또는 전자/여기자 차단체 물질, 및 발광층의 매트릭스 물질에 동일한 물질을 사용하여 OLED의 제조 공정을 단순화시킬 수 있으며, 이는 동일한 공급원이 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질을 포함하는 물질 적용에 이용될 수 있기 때문이다.

[0337] 유기 전자 용도의 적합한 구조가 당업자에게 공지되어 있으며, 하기 상술된다.

[0338] 유기 트랜지스터는 일반적으로 정공 이송능 및/또는 전자 이송능을 갖는 유기층으로부터 형성된 반전도체 층; 전도성 층으로부터 형성된 게이트 전극; 및 상기 반도체 층 및 전도성 층 사이에 도입된 절연층을 포함한다. 소스 전극 및 드레인 전극이 트랜지스터 부재를 생성하도록 상기 배치로 마운팅된다. 또한, 당업자에게 공지된 추가 층이 상기 유기 트랜지스터에 존재할 수 있다. 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질이 상기 유기 트랜지스터의 임의 소정의 층에 존재할 수 있다.

[0339] 상기 유기 태양 전지(광전기 전환 부품)는 일반적으로 평행하게 배치된 2개의 플레이트형 전극 사이에 존재하는 유기층을 포함한다. 상기 유기층은 벌집형 전극 상에 배치될 수 있다. 상기 유기층 부분에 대한 특정한 제약은 없고, 상기 전극 물질에 대한 특정한 제약은 없다. 그러나, 평행하게 배치된 플레이트형 전극이 사용되는 경우, 1 이상의 전극이 투명한 전극, 예를 들어 ITO 전극 또는 불소 도핑된 주석 산화 전극으로부터 형성되는 것이 바람직하다. 상기 유기층은 2개의 하위층, 즉, p형 반도체 특성 또는 정공 이송능을 갖는 층, 및 n형 반도체 특성 또는 전자 이송능을 보유하도록 형성된 층으로부터 형성된다. 또한, 당업자에게 공지된 추가의 층이 상기 유기 태양 전지에 존재할 수 있다. 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질은 상기 유기 태양 전지의 임의 소정의 층에 존재할 수 있다.

[0340] 추가 실시양태에서, 본 발명은 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 1 이상의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질을 포함하는 유기 발광 다이오드에 관한 것이다. 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질은 상기 유기 발광 다이오드에서 매트릭스 물질 및/또는 정공/여기자 차단체 물질 및/또는 전자/여기자 차단체 물질 및/또는 정공 주입 물질 및/또는 전자 주입 물질 및/또는 정공 전도체 물질 및/또는 전자 전도체 물질, 바람직하게는 유기 전자 용도, 특히 OLED에서의 매트릭스 물질 및/또는 정공/여기자 차단체 물질로서 사용될 수 있다.

[0341] 본 발명의 바람직한 실시양태에서, 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질은 혼합물로, 예를 들어 또다른 정공 전도체 또는 전자 전도체와 함께, 상기 정공 전도성 또는 전자 전도성

층에 사용된다. 사용되는 추가 정공 전도체 또는 전자 전도체, 특히 하기 상술되는 정공 또는 전자 전도체가 일반적으로 당업자에게 공지된 물질일 수 있다.

[0342] 추가 실시양태에서, 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명의 가교되거나 중합되는 물질이 바람직하게는 정공에 대한 차단층 또는 발광층에서의 정공/여기자 차단체로서, 바람직하게는 매트릭스 물질로서 사용된다.

[0343] 마찬가지로, 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질은 상기 발광층 (바람직하게는 매트릭스 물질로서) 및 정공에 대한 차단층(정공/여기자 차단체로서) 둘 모두에 존재할 수 있다.

[0344] 특히 바람직한 실시양태에서, 본 발명은 모든 층, 즉, 정공 전도체, 전자 차단체, 매트릭스, 정공 차단체 및 전자 전도체가 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명에 따라 가교결합되거나 중합된 물질을 포함하고, 더욱 바람직하게는 이로 구성되며, 상기 발광층이 발광체를 추가로 포함하는 OLED에 관한 것이다.

[0345] 본 발명은 애노드 An 및 캐소드 Ka, 및 그 애노드 An와 캐소드 Ka 사이에 배치된 발광층 E, 및 적절한 경우 정공/여기자에 대한 1 이상의 차단층, 전자/여기자에 대한 1 이상의 차단층, 1 이상의 정공 주입층, 1 이상의 정공 전전도체 층, 1 이상의 전자 주입층 및 1 이상의 전자 전전도체 층으로 구성된 군으로부터 선택된 1 이상의 추가 층을 포함하고, 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 1 이상의 화합물 또는 상기 가교결합되거나 중합된 물질은 유기 발광층 E 및/또는 1 이상의 추가 층에 존재하는 유기 발광 다이오드를 추가로 제공한다. 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 1 이상의 화합물은 바람직하게는 상기 발광층 및/또는 상기 정공에 대한 차단층에 존재한다.

[0346] 본 발명은 또한 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 1 이상의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질을 포함하는 발광층에 관한 것이다.

[0347] 본 발명은 본 발명의 발광층을 포함하는 OLED를 추가로 제공한다.

[0348] 본 발명은 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 1 이상의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질을 포함하는 정공/여기자에 대한 차단층에 대한 것이다.

[0349] 본 발명의 OLED의 구조

[0350] 따라서, 본 발명의 유기 발광 다이오드(OLED)는 일반적으로 하기 구조를 갖는다:

[0351] 애노드(An) 및 캐소드(Ka), 및 그 애노드(An) 및 캐소드(Ka) 사이에 배치된 발광층 E

[0352] 본 발명의 OLED는 예를 들어 바람직한 실시양태에서 하기 층으로 구성될 수 있다:

[0353] 1. 애노드

[0354] 2. 정공 전도체 층

[0355] 3. 발광층

[0356] 4. 정공/여기자에 대한 차단층

[0357] 5. 전자 전도체 층

[0358] 6. 캐소드

[0359] 전술한 구조와 상이한 층 순서가 또한 가능하며, 당업자에게 공지되어 있다. 예를 들어, OLED가 언급된 상기 모든 층을 갖지 않을 수 있으며; 예를 들어 (1)(애노드), (3)(발광층) 및 (6)(캐소드)를 포함하는 OLED가 마찬가지로 적합하고, 이러한 경우 (2) (정공 전도체 층) 및 (4) (정공/여기자에 대한 차단층) 및 (5) (전자 전도체 층)의 층들의 기능은 인접 층들에 의해 작용한다. (1), (2), (3) 및 (6)의 층들 또는 (1), (3), (4), (5) 및 (6)의 층들을 갖는 OLED가 마찬가지로 적합하다. 또한, OLED는 애노드 (1)와 정공 전도체 층 (2) 사이에 전자/여기자에 대한 차단층을 가질 수 있다.

[0360] 전술한 복수의 기능(전자/여기자 차단체, 정공/여기자 차단체, 정공 주입, 정공 전도, 전자 주입, 전자 전도)이 하나의 층에서 조합되고, 예를 들어 이러한 층에 존재하는 단일 물질에 의해 작용하는 것이 추가적으로 가능하다. 예를 들어, 정공 전도체 층에서 사용되는 물질은 한 실시양태에서 여기자 및/또는 전자를 동시에 차단할 수



있다.

[0361] 더욱이, OLED의 전술한 개별적인 층들은 결과적으로 2 이상의 층으로부터 형성될 수 있다. 예를 들어, 상기 정공 전도체 층은 전극으로부터 정공이 주입되는 층, 및 정공 주입층으로부터 정공을 발광층으로 이송하는 층으로부터 형성될 수 있다. 마찬가지로, 상기 전자 전도체 층은 복수의 층, 예를 들어 전자가 전극을 통해 주입되는 층, 및 전자 주입층으로부터 전자를 받아 이를 발광층으로 이송하는 층으로 구성될 수 있다. 상기 언급된 층은 각각 에너지 수준, 내열성 및 전하 캐리어 이동성 및 또한 언급된 층들과 유기층 또는 금속 전극과의 에너지 차이와 같은 인자에 따라 선택된다. 당업자는 본 발명에 따라 발광체 물질로서 사용되는 유기 화합물에 최적으로 적용되도록 OLED의 구조를 선택할 수 있다.

[0362] 특히 효율적인 OLED를 얻기 위해서, 예를 들어 상기 정공 전도체 층의 HOMO(최고 점유 분자 궤도)는 애노드의 작동 기능과 매칭해야 하고, 상기 전자 전도체 층의 LUMO(최저 비점유 분자 궤도)는 캐소드의 작동 기능과 매칭해야 하며, 이때 전술한 층들은 본 발명의 OLED에 존재한다.

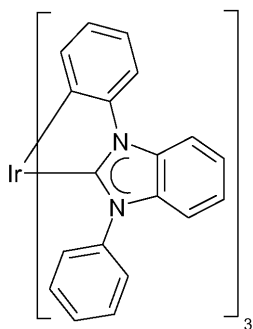
[0363] 애노드(1)은 양전하 캐리어를 제공하는 전극이다. 이는 예를 들어 금속, 상이한 금속들의 혼합물, 금속 합금, 금속 산화물 또는 상이한 금속 산화물들의 혼합물을 포함하는 물질로부터 구성될 수 있다. 대안적으로, 애노드는 전도성 중합체일 수 있다. 적합한 금속은 원소 주기율표의 Ib, IVa, Va 및 IV 족 금속, 및 VIIa족 전이 금속을 포함한다. 애노드가 투명해야 하는 경우, 원소 주기율표(구IUPAC 버전)의 IIb, IIIb 및 IVb 족의 일반적으로 혼합된 금속 산화물, 예를 들어 산화인듐주석(ITO)을 사용한다. 마찬가지로, 상기 애노드(1)은, 예를 들어 문헌[Nature, 357권, 페이지 477~479 (June 11, 1992)]에 기술된 바와 같이 유기 물질, 예를 들어 폴리아닐린을 포함할 수 있다. 적어도 애노드 또는 캐소드가 형성된 광을 발산하기 위해서 적어도 부분적으로 투명해야 한다. 상기 애노드(1)에 사용되는 물질은 ITO인 것이 바람직하다.

[0364] 본 발명의 OLED의 층(2)에 적합한 정공 도체 물질은, 예를 들어 문헌[Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, 4판, 18권, 페이지 837~860, 1996]에 개시되어 있다. 정공 이송 분자 및 중합체 둘 모두는 정공 이송 물질로서 사용될 수 있다. 전형적으로 사용되는 정공 이송 분자는 트리스[N-(1-나프틸)-N-(페닐아미노)]트리페닐아민(1-NaphDATA), 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐( $\alpha$ -NPD), N,N'-디페닐-N,N'-비스(3-메틸페닐)-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), 1,1-비스[(4-톨릴아미노)페닐]-시클로hex산(TAPC), N,N'-비스(4-메틸페닐)-N,N'-비스(4-에틸페닐)-[1,1'-(3,3'-디메틸)비페닐]-4,4'-디아민(ETPD), 테트라키스(3-메틸페닐)-N,N,N',N'-2,5-페닐렌디아민(PDA),  $\alpha$ -페닐-4-N,N-디페닐아미노스티렌(TPS), p-(디에틸아미노)벤즈알데히드디페닐히드라존(DEH), 트리페닐아민(TPA), 비스[4-(N,N-디에틸아미노)-2-메틸페닐](4-메틸페닐)메탄(MPMP), 1-페닐-3-[p-(디에틸아미노)스티릴]-5-[p-(디에틸아미노)페닐]피라졸린(PPR 또는 DEASP), 1,2-트랜스-비스(9H-카르바졸-9-일)시클로부탄(DCZB), N,N,N',N'-테트라키스(4-메틸페닐)-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민(TTB), 4,4',4"-트리스(N,N-디페닐아미노)트리페닐아민(TDTA), 4,4',4"-트리스(N-카르바졸릴)트리페닐아민(TCTA), N,N'-비스(나프탈렌-2-일)-N,N'-비스(페닐)-벤지딘( $\beta$ -NPB), N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)-9,9-스피로비플루오렌(스피로-TPD), N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)-9,9-스피로비플루오렌(스피로-NPB), N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)-9,9-디메틸플루오렌(DMFL-TPD), 디[4-(N,N-디톨릴아미노)페닐]시클로hex산, N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)-9,9-디메틸플루오렌, N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)-2,2-디메틸벤지딘, N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)벤지딘, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)-벤지딘, 2,3,5,6-테트라플루오로-7,7,8,8-테트라시아노퀴노디메탄(F4-TCNQ), 4,4',4"-트리스(N-3-메틸페닐-N-페닐아미노)-트리페닐아민, 4,4',4"-트리스(N-(2-나프틸)-N-페닐아미노)-트리페닐아민, 피라지노[2,3-f][1,10]페난트롤린-2,3-디카르보니트릴(PPDN), N,N',N',N'-테트라키스(4-메톡시페닐)벤지딘(MeO-TPD), 2,7-비스[N,N-비스(4-메톡시페닐)아미노]-9,9-스피로비플루오렌(MeO-스피로-TPD), 2,2-비스[N,N-비스(4-메톡시페닐)아미노]-9,9-스피로비플루오렌(2,2'-MeO-스피로-TPD), N,N'-디-페닐-N,N'-디-[4-(N,N-디-톨릴-아미노)페닐]벤지딘(NTNPB), N,N'-디-페닐-N,N'-디-[4-(N,N-디-페닐-아미노)페닐]벤지딘(NPNPB), N,N'-디(나프탈렌-2-일)-N,N'-디페닐벤젠-1,4-디아민( $\beta$ -NPP), N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)-9,9-디페닐플루오렌(DPFL-TPD), N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)-9,9-디페닐플루오렌(DPFL-NPB), 2,2',7,7'-테트라키스(N,N-디페닐아미노)-9,9-스피로비플루오렌(스피로-TAD), 9,9-비스[4-N,N-비스(비페닐-4-일-아미노)페닐]-9H-플루오렌(BPAPF), 9,9-비스[4-(N,N-비스(나프탈렌-2-일)아미노)페닐]-9H-플루오렌(NPAPF), 9,9-비스[4-(N,N-비스(나프탈렌-2-일)-N,N'-비스(페닐아미노)페닐)-9H-플루오렌(NPBAPF), 2,2',7,7'-테트라키스[N-나프탈렌(페닐)-아미노]-9,9-스피로비플루오렌(스피로-2NPB), N,N'-비스(페난트렌-9-일)-N,N'-비스(페닐)-벤지딘(PAPB), 2,7-비스[N,N-비스(9,9-스피로-비플루오렌-2-일)-아미노]-9,9-스피로비플루오렌(스피로-5), 2,2'-비스[N,N-비스(비페닐-4-일)아미노]-9,9-스피로비플루오렌(2,2'-스피로-DBP), 2,2'-비스(N,N-디-

페닐-아미노)-9,9-스피로비플루오렌(스피로-BPA), 2,2',7,7'-테트라(N,N-디-톨릴)아미노-스피로-비플루오렌(스피로-TTB), N,N,N',N'-테트라-나프탈렌-2-일-벤지딘(TNB), 포르피린화합물 및 프탈로시아닌, 예컨대 구리 프탈로시아닌 및 티탄 옥시드 프탈로시아닌으로 구성된 군으로부터 선택된다. 통상적으로 사용되는 정공 이송 중합체는 폴리비닐카르바졸, (페닐메틸)폴리실란 및 폴리아닐린으로 구성된 군으로부터 선택된다. 마찬가지로, 정공 이송 분자를 중합체, 예컨대 폴리스티렌 및 폴리카르보네이트에 도핑하여 정공 이송 중합체를 얻는 것이 가능하다. 적합한 정공 이송 분자는 이미 상기 언급한 분자이다.

[0365]

또한, 바람직한 실시양태에서, 카르벤 착물이 정공 도체 물질로서 사용될 수 있으며, 이러한 경우 1 이상의 정공 도체 물질의 밴드갭은 발광체 물질의 밴드갭보다 큰 것이 일반적이다. 본 원의 내용에서, 밴드갭은 트리플릿 에너지를 의미하는 것으로 이해된다. 적합한 카르벤 착물은, 예를 들어 WO 2005/019373 A2, WO 2006/056418 A2, WO 2005/113704, WO 2007/115970, WO 2007/115981 및 WO 2008/000727에 기술된 바와 같은 카르벤 착물이다. 적합한 카르벤 착물의 한 예로는 하기 화학식을 갖는 Ir(dpbic)<sub>3</sub>이 있다:



[0366]

[0367]

이는 WO2005/019373에 개시되어 있다. 원칙적으로, 상기 정공 전도체 층이 정공 전도체 물질로서 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 1 이상의 화합물을 포함할 수 있다.

[0368]

상기 발광층(3)은 1 이상의 발광체 물질을 포함한다. 이는 원칙적으로 형광성 또는 인광성 발광체일 수 있으며, 적합한 발광체 물질이 당업자에게 공지되어 있다. 1 이상의 발광체 물질은 인광성 발광체인 것이 바람직하다. 바람직하게 사용되는 인광성 발광체 화합물은 금속 착물을 기반으로 하며, 특히 금속 Ru, Rh, Ir, Pd 및 Pt의 착물, 구체적으로는 Ir의 착물이 유의적이다. 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질이 상기 발광층 중 매트릭스로서 사용될 수 있다.

[0369]

본 발명의 OLED에서 사용하는 데 적합한 금속 착물이, 예를 들어 문헌 WO 02/60910 A1, US 2001/0015432 A1, US 2001/0019782 A1, US 2002/0055014 A1, US 2002/0024293 A1, US 2002/0048689 A1, EP 1 191 612 A2, EP 1 191 613 A2, EP 1 211 257 A2, US 2002/0094453 A1, WO 02/02714 A2, WO 00/70655 A2, WO 01/41512 A1, WO 02/15645 A1, WO 2005/019373 A2, WO 2005/113704 A2, WO 2006/115301 A1, WO 2006/067074 A1, WO 2006/056418, WO 2006121811 A1, WO 2007095118 A2, WO 2007/115970, WO 2007/115981 및 WO 2008/000727에 기술되어 있다.

[0370]

추가적 적합한 금속 착물로는 시판되는 금속 착물 트리스(2-페닐피리딘)이리듐(III), 이리듐(III)트리스(2-(4-톨릴)피리디나토-N,C2'), 비스(2-페닐피리딘)(아세틸아세토네이트)이리듐(III), 이리듐(III)트리스(1-페닐이소키놀린), 이리듐(III)비스(2-2'-벤조티에닐)피리디나토-N,C3')(아세틸아세토네이트), 트리스(2-페닐퀴놀린)이리듐(III), 이리듐(III)비스(2-(4,6-디플루오로페닐)피리디나토-N,C2)피콜리네이트, 이리듐(III)비스(1-페닐이소키놀린)(아세틸아세토네이트), 비스(2-페닐퀴놀린)(아세틸아세토네이트)이리듐(III), 이리듐(III)비스(디-벤조[f,h]키녹살린)(아세틸아세토네이트), 이리듐(III)비스(2-메틸디-벤조[f,h]키녹살린)(아세틸아세토네이트) 및 트리스(3-메틸-1-페닐-4-트리메틸-아세틸-5-피라졸린)테르븀(III), 비스[1-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)-이소퀴놀린](아세틸아세토네이트)이리듐(III), 비스(2-페닐벤조티아졸라토)(아세틸아세토네이트)이리듐(III), 비스(2-(9,9-디헥실플루오레닐)-1-피리딘)(아세틸아세토네이트)이리듐(III), 비스(2-벤조[b]티오펜-2-일-피리딘)(아세틸아세토네이트)이리듐(III)이 있다.

[0371]

또한, 하기 시판되는 물질이 적합하다: 트리스(디벤조일아세토나토)-모노(페난트롤린)유로퓸(III), 트리스(디벤조일메탄)모노(페난트롤린)유로퓸(III), 트리스(디벤조일메탄)-모노(5-아미노페난트롤린)유로퓸(III), 트리스(디-2-나프토일메탄)-모노(페난트롤린)유로퓸(III), 트리스(4-브로모벤조일메탄)-모노(페난트롤린)유로퓸(III), 트리

스(디-비페닐-메탄)-모노(페난트롤린)유로퓸(III),  
 트리스(디벤조일메탄)-모노(4,7-디페닐-페난트롤린)유로퓸(III), 트리스(디벤조일메탄)-모노(4,7-디메틸-페난트롤린-디설포산)유로퓸(III) 이나트륨 염, 트리스[디(4-(2-(2-에톡시-에톡시)에톡시)벤조일메탄)]모노(페난트롤린)유로퓸(III) 및 트리스[디[4-(2-(2-에톡시-에톡시)에톡시)벤조일메탄)]모노(5-아미노페난트롤린)유로퓸(III), 오스뮴(II)비스(3-(트리플루오로메틸)-5-(4-tert-부틸피리디)-1,2,4-트리아졸레이트)디페닐메틸포스핀, 오스뮴(II)비스(3-(트리플루오로메틸)-5-(2-피리디)-1,2,4-트리아졸)디메틸페닐포스핀, 오스뮴(II)비스(3-(트리플루오로메틸)-5-(4-tert-부틸피리디)-1,2,4-트리아졸레이트)디메틸페닐포스핀, 오스뮴(II)-비스(3-(트리플루오로메틸)-5-(2-피리디)-피라졸레이트)디메틸페닐포스핀, 트리스[4,4'-디e-tert-부틸(2,2')-비피리딘]루테튬(III), 오스뮴(II)비스(2-(9,9-디부틸플루오레닐)-1-이소퀴놀린(아세틸아세토네이트)).

[0372] 적합한 트리플렛 발광체는 카르벤 착물이다. 본 발명의 한 실시양태에서, 화학식 (I) 또는 (I\*) 또는 (Ib)의 화합물은 트리플렛 발광체로서의 키르벤 착물과 함께 매트릭스 물질로서의 발광층에 사용된다. 적합한 카르벤 착물이 당업자에게 공지되어 있으며, 예를 들어 WO 2005/019373 A2, WO 2006/056418 A2, WO 2005/113704, WO 2007/115970, WO 2007/115981 및 WO 2008/000727에 기술되어 있다.

[0373] 상기 발광체는 상기 발광체 이외에 추가 성분을 포함할 수 있다. 예를 들어 형광성 염료가 상기 발광층에 존재하여 상기 발광체 물질의 발광색을 변경시킬 수 있다. 또한, 바람직한 실시양태에서, 매트릭스 물질이 사용될 수 있다. 이러한 매트릭스 물질은 중합체, 예를 들어 폴리(N-비닐카르바졸) 또는 폴리실란일 수 있다. 그러나, 상기 매트릭스 물질은 작은 분자, 예를 들어 4,4'-N,N'-디카르바졸비페닐(CDP=CBP) 또는 3차 암모늄 아민, 예를 들어 TCTA일 수 있다. 본 발명의 바람직한 실시양태에서, 화학식 (I) 또는 (I\*)의 1 이상의 화합물은 매트릭스 물질로서 사용된다.

[0374] 바람직한 실시양태에서, 발광층은 전술한 발광체 물질의 1 이상 2~20 중량%, 바람직하게는 5~17 중량%, 및 전술한 매트릭스 물질 중 1 이상, 한 실시양태에서, 상기 화학식 화학식 (I) 또는 (I\*)의 1 이상의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질 80~98 중량%, 바람직하게는 83~95 중량%로부터 형성되며, 상기 발광체 물질 및 매트릭스 물질의 전체 합계는 100 중량%이다.

[0375] 추가 실시양태에서, 상기 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질은 정공/여기자 차단체 물질로서, 바람직하게는 트리플렛 발광체로서 카르벤 착물과 함께 사용된다. 상기 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질은 또한 전술한 바와 같이 매트릭스 물질로서, 또는 매트릭스 물질 및 정공/여기자 차단체 물질 둘 모두로서 트리플렛 발광체로서 카르벤 착물과 함께 사용될 수 있다. 또한, 상기 화학식 (I) 또는 (I\*)의 1 이상의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질이 OLED의 정공/여기자에 대한 차단층, 전자/여기자에 대한 차단층, 정공 주입층, 정공 전도체 층, 전자 주입층 및/또는 전자 전도체 층에, 트리플렛 발광체로서 카르벤 착물과 함께 존재할 수 있다.

[0376] 따라서, OLED에서 매트릭스 물질 및/또는 정공/여기자 차단체 물질 및/또는 전자/여기자 차단체 물질 및/또는 정공 주입 물질 및/또는 전자 주입 물질 및/또는 정공 전도체 물질 및/또는 전자 전도체 물질, 바람직하게는 매트릭스 물질 및/또는 정공/여기자 차단체 물질로서 상기 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질과 함께 사용하는 데 적합한 금속 착물은, 예를 들어 또한 WO 2005/019373 A2, WO 2006/056418 A2, WO 2005/113704, WO 2007/115970, WO 2007/115981 및 WO 2008/000727에 기술된 바와 같은 카르벤 착물이다. 인용된 WO 출원의 개시를 분명히 참조하며, 이의 개시는 본원에서 인용되는 것으로 간주되어야 한다.

[0377] 정공/여기자에 대한 차단층(4)이 상기 화학식 (I) 또는 (I\*)의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질을 포함하지 않는 경우, 상기 OLED는, 정공에 대한 차단층이 존재하는 경우, OLED에 전형적으로 사용되는 정공 차단체 물질, 예컨대 2,6-비스(N-카르바졸릴)피리딘(mCPy), 2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린(바토쿠프로인, (BCP)), 비스(2-메틸-8-키놀리나토)-4-페닐페닐라토알루미늄(III) (BAIq), 페노티아진-S,S-디옥시드 유도체 및 1,3,5-트리스(N-페닐-2-벤질이미디이미다졸)벤젠(TPBI)을 가진며, TPBI가 또한 전자 전도성 물질로서 적합하다. 더욱 적합한 정공 차단체 및/또는 전자 전도체 물질로는 2,2',2''-(1,3,5-벤젠트리일)-트리스(1-페닐-1H-벤즈이미다졸), 2-(4-비페닐릴)-5-(4-tert-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸, 8-히드록시퀴놀리노라토-리튬, 4-(나프탈렌-1-일)-3,5-디페닐-4H-1,2,4-트리아졸, 1,3-비스[2-(2,2'-비피리딘-6-일)-1,3,4-옥사디아조-5-일]벤젠, 4,7-디페닐-1,10-페난트롤린, 3-(4-비페닐릴)-4-페닐-5-tert-부틸페닐-1,2,4-트리아졸, 6,6'-비스[5-(비페닐-4-일)-1,3,4-옥사디아조-2-일]-2,2'-비피리디, 2-페닐-9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센, 2,7-비스[2-



(2,2'-비피리딘-6-일)-1,3,4-옥사디아조-5-일]-9,9-디메틸플루오렌, 1,3-비스[2-(4-tert-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아조-5-일]벤젠, 2-(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린, 트리스(2,4,6-트리메틸-3-(피리딘-3-일)페닐)보란, 2,9-비스(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린, 1-메틸-2-(4-(나프탈렌-2-일)페닐)-1H-이미다조[4,5-f][1,10]페난트롤린이 있다. 추가 실시양태에서, WO2006/100298에 개시된 바와 같이 카르보닐기를 포함하는 기를 통해 결합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리를 포함하는 화합물, 예를 들어 PCT 출원 WO 2009/003919 및 WO 2009/000872에서 명시된 바와 같은 디실릴카르바졸, 디실릴벤조푸란, 디실릴벤조티오펜, 디실릴벤조포스폴, 디실릴벤조티오펜 S-옥시드 및 디실릴벤조티오펜 S,S-디옥시드로 구성된 군으로부터 선택되는 디실릴 화합물, WO2008/034758에 기술된 바와 같은 디실릴 화합물을 정공/여기자에 대한 차단층(4) 또는 발광층(3)에서의 매트릭스 물질로서 사용할 수 있다.

[0378] 바람직한 실시양태에서, 본 발명은 (1) 애노드, (2) 정공 전도체 층, (3) 발광층, (4) 정공/여기자에 대한 차단층, (5) 전자 전도체 층 및 (6) 캐소드의 층들, 및 적절한 경우 추가 층을 포함하고, 상기 정공/여기자에 대한 차단층 또는 상기 발광층은 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>) 또는 (Ib)의 1 이상의 화합물을 포함하는 것인 본 발명의 OLED에 관한 것이다.

[0379] 더 바람직한 실시양태에서, 본 발명은 (1) 애노드, (2) 정공 전도체 층, (3) 발광층, (4) 정공/여기자에 대한 차단층, (5) 전자 전도체 층 및 (6) 캐소드의 층들, 및 적절한 경우 추가 층을 포함하고, 상기 발광층(3)은 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>) 또는 (Ib)의 1 이상의 화합물을 포함하고, 상기 정공/여기자에 대한 차단층은 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>) 또는 (Ib)의 1 이상의 화합물을 포함하는 것인 본 발명의 OLED에 관한 것이다.

[0380] 본 발명의 OLED의 층(5)에 적합한 전도체 물질은 옥시노이드 화합물에 킬레이트된 금소, 예컨대 2,2',2''-(1,3,5-페닐렌)트리스[1-페닐-1H-벤즈이미다졸](TPBI), 트리스(8-퀴놀리놀라토)알루미늄(Alq<sub>3</sub>), 페난트롤린을 기반으로 하는 혼합물, 예컨대 2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린(DDPA = BCP) 또는 4,7-디페닐-1,10-페난트롤린(DPA) 및 아졸 화합물, 예컨대 2-(4-비페닐릴)-5-(4-t-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸(PBD) 및 3-(4-비페닐릴)-4-페닐-5-(4-t-부틸페닐)-1,2,4-트리아졸(TAZ), 8-히드록시퀴놀리놀라토리튬(Liq), 4,7-디페닐-1,10-페난트롤린(BPhen), 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀라토)-4-(페닐페놀라토)알루미늄(BAlq), 1,3-비스[2-(2,2'-비피리딘-6-일)-1,3,4-옥사디아조-5-일]벤젠(Bpy-OXD), 6,6'-비스[5-(비페닐-4-일)-1,3,4-옥사디아조-2-일]-2,2'-비피리딘(BP-OXD-Bpy), 4-(나프탈렌-1-일)-3,5-디페닐-4H-1,2,4-트리아졸(NTAZ), 2,9-비스(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린(NBphen), 2,7-비스[2-(2,2'-비피리딘-6-일)-1,3,4-옥사디아조-5-일]-9,9-디메틸플루오렌(Bby-FOX), 1,3-비스[2-(4-tert-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아조-5-일]벤젠(OXD-7), 트리스(2,4,6-트리메틸-3-(피리딘-3-일)페닐)보란(3TPYMB), 1-메틸-2-(4-(나프탈렌-2-일)페닐)-1H-이미다조[4,5-f][1,10]페난트롤린(2-NPIP), 2-페닐-9,10-디(나프탈렌-2-일)-안트라센(PADN), 2-(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린(HNBphen)을 포함한다. 상기 층(5)는 전도 이송을 촉진시키고, 완충층 또는 배리어층으로서 작용하여 OLED의 층들의 계면에서 여기자가 켄칭하는 것을 방지할 수 있다. 상기 층(5)는 바람직하게는 전자의 이동서를 방향시키고, 여기자의 켄칭을 감소시킨다. 바람직한 실시양태에서, TPBI는 전자 전도체 물질로서 사용된다. 원칙적으로, 상기 전자 전도체 층은 전자 전도체 물질로서 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 1 이상의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질을 포함할 수 있다.

[0381] 정공 도체 물질 및 전자 도체 물질로서 상기 언급된 물질 중에, 일부는 몇몇 작용을 수행할 수 있다. 예를 들어, 일부 전자 전도성 물질은 이들이 HOMO가 낮은 경우 동시에 정공 차단성 물질이다. 이들은, 예를 들어 정공/여기자에 대한 차단층(4)으로서 사용될 수 있다. 그러나, 마찬가지로, 정공/여기자 차단체로서의 기능은 또한 층(4)가 생략될 수 있도록 층(5)에 의해 작용된다는 것이 가능하다.

[0382] 전하 이송층을 전자 도핑하여 사용되는 물질의 이송 특성을 향상시키는데, 우선적으로 층두께를 더욱 넉넉하게 하고(핀홀/합선의 방지), 및 둘째로는 소자의 작동 전압을 최소화시킬 수 있다. p 도핑은 산화 물질을 첨가하여 달성한다. 이러한 혼합물은, 예를 들어 전술한 정공 이송 물질과, MoO<sub>2</sub>, MoO<sub>3</sub>, WO<sub>x</sub>, ReO<sub>3</sub>, V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, 7,7,8,8-테트라시아노퀴노디메탄(TCNQ), 2,3,5,6-테트라플루오로-7,7,8,8-테트라시아노-퀴노디메탄(F4-TCNQ), 2,5-비스(2-히드록시에톡시)-7,7,8,8-테트라시아노퀴노디메탄, 비스(테트라-n-부틸암모늄)테트라시아노디페노퀴노디메탄, 2,5-디메틸-7,7,8,8-테트라시아노퀴노디메탄, 테트라시아노에틸렌, 11,11,12,12-테트라시아노-나프토-2,6-퀴노디메탄, 2-플루오로-7,7,8,8-테트라시아노퀴노디메탄, 2,5-디플루오로-7,7,8,8-테트라시아노퀴노디메탄, 디시아노메틸렌-1,3,4,5,7,8-헥사플루오로-6H-나프탈렌-2-일리덴)말로노니트릴(F6-TNAP), Mo(tfd)<sub>3</sub>(문헌[Kahn et al.,

J. Am. Chem. Soc. 2009, 131 (35), 12530-12531]), 및 EP 09153776.1에 언급된 퀴논 화합물과의 혼합물일 수 있다.

[0383] 상기 전자 전도체 물질은, 예를 들어 알칼리 금속으로 도핑할 수 있으며, 예를 들어 Alq<sub>3</sub>는 리튬으로 도핑할 수 있다. 또한, 전자 전도체는 염, 예컨대 Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>로 도핑할 수 있다. 전자 도핑은 당업자에게 공지되어 있으며, 예를 들어 문헌[W. Gao, A. Kahn, J. Appl. Phys., Vol. 94, No. 1, 1 July 2003 (p-doped organic layers); A. G. Werner, F. Li, K. Harada, M. Pfeiffer, T. Fritz, K. Leo, Appl. Phys. Lett, Vol. 82, No. 25, 23 June 2003 und Pfeiffer et al., Organic Electronics 2003, 4, 89~103]에 개시되어 있다. 예를 들어, 상기 정공 전도체 층은 카르벤 착물, 예를 들어 Ir(dpbic)<sub>3</sub> 이외에 MoO<sub>3</sub> 또는 WO<sub>3</sub>로 도핑될 수 있다.

[0384] 캐소드(6)은 전하 또는 음전하 캐리어를 도입시키는 작용을 하는 전극이다. 캐소드에 적합한 물질은 란타나이드 및 악티나이드, 예를 들어 사마륨을 비롯한 원소 주기율표(구IUPAC 버전)의 1a족의 알칼리 금속, 예를 들어 Li, Cs, 11a족의 알칼리 토금속, 예컨대 칼슘, 바륨 또는 마그네슘, 11b족 금속으로 구성된 군으로부터 선택된다. 또한, 알루미늄 또는 인듐과 같은 금속 및 언급된 모든 금속의 조합을 사용하는 것이 또한 가능하다. 또한, 리튬 포함 유기금속 화합물 또는 LiF는 유기층 및 캐소드 사이에 적용하여 작동 전압을 감소시킬 수 있다.

[0385] 본 발명에 따른 OLED는 추가적으로 당업자에게 공지된 추가 층을 포함할 수 있다. 예를 들어, 층(2)과 발광층(3) 사이에 양전하의 이송을 촉진시키고, 및/또는 층 서로간의 밴드갭을 매칭시키는 층을 적용할 수 있다. 대안적으로, 상기 추가 층은 보호층으로서 작용할 수 있다. 동일한 방식으로, 추가층은 발광층(3)과 층(4) 사이에 존재하여 음전하의 이송을 촉진시키고, 및/또는 층 서로간의 밴드갭을 매칭시킬 수 있다. 대안적으로, 상기 층은 보호층으로서 작용할 수 있다.

[0386] 본 발명의 OLED의 바람직한 실시양태에서, 모든 층, 즉, 정공 전도체, 전자 차단층, 매트릭스, 정공 차단층 및 전자 전도체가 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명에 따라 가교결합되거나 중합된 물질로 구성되며; 단지 발광층이 추가로 1 이상의 발광체를 포함한다.

[0387] 바람직한 실시양태에서, 본 발명의 OLED는 (1)~(6) 이외에 하기 명시되는 추가 층 중 1 이상을 포함한다:

[0388] - 애노드(1)와 정공 이송층(2) 사이의 정공 주입층;

[0389] - 정공 이송층(2)과 발광층(3) 사이의 전자에 대한 차단층;

[0390] - 전자 이송층(5)과 캐소드(6) 사이의 전자 주입층.

[0391] 정공 주입층을 위한 물질은 구리 프탈로시아닌, 4,4',4"-트리스(N-3-메틸페닐-N-페닐-아미노)트리페닐아민(m-MTDATA), 4,4',4"-트리스(N-(2-나프틸)-N-페닐-아미노)트리페닐아민(2T-NATA), 4,4',4"-트리스(N-(1-나프틸)-N-페닐-아미노)트리페닐아민(1T-NATA), 4,4',4"-트리스(N,N-디페닐아미노)트리페닐아민(NATA), 티탄 옥시드 프탈로시아닌, 2,3,5,6-테트라플루오로-7,7,8,8-테트라시아노퀴노디메탄 (F4-TCNQ), 피라지노[2,3-f][1,10]페난트롤린-2,3-디카르보니트릴(PPDN), N,N,N',N'-테트라키스(4-메톡시페닐)벤지딘(MeO-TPD), 2,7-비스[N,N-비스(4-메톡시페닐)아미노]-9,9-스피로비플루오렌(MeO-스피로-TPD), 2,2-비스[N,N-비스(4-메톡시페닐)아미노]-9,9-스피로비플루오렌(2,2'-MeO-스피로-TPD), N,N'-디-페닐-N,N'-디-[4-(N,N-디-톨릴-아미노)페닐]벤지딘(NTNPB), N,N'-디-페닐-N,N'-디-[4-(N,N-디-페닐-아미노)페닐]벤지딘(NPNPB), N,N'-디(나프탈렌-2-일)-N,N'-디페닐벤젠-1,4-디아민(B-NPP)로부터 선택될 수 있다. 원칙적으로, 상기 정공 주입층은 정공 주입 물질로서 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 1 이상의 화합물을 포함할 수 있다.

[0392] 상기 전자 주입층으로서, 예를 들어 LiF, CsF 또는 Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>가 선택될 수 있다. 원칙적으로, 상기 전자 주입층은 전자 주입 물질로서 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 1 이상의 화합물을 포함할 수 있다.

[0393] 당업자는 적합한 물질을 선택하는 방법을 인지한다(예를 들어, 전기화학적 연구를 기반으로 함). 개개의 층들에 대한 적합한 물질은 당업자에게 공지되어 있으며, 예를 들어 WO 00/70655에 개시되어 있다.

[0394] 또한, 본 발명의 OLED에서 사용되는 일부 층들을 표면 처리하여 전하 캐리어 이송의 효율을 증가시킬 수 있다. 언급된 층들 각각에 대한 물질의 선택은 효율 및 수명이 높은 OLED를 얻도록 정해지는 것이 바람직하다.

[0395] 본 발명의 OLED는 당업자에게 공지된 방법에 의해 제조할 수 있다. 일반적으로, 본 발명의 OLED는 개별 층을 적합한 기재 상에 연속 증착시켜 제조한다. 적합한 기재로는, 예를 들어 유리, 무기 반도체 또는 중합체 필름이

있다. 증착에 있어서, 통상의 기법, 예컨대 열증착, 화학적 증착(CVD), 물리적 증착(PVD) 등을 이용하는 것이 가능하다. 대안적인 방법으로, OLED의 유기층을 적합한 용매 중 용액 또는 현탁액으로 코팅할 수 있으며, 이를 위해 당업자에게 공지된 코팅 기법이 이용된다.

[0396] 일반적으로, 상이한 층은 하기 두께를 가진다: 애노드(1) 50~500 nm, 바람직하게는 100~200 nm; 정공 전도층(2) 5~100 nm, 바람직하게는 20~80 nm, 발광층(3) 1~100 nm, 바람직하게는 10~80 nm, 정공/여기자를 위한 차단층(4) 2~100 nm, 바람직하게는 5~50 nm, 전자 전도층(5) 5~100 nm, 바람직하게는 20~80 nm, 캐소드(6) 20~1000 nm, 바람직하게는 30~500 nm. 캐소드에 대해서 본 발명의 OLED에서의 정공 및 전자의 재조합 영역의 상대적인 위치, 따라서 OLED의 발광 스펙트럼은 특히 각 층의 상대적인 두께에 의해 영향을 받을 수 있다. 이는 전자 이송층의 두께가 바람직하게는 상기 재조합 영역의 위치가 다이오드의 광학적 공진기 특성 및 따라서 발광체의 발광 파장에 매칭되도록 선택되어야 함을 의미한다. OLED에서의 개개의 층들의 층두께의 비율은 사용되는 물질에 따라 다르다. 사용되는 임의의 추가 층들의 층두께는 당업자에게 공지되어 있다. 전자 전도층 및/또는 정공 전도층은 이들이 전기적으로 도핑되는 경우 명시되는 층두께보다 큰 두께를 보유하는 것이 가능하다.

[0397] OLED의 1 이상의 층, 바람직하게는 발광층(바람직하게는 매트릭스 물질로서) 및/또는 정공/여기자에 대한 차단 층에 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질을 사용하여 효율이 높고 사용 및 작동 전압이 낮은 OLED를 얻을 수 있다. 흔히, 상기 화학식 (I)의 화합물을 사용하여 얻은 OLED는 추가적으로 높은 수명을 보유한다. 상기 OLED의 효율은 상기 OLED의 다른 층을 최적화시켜 추가적으로 향상시킬 수 있다. 예를 들어, 고효율 캐소드, 예컨대 Ca 또는 Ba를 적절한 경우 LiF, CsF 또는 CS<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>의 중간층과 조합하여 사용할 수 있다. 작동 전압을 낮추고 양자 효율을 높이는 성형된 기재 및 신규한 정공 이송 물질을 본 발명의 OLED에 마찬가지로 사용할 수 있다. 더욱이, 추가 층이 상기 OLED에 존재하여 상이한 층들의 에너지 수준을 조절하고 전계발광을 촉진시킬 수 있다.

[0398] 상기 OLED는 1 이상의 제2 발광층을 추가로 포함할 수 있다. 상기 OLED의 전체 발광은 2 이상의 발광층의 발광으로 구성될 수 있으며, 백색광을 또한 포함할 수 있다.

[0399] 상기 OLED는 전계발광이 유용한 모든 장치에서 사용될 수 있다. 적합한 디바이스는 바람직하게는 고정식 및 이동식 영상 디스플레이 장치 및 조명 장치로부터 선택된다. 고정식 영상 디스플레이 장치로는, 예를 들어 컴퓨터의 영상 디스플레이 장치, 텔레비전, 프린터, 주방 가전 및 광고판에서의 영상 디스플레이 장치, 조명 및 정보 표시판이 있다. 이동식 영상 디스플레이 장치로는, 예를 들어 핸드폰, 랩톱, 디지털 카메라, MP3 플레이어, 차량에서의 영상 디스플레이 장치, 및 버스 및 기차의 목적지 디스플레이가 있다. 본 발명의 OLED가 사용될 수 있는 추가 디바이스로는, 예를 들어 키보드; 의류 물품; 가구; 벽지가 있다.

[0400] 또한, 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질을 역전 구조를 갖는 OLED에 사용할 수 있다. 본 발명에 따라 사용되는 상기 화학식 (I) 또는 (I<sup>\*</sup>)의 화합물 또는 본 발명의 가교결합되거나 중합된 물질은 바람직하게는 결과적으로 정공/여기자 차단체 물질로서 상기 역전 OLED에서 사용된다. 역전 OLED의 구조 및 이에 전형적으로 사용되는 물질은 당업자에게 공지되어 있다.

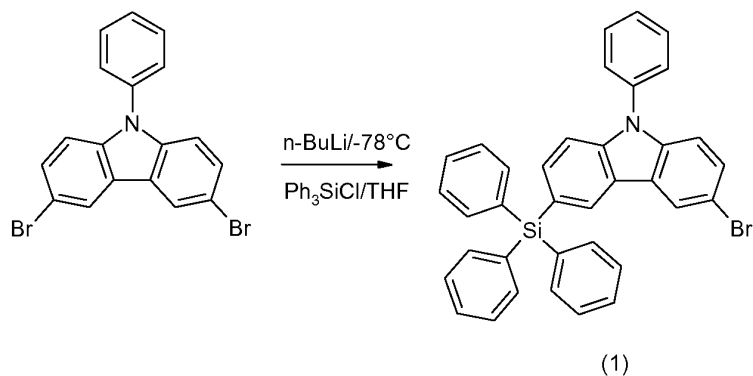
[0401] 또한, 본 발명은 1 이상의 본 발명의 유기 발광 다이오드 또는 1 이상의 본 발명의 발광층을 포함하는, 컴퓨터의 영상 디스플레이 장치, 텔레비전, 프린터, 주방 가전 및 광고판에서의 영상 디스플레이 장치, 조명, 정보 표시판과 같은 고정식 영상 디스플레이 장치, 및 핸드폰, 랩톱, 디지털 카메라, MP3 플레이어, 차량에서의 영상 디스플레이 장치, 및 버스 및 기차의 목적지 디스플레이와 같은 이동식 영상 디스플레이 장치; 조명 장치; 키보드; 의류 물품; 가구; 벽지로 구성된 군으로부터 선택되는 디바이스에 관한 것이다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0402] 하기 실시예는 본 발명의 추가 예시를 제공한다.

[0403] **합성 실시예:**

[0404] **합성 실시예 1:** 3-브로모-9-페닐-6-트리페닐실릴카르바졸(화합물 1)로부터의 합성

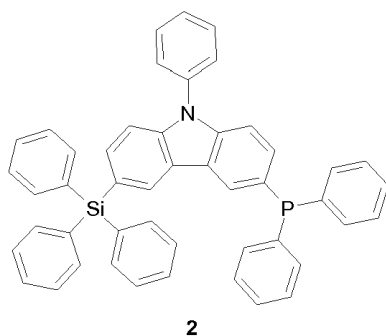


[0405]

[0406] 건조 THF(700 ml) 중 9-(3-메톡시페닐)-3,6-디브로모-9H-카르바졸(26 g, 1 eq)의 용액을 아르곤 하 -78℃에서 n-부틸리튬(헥산 중 1.6 M, 41 ml, 1 eq)과 함께 천천히 혼합하고, -78℃에서 2 시간 동안 교반하였다. 건조 THF(150 ml) 중 시클로트리페닐실란(30 g, 1.5 eq)의 용액을 -78℃에서 첨가한 후, 상기 혼합물을 교반과 함께 밤새 실온으로 가온하였다. 과량의 부틸리튬을 포화 염화암모늄 용액으로 가수분해시켰다. 침전된 생성물을 여과시키고, 염화메틸렌으로 철저히 세척하였다. 배합된 염화메틸렌 여과물을 물로 추출하고, 농축 건조시켰다. 잔류물을 아세톤과 함께 교반시키고, 여과시켰다. 수율 74%.

[0407]  $^1\text{H-NMR}$  (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz):  $\delta$  = 8.15 (s, 1H), 8.28 (s, 1H), 7.3-7.7 (m, 24H).

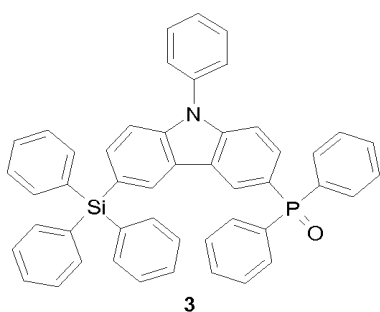
[0408] **합성 실시예 2:** 3-디페닐포스포닐-9-페닐-6-트리페닐실릴-카르바졸(화합물 2)의 합성



[0409]

[0410] 건조 THF(80 ml) 중 3-브로모-9-페닐-6-트리페닐실릴-카르바졸 1(5.0 g, 8.6 mmol)의 용액을 아르곤 하 -78℃에서 n-부틸리튬(헥산 중 1.6 M, 6.7 ml, 11 mmol)과 함께 서서히 혼합하고, -78℃에서 1.5 시간 동안 교반하였다. 건조 THF(25 mL) 중 클로로디페닐포스핀(2.85 g, 12.9 mmol)의 용액을 -78℃에서 첨가한 후, 상기 혼합물을 교반과 함께 밤새 실온으로 가열하였다. EtOH(20 ml)를 상기 현탁액에 첨가하였다. 침전된 생성물을 여과시키고, EtOH로 세척하고, 건조시켰다. 수율 82%, 생성물을 정제 없이 전화시켰다.

[0411] **합성 실시예 3:** 3-디페닐포스포노일-9-페닐-6-트리페닐실릴-카르바졸(화합물 3)의 합성



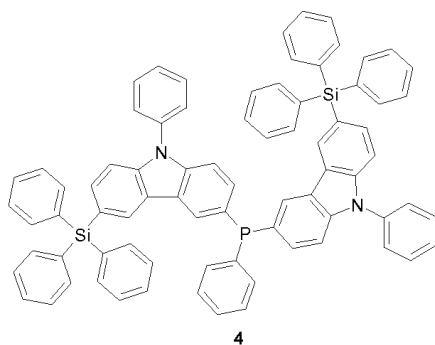
[0412]

[0413] 염화메틸렌(200 ml) 중 화합물 2(3.5 g, 5.1 mmol)의 용액에, 70% m-클로로퍼벤조산(1.8 g, 7.4 mmol)을 분액으로 첨가하였다. 상기 반응 용액을 실온에서 48 시간 동안 교반하였다. 유기상을 10% 수산화나트륨 용액(3 x

50 mL), 5% 염산(2 x 50 mL) 및 포화 탄산수소나트륨 용액(80 mL)로 세척하고, 농축시켰다. 잔류물을 에탄올에 녹이고, 여과시키고, 건조시켰다. FC(SiO<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 내지 97:3 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>/MeOH)는 생성물 3(2.3 g, 64%)를 산출하였다.

[0414] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz): δ = 7.3 -7.7 (m, 34H), 8.30 (s, 1H), 8.52 (d, 1H).

[0415] **합성 실시예 4:** 화합물 4의 합성

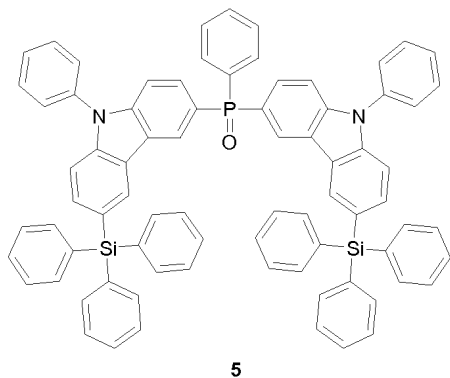


[0416]

[0417] 건조 THF(100 mL) 중 3-브로모-9-페닐-6-트리페닐실릴-카르바졸 1(6.4 g, 11 mmol)을 아르곤 하 -78℃에서 n-부틸리튬(헥산 중 1.6 M, 8.6 mL, 14 mmol)과 함께 서서히 혼합하고, -78℃에서 1 시간 동안 교반하였다. 건조 THF(15 mL) 중 디클로로페닐포스핀(0.92 g, 5.1 mmol)의 용액을 -78℃에서 천천히 첨가한 후, 상기 혼합물을 교반과 함께 실온으로 가온시켰다. 상기 용액을 포화 NH<sub>4</sub>Cl 용액(20 mL)과 혼합시키고, 30 분 동안 교반시켰다. 상기 침전물을 여과시키고, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>로 세척하였다. 유기상을 물(4 x 75 mL)로 세척하고, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 상에서 건조시키며, 농축시켰다. 고체를 EtOH에 현탁시키고, 여과시켰다. 산출량 3.73 g(67%). 상기 생성물을 추가 정제 없이 전환시켰다.

[0418] MAL디-MS: m/z: 1108 (M<sup>+</sup>), 1 165 ([M + K + O]<sup>+</sup>)

[0419] **합성 실시예 5:** 화합물 5의 합성

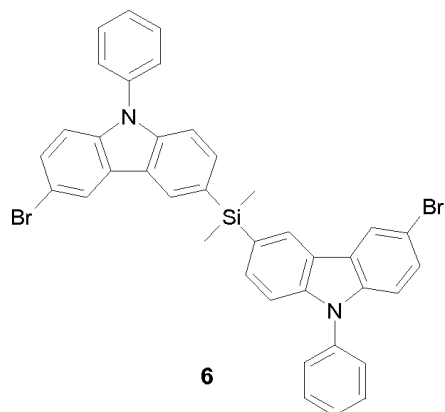


[0420]

[0421] 염화메틸렌(100 mL) 중 생성물 4(3.7 g, 3.4 mmol)에 70% m-클로로퍼벤조산(0.91 g, 3.7 mmol)을 분액으로 첨가하였다. 상기 반응 용액을 실온에서 18 시간 동안 교반하였다. 유기상을 10% 수산화나트륨 용액(4 x 40 mL), 5% 염산(3 x 40 mL) 및 포화 탄산수소나트륨 용액(30 mL)으로 세척하고, 농축시켰다. FC(SiO<sub>2</sub>, 2:1 아세트산에틸/시클로헥산) 및 아세톤 중 용액에 의해 생성물 5(1.5 g, 41%)를 산출하였다.

[0422] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz): δ = 7.45 (m, 24H), 7.6 (m, 27H), 7.68 (dd, 2H), 8.28 (s, 2H), 8.54 (d, 2H).

[0423] **합성 실시예 6:** 화합물 6의 합성

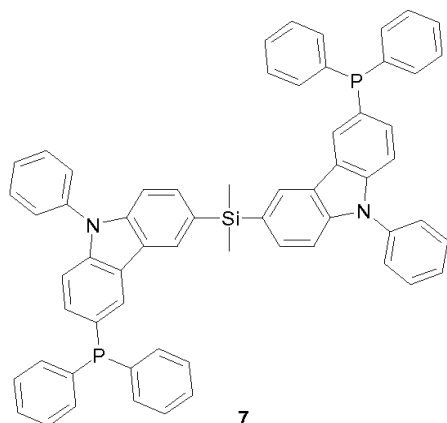


[0424]

[0425] 건조 THF(230 ml) 중 9-페닐-3,6-디브로모-9H-카르바졸(12 g, 1 eq)의 용액을 아르곤 하 -78℃에서 n-부틸리튬(헥산 중 1.6 M, 18.8 ml, 1 eq)과 함께 서서히 혼합시키고, -78℃에서 1.5 시간 동안 교반하였다. 건조 THF(20 mL) 중 디클로로디메틸실란(1.9 g, 0.5 eq)의 용액을 -78℃에서 첨가한 후, 상기 혼합물을 교반과 함께 밤새 실온으로 가온시켰다. 과량의 부틸리튬을 포화 염화암모늄 용액으로 가수분해시켰다. 침전된 생성물을 여과시키고, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>에 의해 철저히 세척하였다. 칼럼 크로마토그래피(SiO<sub>2</sub>, 헥산/EtOAc 10:1)로 생성물 6을 산출하였다. 수율 74%. <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz): δ = 0.7 (s, 6H), 7.25 (dd, 4H), 7.40 (d, 2H), 7.42-7.50 (m, 6H), 7.55-7.65 (m, 6H) 8.22 (s, 2H), 8.30 (s, 2H).

[0426]

**합성 실시예 7:** 화합물 7의 합성

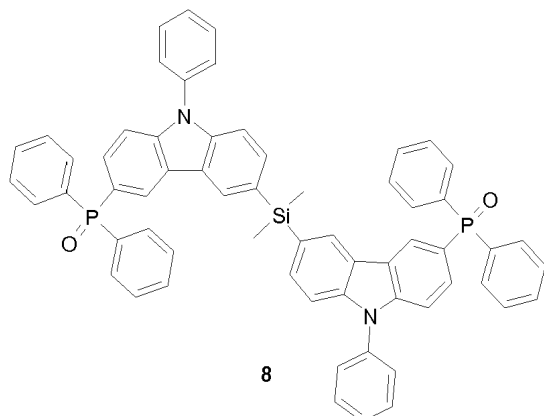


[0427]

[0428] 건조 THF(100 mL) 중 화합물 6(4.2 g, 6.0 mmol)의 용액을 아르곤 하 -78℃에서 n-부틸리튬(헥산 중 1.6 M, 9.4 mL, 15 mmol)과 함께 서서히 혼합시키고, -78℃에서 1.5 시간 동안 교반시켰다. 건조 THF(20 mL) 중 클로로디페닐포스핀(3.4 g, 15 mmol)의 용액을 -78℃에서 첨가한 후, 상기 혼합물을 교반과 함께 밤새 실온으로 가온시켰다. 상기 용액을 포화 NH<sub>4</sub>Cl 용액(25 mL)과 혼합하고, 30 분 동안 교반하였다. 침전물을 여과시키고, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>로 세척하였다. 유기상을 물(4 x 100 mL)로 세척하고, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 상에서 건조시키며, 농축시켰다. 고체를 MeOH에 현탁시키고, 여과시켰다. 산출량: 4.4 g(80%). 상기 생성물 7을 추가 정제 없이 전환시켰다.



[0429] **합성 실시예 8:** 화합물 8의 합성

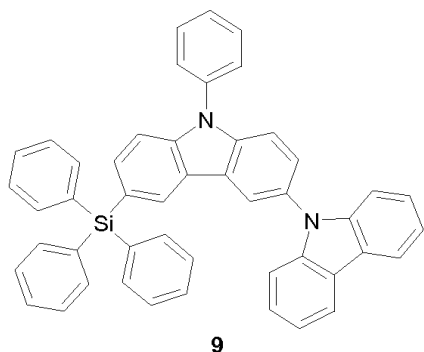


[0430]

[0431] 염화메틸렌 (120 ml) 중 생성물 7(4.5 g, 4.9 mmol)의 용액에 70% m-클로로퍼벤조산(3.1 g, 12 mmol)을 분액으로 첨가하였다. 반응 용액을 실온에서 18 시간 동안 교반하였다. 유기 상을 10% 수산화나트륨 용액(3 x 50 ml), 5% 염산(3 x 50 ml) 및 포화 탄산수소나트륨 용액(30 ml)으로 세척하고, 농축시켰다. FC(SiO<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 내지 99:1 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>/MeOH)은 생성물 8(2.2 g, 48%)을 산출하였다.

[0432] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz): δ = 0.70 (s, 6H), 7.35-7.55 (m, 24H), 7.60 (m, 6H), 7.70 (m, 8H), 8.28 (s, 2H), 8.54 (d, 2H).

[0433] **합성 실시예 9:** 화합물 9의 화합물

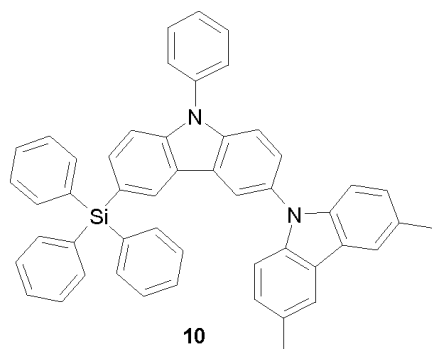


[0434]

[0435] 카르바졸(95%, 1.1 g, 6.0 mmol), 화합물 1(7.0 g, 12 mmol), 탄산칼륨(2.1 g, 15 mmol) 및 구리 분말(80 mg, 1.3 mmol)를 180℃로 가열시키고, 그 온도에서 60 시간 동안 교반시켰다. 실온으로 냉각시킨 후, 상기 혼합물을 염화메틸렌으로 추출하였다. FC(SiO<sub>2</sub>, 8:1~6:1 시클로헥산/CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>)은 생성물 9(2.1 g, 53%)을 산출하였다.

[0436] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz): S = 7.2-7.4 (m, 15H), 7.5 (m, 3H), 7.6-7.7 (m, 12H), 8.15 (m, 3H), 8.30 (s, 1H).

[0437] **합성 실시예 10: 화합물 10의 합성**



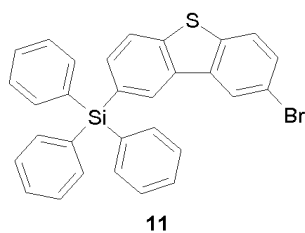
[0438]

[0439] 3,6-디메틸카르바졸의 합성은 문헌[J. Chem. Soc, 1949, 1384-1388, J. Org. Chem., 2003, 68, 2209-2215 und in Dalton 트랜스., 2003, 13, 2718-2727]에 기술되어 있다.

[0440] 3,6-디메틸카르바졸(1.1 g, 5.7 mmol), 화합물 1(6.7 g, 12 mmol), 탄산칼륨(2.0 g, 14 mmol) 및 구리 분말(76 mg, 1.2 mmol)을 180℃로 가열시키고, 그 온도에서 72 시간 동안 교반하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 상기 혼합물을 염화메틸렌으로 추출하였다. FC(SiO<sub>2</sub>, 8:1 시클로헥산/CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>)을 생성물 10(1.2 g, 30%)을 산출하였다.

[0441] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz): δ = 2.5 (s, 6H), 7.2 (m, 4H), 7.35 (m, 9H), 7.48 (m, 3H), 7.55 (d, 1H), 7.62 (m, 1 1 H), 7.9 (s, 2H), 8.1 (s, 1H), 8.3 (s, 1H).

[0442] **합성 실시예 11: 화합물 11의 합성**



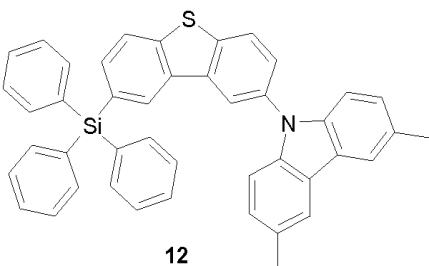
[0443]

[0444] 2,8-디브로모디벤조티오펜의 합성은 문헌[W. Yang et al., J. Mater. Chem. 2003, 13, 1351]에 기술되어 있다.

[0445] 건조 THF(215 mL) 중 2,8-디브로모디벤조티오펜(7.3 g, 21 mmol)의 용액을 아르곤 하 -78℃에서 n-부틸리튬(헥산 중 1.6 M, 16.6 mL, 26.6 mmol)과 함께 서서히 혼합시키고, -78℃에서 1.5 시간 동안 교반하였다. 건조 THF(25 mL) 중 트리페닐클로로실란(9.7 g, 32 mmol)의 용액을 -78℃에서 천천히 첨가한 후, 상기 혼합물을 교반과 함께 밤새 실온으로 가온시켰다. 상기 용액을 포화 NH<sub>4</sub>Cl 용액(20 mL)과 혼합시키고, 30 분 동안 교반시켰다. 침전물을 여과시키고, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>에 의해 세척하였다. 유기상을 물(4 x 100 mL)로 세척하고, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 상에서 건조시키며, 농축시켰다. FC(SiO<sub>2</sub>, 20:1 시클로헥산/CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>)는 생성물 11(3.4 g, 31 %)을 산출하였다.

[0446] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz): δ = 7.40 (dd, 6H), 7.48 (t, 3H), 7.54 (d, 1H), 7.62 (d, 6H), 7.65 (d, 1H), 7.71 (d, 1H), 7.86 (d, 1H), 8.13 (s, 1H), 8.31 (s, 1H).

[0447] **합성 실시예 12: 화합물 12의 합성**



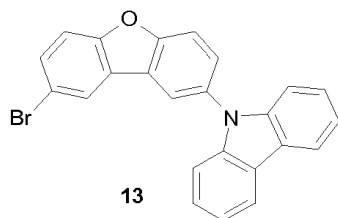
[0448]



[0449] 3,6-디메틸카르바졸(0.73 g, 3.8 mmol), 화합물 11(2.3 g, 4.3 mmol), 탄산칼륨(1.3 g, 9.5 mmol) 및 구리 분말(48 mg, 0.76 mmol)을 185℃로 가열시키고, 그 온도에서 48 시간 동안 교반하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 상기 혼합물을 염화메틸렌으로 추출하였다. 잔류물을 EtOH에 현탁시키고, 24 시간 동안 교반시키며, 여과시켰다. FC(SiO<sub>2</sub>, 9:1 시클로헥산/CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>)는 생성물 12(1.0 g, 43%)을 산출하였다.

[0450] MAL디-MS: m/z: 636 (M<sup>+</sup>).

[0451] **합성 실시예 13:** 화합물 13의 합성



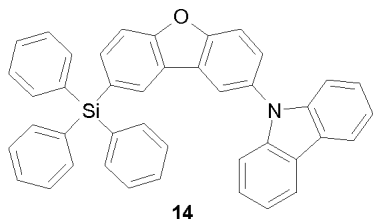
[0452]

[0453] 2,8-디브로모디벤조푸란의 합성은 특허 문헌[Org. Lett., 2006, 8, 4211-4214 und J. Med. Chem., 1985, 28, 1728-1740]에 기술되어 있다.

[0454] 트리테칸(50 ml) 중 2,8-디브로모디벤조푸란(16 g, 49 mmol), 카르바졸(95%, 8.6 g, 49 mmol), 탄산칼륨(16.9 g, 123 mmol) 및 구리 분말(622 mg, 9.8 mmol)을 185℃로 가열시키고, 그 온도에서 76 시간에서 교반하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 상기 혼합물을 염화메틸렌으로 추출하였다. 트리테칸을 증류시켰다. 시클로헥산으로부터 재결정화 및 FC(SiC<sub>2</sub>, 시클로헥산/CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 100:0~9:1)로 생성물 13(6.9 g, 34%)을 산출하였다.

[0455] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz): δ = 7.26-7.45 (m, 6H), 7.54 (d, 1H), 7.60-7.68 (2x d, 2H), 7.78 (d, 1H), 8.08 (2x s, 2H), 8.18 (d, 2H).

[0456] **합성 실시예 14:** 화합물 14의 합성



[0457]

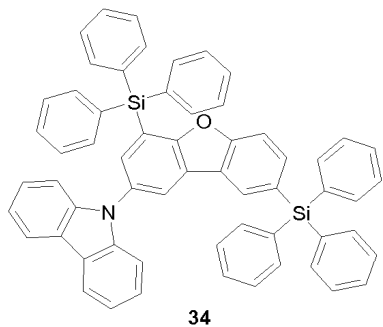
[0458] 건조 디에틸 에테르(5 ml) 중 13(1.0 g, 2.4 mmol)의 용액을 아르곤 하에서 n-부틸리튬(헥산 중 1.6 M, 1.6 ml, 2.6 mmol)과 함께 서서히 혼합시키고, 환류에서 25 분 동안 교반하였다. 건조 디에틸 에테르(7.5 mL) 중 트리페닐클로로실란(2.2 g, 7.3 mmol)의 용액을 환류 하에서 적가하고, 환류 하에서 추가 30 분 동안 교반하였다. 상기 혼합물을 MeOH(5 ml)와 혼합시키고, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>로 추가 희석하였다. 유기상을 물(3 x 25 mL)로 세척하고, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 상에서 건조시키고, 농축시켰다. FC(RP-C18-SiO<sub>2</sub> MeCN/CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 7:3)로 생성물 14(0.43 g, 30%)를 산출하였다.

[0459] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz): δ = 8.16 (s, 1H), 8.13 (d, 2H), 8.00 (s, 1H), 7.77 (d, 1H), 7.73 (d, 1H), 7.66 (d, 1H), 7.59 (m, 7H), 7.39 (m, 11 H), 7.31 (d, 2H), 7.26 (d, 2H).

[0460] **화합물 14의 개선된 합성:**

[0461] 건조 디에틸 에테르(85 mL) 중 13(1.0 g, 2.4 mmol) 및 트리페닐클로로실란(8.12 g, 26.7 mmol)의 용액을 아르곤 하에서 n-부틸리튬(헥산 중 1.6 M, 18.4 mL, 29.4 mmol)과 함께 천천히 혼합시키고, 밤새 교반시켰다. 상기 혼합물을 MeOH 와 혼합시키고, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>로 추가로 희석시켰다. 유기상을 물로 세척하고, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>에 의해 건조시키며, 농축시켰다. FC(RP-C18-SiO<sub>2</sub> MeCN/CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 7:3) 또는 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>/MeCN로부터의 재결정으로 생성물 14(10.6 g, 67%)를 산출하였다.

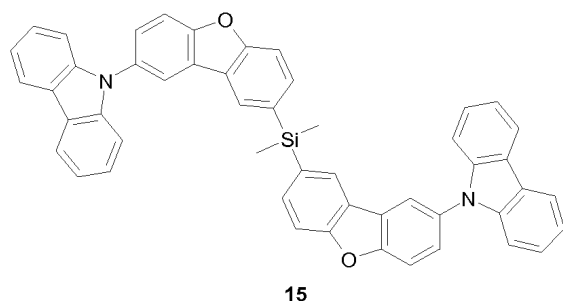
[0462] 화합물 14의 합성에서 단리될 수 있는 제2 성분은 하기 화합물 34이다:



[0463]

[0464]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ , 400 MHz):  $\delta$  = 7.20–7.50 (m, 26H), 7.58 (m, 9H), 7.65 (d, 1H), 7.95 (d, 3H), 8.10 (d, 2H), 8.14 (s, 1H), 8.19 (s, 1H).

[0465] **합성 실시예 15:** 화합물 15의 합성

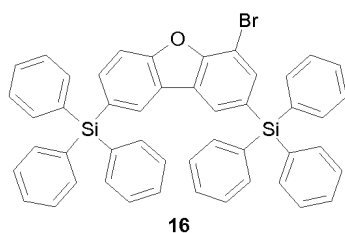


[0466]

[0467] 건조 디에틸 에테르(10 mL) 중 13(1.0 g, 2.4 mmol) 및 디클로로디메틸실란(0.16 g)의 용액을 아르곤 하에서 tert-부틸리튬(펜탄 중 1.7 M, 2.9 mL, 4.9 mmol)와 함께 천천히 혼합시키고, 밤새 교반시켰다. 상기 혼합물을 MeOH(5 mL)과 혼합시키고,  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 로 추가로 희석시켰다. 유기상을 물(3 x 25 mL)로 세척하고,  $\text{Na}_2\text{SO}_4$  상에서 건조시키며, 농축시켰다. FC(RP-C18-SiO<sub>2</sub> MeCN/ $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  75:25)로 생성물 15(0.37 g, 42%)를 산출하였다.

[0468]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz):  $\delta$  = 8.12 (d, 4H), 8.05 (2xs, 4H), 7.73 (d, 2H), 7.67 (d, 2H), 7.61 (d, 2H), 7.56 (d, 2H), 7.30 (m, 12 H), 0.65 (s, 6H).

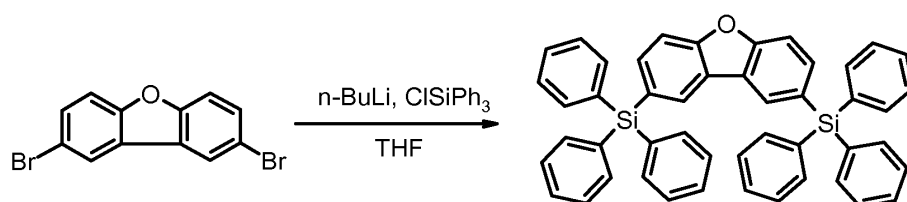
[0469] **합성 실시예 16:** 화합물 16의 합성



[0470]

[0471] 단계 1:

[0472] 2,8-비스(트리페닐실릴)-디벤조푸란의 합성



[0473]

[0474] 2,8-디브로모디벤조푸란 6.02 g(18.47 mmol)을 THF 120 ml에 현탁시키고, n-BuLi(헥산 중 1.6M) 22.9 ml(36.64 mmol)과 함께 -78℃에서 주의하여 혼합하였다. 이후, 상기 혼합물을 -78℃에서 3 시간 동안 교반하였다. 상기 반응 혼합물을 THF 120 ml 중 클로로트리페닐실란 10.91 g(37.00 mmol)의 용액과 혼합하고, 실온으로 가온되도록 한 후, 실온에서 16 시간 동안 교반하였다. 상기 혼합물을 메탄올 10 ml로 주의하여 켄칭시킨 후, 농축 건조시켰다. 상기 잔류물을 우선 메탄올에서 녹인 후, 물, 그리고 재차 메탄올에서 녹이고, 여과시키며, 건조시켰다. 미정제 생성물을 염화메틸렌에 용해시키고, 실리카 겔을 통해 여과시키며, 시클로헥산에 의해 블랭킷으로 결정화시켰다. 결정을 여과시키고, 건조시켰다. 이는 백색 분말 9.28 g(73 %)을 산출하였다.

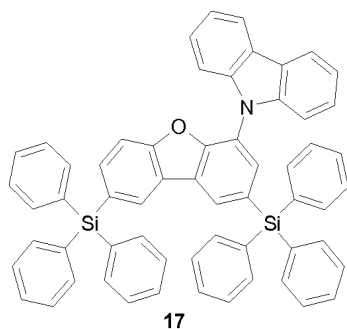
[0475]  $^1\text{H-NMR}$ : ( $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ , 500 MHz):  $\delta$  = 7.35-7.38 (m, 12 H,  $\text{CH}_{\text{Ar}}$ ), 7.41-7.44 (m, 6 H,  $\text{CH}_{\text{Ar}}$ ), 7.56-7.57 (m, 12 H,  $\text{CH}_{\text{Ar}}$ ), 7.58-7.63 (m, 4 H,  $\text{CH}_{\text{Ar}}$ ), 8.09 (s, 2 H,  $\text{CH}_{\text{Ar}}$ ).

[0476] 질량 (E1):  $m/e$  = 684 ( $\text{M}^+$ )

[0477] 단계 2:

[0478] 건조 THF(200 mL) 중 2,8-비스(트리페닐실릴)디벤조푸란(10.0 g, 14.6 mmol)의 용액을 아르곤 하 -78℃에서 n-부틸리튬(헥산 중 1.6 M, 11.0 mL, 17.5 mmol)과 함께 서서히 혼합하고, 0℃에서 2 시간 동안 교반시켰다. 건조 THF(8 mL) 중 1,2-디브로메탄(3.88 g, 20.4 mmol)의 용액을 -78℃에서 천천히 첨가한 후, 혼합물을 교반과 함께 밤새 실온으로 가온시켰다. 상기 용액을 MeOH(20 mL)과 혼합하고, 30 분 동안 교반하였다. 염화메틸렌을 용액이 형성될 때까지 첨가하였다. 유기상을 물(3 x 100 mL)로 세척하고,  $\text{Na}_2\text{SO}_4$  상에서 건조시키며, 농축시켰다. 산출량 11.2 g, ~25% 시약 및 ~75% 생성물의 혼합물을 다음 단계(실시예 17)에서 사용하였다.

[0479] **합성 실시예 17: 화합물 17의 합성**

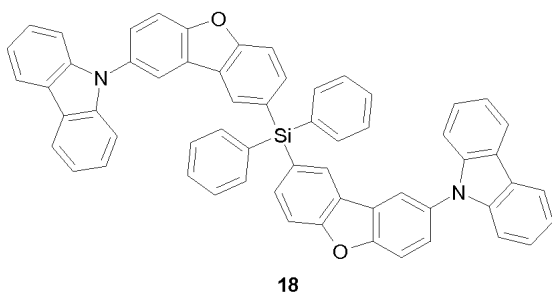


[0480]

[0481] 트리데칸(50 ml) 중 생성물 16(실시예 16 참조, 11.0 g), 카르바줄(95%, 2.53 g, 14.4 mmol), 탄산칼륨(4.98 g, 36.0 mmol) 및 구리 분말(183 mg, 2.88 mmol)을 195℃으로 가열하고, 그 온도에서 96 시간 동안 교반시켰다. 실온으로 냉각시킨 후, 상기 혼합물을 염화메틸렌으로 추출하였다. 트리데칸으로 증류시켰다.  $\text{FC}(\text{SiO}_2, 85:15)$  시클로헥산/ $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 로 생성물 17(6.3 g, 51%)을 산출하였다(2 단계에 걸침).

[0482]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz):  $\delta$  = 7.28 (dd, 2H), 7.33-7.48 (m, 22H), 7.57-7.66 (m, 14H), 7.83 (s, 1H), 8.15 (m, 4H).

[0483] **합성 실시예 18: 화합물 18의 합성**



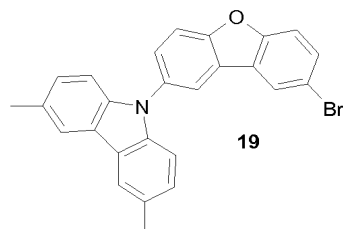
[0484]

[0485] 건조 디에틸 에테르(10 ml) 중 13(1.0 g, 2.4 mmol) 및 디클로로디페닐실란(0.32 g, 1.2 mmol)의 용액을 아르

곤 하에서 tert-부틸리튬(펜탄 중 1.7 M, 2.9 ml, 4.9 mmol)과 함께 서서히 혼합시키고, 밤새 교반하였다. 상기 혼합물을 MeOH(5 ml)와 혼합하고, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>로 추가 희석시켰다. 유기상을 물(3 x 25 ml)로 세척하고, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>로 세척하며, 건조시키고, 농축시켰다. FC(RP-C18-SiO<sub>2</sub> MeCN/CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 2:3)로 생성물 18(0.50 g, 49%)을 산출하였다.

[0486] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz): δ = 8.12 (s, 2H), 8.10 (m, 4H), 7.96 (s, 2H), 7.74 (d, 4H), 7.65 (d, 2H), 7.60 (d, 4H), 7.56 (d, 2H), 7.36 (m, 10 H), 7.26 (m, 8H).

[0487] **합성 실시예 19:** 화합물 19의 합성

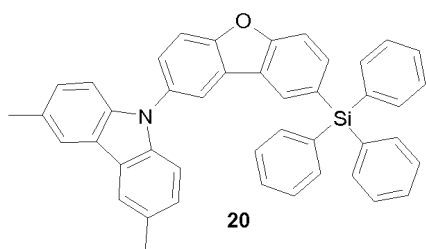


[0488]

[0489] 트리데칸(200 ml) 중 2,8-디브로모벤조푸란(18.8 g, 57.7 mmol), 3,6-디메틸카바졸(12.4 g, 63.4 mmol), 탄산칼륨(21.9 g, 159 mmol) 및 구리 분말(732 mg, 11.5 mmol)을 185℃로 가열하고, 그 온도에서 24 시간 동안 교반시켰다. 실온으로 냉각시킨 후, 염화메틸렌으로 추출하였다. 트리데칸을 증류시켰다. 시클로헥산으로부터 재결정화 및 FC(SiO<sub>2</sub>, 시클로헥산/CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 100:0~9:1)로 생성물 19(8.6 g, 33%)를 산출하였다.

[0490] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz): δ = 2.55 (s, 6H), 7.18-7.28 (m, 6H), 7.51 (d, 1H), 7.59-7.65 (2x d, 2H), 7.75 (d, 1H), 7.92 (2x s, 2H), 8.05 (d, 2H).

[0491] **합성 실시예 20:** 화합물 20의 합성

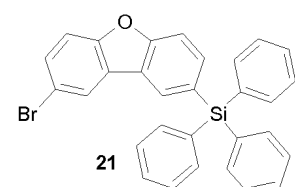


[0492]

[0493] 건조 디에틸 에테르(20 ml) 중 19(2.8 g, 6.4 mmol) 및 트리페닐클로로실란(2.0 g, 6.4 mmol)의 용액을 아르곤 하에서 n-부틸리튬(헥산 중 1.6 M, 5.2 ml, 8.3 mmol)와 함께 천천히 혼합하고, 밤새 교반하였다. 상기 혼합물을 MeOH(10 ml)과 혼합하고, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>에 의해 추가로 희석시켰다. 유기상을 물(3 x 50 ml)로 세척하고, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>로 건조시키며, 농축시켰다. 재결정화(2x)는 생성물 20(2.25 g, 57%)을 산출하였다.

[0494] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz): δ = 2.50 (s, 6H), 7.20 (m, 4H), 7.40 (m, 9H), 7.58 (m, 7H), 7.65 (d, 1H), 7.74 (dd, 2H), 7.90 (s, 2H), 7.98 (s, 1H), 8.10 (s, 1H).

[0495] **합성 실시예 21:** 화합물 21의 합성



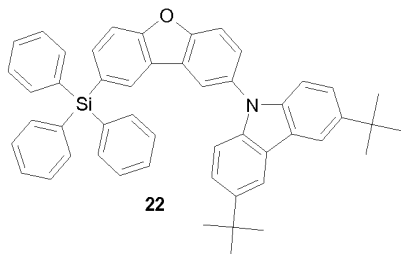
[0496]

[0497] 건조 디에틸 에테르(200 mL) 중 2,8-디브로모디벤조푸란(20.0 g, 61.3 mmol)의 저온 용액(-15℃)을 아르곤 하에서 n-부틸리튬(헥산 중 1.6 M, 40.3 mL, 64.4 mmol)와 천천히 혼합하고, -15℃에서 2 시간 동안 교반하며, 이후 건조 디에틸 에테르(100 mL) 중 트리페닐클로로실란(18.6 g, 61.3 mmol)의 용액을 적가하였다.

[0498] 상기 혼합물을 밤새 RT로 교반시킨 후, MeOH(25 ml)와 혼합하고, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>에 의해 추가로 희석하였다. 유기상을 물 (3 x 100 mL)로 세척하고, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>에 의해 건조시키며, 농축시켰다. FC(SiO<sub>2</sub>, 시클로헥산/CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 100:0~9:1)로 생성물 21(9.3 g, 30%)을 산출하였다.

[0499] <sup>1</sup>H-NMR (CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 400 MHz): δ = 7.38-7.50 (m, 10 H), 7.56 (d, 1H), 7.60 (m, 7H), 7.68 (d, 1H), 8.01 (s, 1H), 8.12 (s, 1H).

[0500] **합성 실시예 22:** 화합물 22의 합성



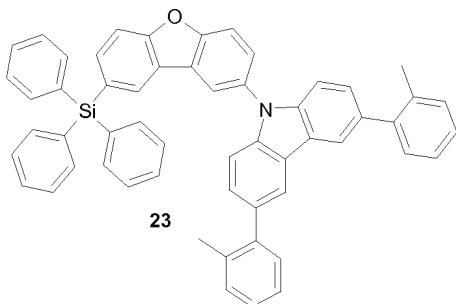
[0501]

[0502] Die Synthese von 3,6-비스(tert-부틸)카르바졸의 합성은 문헌[Chemistry Letters, 37(9), 986-987; 2008]에 기술되어 있다.

[0503] 트리데칸(20 ml) 중 화합물 21(5.13 g, 10.1 mmol), 3,6-비스(tert-부틸)카르바졸(2.91 g, 10.4 mmol), 탄산칼륨(3.59 g, 26.0 mmol) 및 구리 분말(133 mg, 2.1 mmol)을 185℃로 가열하고, 그 온도에서 60 시간 동안 교반하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 염화메틸렌으로 추출시켰다. 상기 용액을 농축시키고, 잔류물을 헵탄(2 x 60 ml)에 현탁시키며, 교반시키고, 여과시켰다. 생성물 22 (4.69 g, 66%).

[0504] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz): δ = 1.48 (s, 18H), 7.27 (d, 2H), 7.40 (m, 11 H), 7.58 (m, 7H), 7.70 (dd, 2H), 7.78 (d, 1H), 8.02 (s, 1H), 8.18 (2xs, 3H).

[0505] **합성 실시예 23:** 화합물 23의 합성



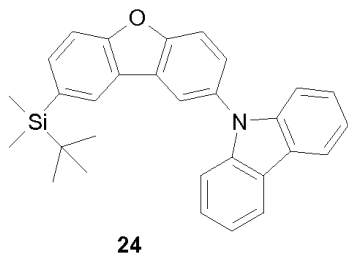
[0506]

[0507] 3,6-비스(2-톨릴)카르바졸은 US2005/0084711 A1에 기술된 방법에 의해 제조할 수 있다.

[0508] 트리데칸(25 ml) 중 화합물 21(4.30 g, 8.50 mmol), 3,6-비스(2-톨릴)카르바졸(2.95 g, 8.5 mmol), 탄산칼륨 (2.94 g, 21.2 mmol) 및 구리 분말(108 mg, 1.70 mmol)을 185℃로 가열시키고, 그 온도에서 96 시간 동안 교반시켰다. 실온으로 냉각시킨 후, 염화메틸렌으로 추출하였다. 상기 용액을 농축시키고, 잔류물을 헵탄(25 ml)에 현탁시키며, 교반하고, 여과시켰다. FC(SiO<sub>2</sub>, 시클로헥산/CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 100:0~9:1 )로 생성물 23(3.14 g, 48%)을 산출하였다.

[0509] <sup>1</sup>H-NMR (CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 400 MHz): δ = 2.35 (s, 6H), 7.23 -7.47 (m, 21 H), 7.60 (d, 6H), 7.72 (m, 3H), 7.85 (d, 1H), 8.08 (s, 2H), 8.13 (s, 1H) 8.22 (s, 1H).

[0510] **합성 실시예 24:** 화합물 24의 합성

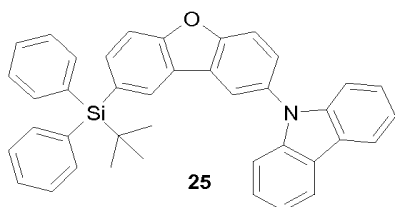


[0511]

[0512] 건조 디에틸 에테르(9 mL) 중 13(0.50 g, 0.12 mmol) 및 Tert-부틸디메틸클로로실란(0.28 g, 0.18 mmol)의 용액을 아르곤 하에서 n-부틸리튬(헥산 중 1.6 M, 0.8 mL, 0.13 mmol)와 천천히 혼합하고, 밤새 교반하였다. 상기 혼합물을 포화 NH<sub>4</sub>Cl 용액(10 mL)와 혼합하고, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>에 의해 추출하였다. 유기 상을 Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>로 건조시키고, 농축시켰다. FC(C18-SiO<sub>2</sub>, MeCN)로 생성물 24(0.15 g, 27%)를 산출하였다. 산출량은 작은 배치 크기로 인해 적었다.

[0513] <sup>1</sup>H-NMR (CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 400 MHz): δ = 0.36 (s, 6H), 0.90 (s, 9H), 7.30 (dd, 2H), 7.42 (dd, 4H), 7.66 (m, 3H), 7.80 (d, 1H), 8.13 (s, 1H), 8.18 (s, 1H), 8.19 (d, 2H).

[0514] **합성 실시예 25:** 화합물 25의 합성

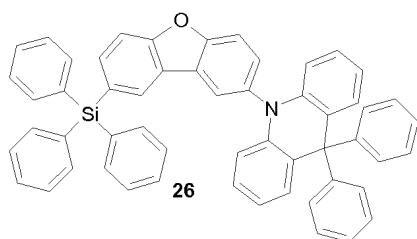


[0515]

[0516] 건조 디에틸 에테르(9 mL) 중 13(0.50 g, 0.12 mmol) 및 Tert-부틸디페닐클로로실란(0.50 g, 0.18 mmol)의 용액을 아르곤 하에서 n-부틸리튬(헥산 중 1.6 M, 1.14 mL, 0.18 mmol)과 천천히 혼합하고, 밤새 교반시켰다. 상기 혼합물을 포화 NH<sub>4</sub>Cl 용액(10 mL)과 혼합하고, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>로 추출하였다. 유기 상을 Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>로 건조시키고, 농축시켰다. FC(C18-SiO<sub>2</sub>, MeCN)로 생성물 25(0.12 g, 17%)를 산출하였다. 산출량은 작은 배치 크기로 인해 적었다.

[0517] <sup>1</sup>H-NMR (CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 400 MHz): δ = 1.21 (s, 9H), 7.28 (dd, 2H), 7.37 (m, 10H), 7.60 (m, 5H), 7.64 (d, 1H), 7.74 (d, 1H), 7.81 (d, 1H), 8.04 (s, 1H), 8.15 (s, 1H), 8.18 (d, 2H).

[0518] **합성 실시예 26:** 화합물 26의 합성



[0519]

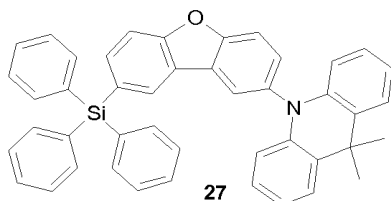
[0520] 9,9-디메틸-9,10-디히드로아크리딘의 합성은 문헌[Chemische Berichte; 37; 1904; 3202]에 기술되어 있다.

[0521] 트리데칸(30 mL) 중 화합물 21(6.07 g, 12.0 mmol), 9,9-디메틸-9,10-디히드로아크리딘(4.00 g, 12.0 mmol), 탄산칼륨(4.15 g, 30.0 mmol) 및 구리 분말(152 mg, 2.4 mmol)을 220°C로 가열하고, 그 온도에서 48 시간 동안 교반하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 염화메틸렌으로 추출하였다. 상기 용액을 농축시키고, 잔류물을 약간의 헵탄에 현탁시키며, 교반하고, 여과시킨 후, 염화메틸렌에 현탁시키며, 교반하고, 여과시켰으며, 염화메틸렌 중 현탁, 교반 및 여과 후에 생성물 26(2.13 g, 23%)을 산출하였다.

[0522] <sup>1</sup>H-NMR (CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 400 MHz): δ = 6.42 (d, 2H), 6.87 (dd, 4H), 7.00 (m, 6H), 7.18-7.28 (m, 7H), 7.40 (t,

6H), 7.45 (m, 4H), 7.60 (d, 6H), 7.65 (d, 1H), 7.69 (d, 1H), 7.73 (d, 1H), 8.03 (s, 1H).

[0523] **합성 실시예 27:** 화합물 27의 합성



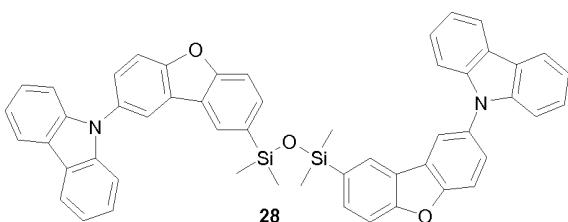
[0524]

[0525] 9,9-디메틸-9,10-디히드로아크리딘의 합성은 문헌[Chemische Berichte, 113(1), 358-84; 1980]에 기술되어 있다.

[0526] 트리데칸(40 ml) 중 화합물 21(3.99 g, 7.89 mmol), 9,9-디메틸-9,10-디히드로아크리딘(1.82 g, 8.68 mmol), 탄산칼륨(3.00 g, 21.7 mmol) 및 구리 분말(100 mg, 1.58 mmol)을 225℃로 가열시키고, 그 온도에서 92 시간 동안 교반하였다. 실온으로 냉각시킨 후 염화메틸렌으로 추출하였다. 상기 용액을 농축시키고, FC(SiO<sub>2</sub>, 시클로헥산/CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 9:1~1:1)로 생성물 27(0.85 g, 17%)을 산출하였다.

[0527] <sup>1</sup>H-NMR (CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 400 MHz): δ = 1.68 (s, 6H), 6.24 (d, 2H), 6.89 (dd (4H), 7.36 - 7.48 (m, 12H), 7.58 (d, 6H), 7.70 (dd, 2H), 7.83 (d+ts, 2H), 8.13 (s, 1H).

[0528] **합성 실시예 28:** 화합물 28의 합성

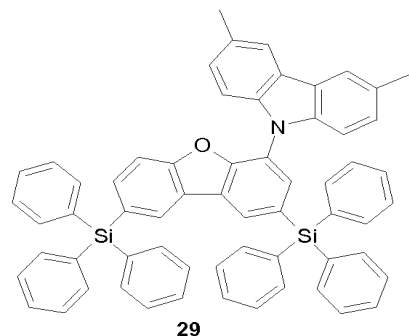


[0529]

[0530] 건조 디에틸 에테르(150 ml) 중 13(5.15 g, 12.5 mmol) 및 1,3-디클로로-1,1,3,3-테트라메틸디실록산(1.31, 6.25 mmol)의 혼합물을 아르곤 하에서 t-부틸리튬(펜탄 중 1.7 M, 14.7 ml, 25 mmol)과 혼합하고, 밤새 교반하였다. 상기 혼합물을 표화 NH<sub>4</sub>Cl 용액(30 ml)으로 혼합하고, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>로 추출하였다. 상기 유기상을 Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>로 건조시키고, 농축시켰다. FC(SiO<sub>2</sub>, 시클로헥산/CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 9:1~1:9)로 생성물 28(2.90 g, 58%)을 산출하였다.

[0531] <sup>1</sup>H-NMR (CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 400 MHz): δ = 0.40 (s, 12H), 7.28 (dd, 4H), 7.37 (d, 4H), 7.42 (dd, 4H), 7.53 (d, 2H), 7.55 (d, 2H), 7.60 (d, 2H), 7.68 (d, 2H), 7.96 (s, 2H), 8.04 (s, 2H), 8.18 (d, 4H).

[0532] **합성 실시예 29:** 화합물 29의 합성



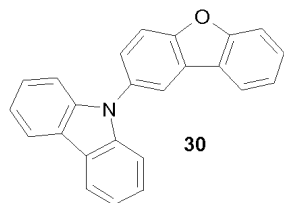
[0533]

[0534] 트리데칸(100 ml) 중 생성물 16(실시예 16 참조, 10.0 g), 3,6-디메틸카르바줄(2.55 g, 13.1 mmol), 탄산칼륨(4.61 g, 32.7 mmol) 및 구리 분말(166 mg, 2.61 mmol)을 205℃로 가열시키고, 그 온도에서 72 시간 동안 교반

하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 염화메틸렌으로 추출하였다. 트리데칸은 증류시켰다. FC(SiO<sub>2</sub>, 시클로헥산/CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 9:1~1:1 )으로 생성물 29(3.1 g, 26%(2 단계에 걸침))을 산출하였다.

[0535] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz): δ = 2.50 (s, 6H), 7.04 (d, 2H), 7.11 (d, 2H), 7.32-7.46 (m, 19H), 7.52-7.62 (m, 13H), 7.80 (s, 1H), 7.88 (s, 2H), 8.12 (s, 2H).

[0536] **합성 실시예 30:** 화합물 30의 합성

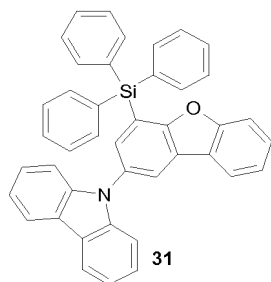


[0537]

[0538] 트리데칸(150 ml) 중 2-브로모디벤조푸란(24.7 g, 100 mmol), 카르바졸(95%, 26.4 g, 150 mmol), 탄산칼륨(51.8 g, 375 mmol) 및 구리 분말(1.27 g, 20 mmol)을 180℃로 가열하고, 그 온도에서 72 시간 동안 교반하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 염화메틸렌으로 추출하였다. 상기 용액을 농축시키고, 잔류물을 헵탄(25 ml)에 현탁시키며, 교반하고, 여과시켰다. FC(SiO<sub>2</sub>, 시클로헥산/CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 5:1)로 생성물 30(19.6 g, 59%)을 산출하였다.

[0539] <sup>1</sup>H-NMR (CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 400 MHz): δ = 7.3 (dd, 2H), 7.4 (m, 5H), 7.5 (dd, 1H), 7.6 (dd, 2H), 7.8 (d, 1H), 8.0 (d, 1H), 8.2 (s+d, 1+2H).

[0540] **합성 실시예 31:** 화합물 31의 합성



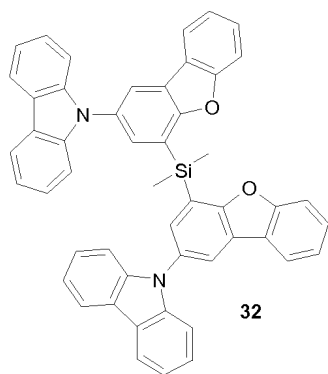
[0541]

[0542] THF(130 ml) 중 30(3.3 g, 10 mmol)을 아르곤 하 -78℃에서 n-부틸리튬(헥산 중 1.6 M, 7.5 ml, 12 mmol)과 천천히 혼합하고, 0℃에서 2 시간 동안 교반하였다. 상기 용액을 -78℃로 냉각시키고, THF(10 ml) 중 트리페닐클로로실란(4.42 g, 15 mmol)의 용액을 첨가하였다. 상기 용액을 밤새 RT로 교반하고, 포화 NH<sub>4</sub>Cl 용액(30 ml)과 혼합하며, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>로 추출하였다. 상기 유기상을 Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>로 건조시키고, 농축시켰다. FC(C18-SiO<sub>2</sub>, MeCN)로 생성물 31(2.35 g, 40%)을 산출하였다.

[0543] <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz): δ = 7.28 (d, 1H), 7.32-7.48 (m, 17H), 7.60 (s, 1H), 7.70 (d, 6H), 7.95 (d, 1H), 8.2 (d, 2H), 8.20 (s, 1H).



[0544] **합성 실시예 32:** 화합물 32의 합성

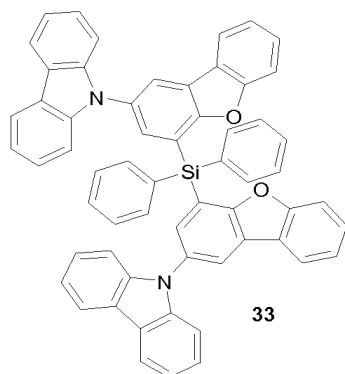


[0545]

[0546] THF(80 ml) 중 30(3.0 g, 9 mmol)의 용액을 아르곤 하 -40℃에서 n-부틸리튬(헥산 중 1.6 M, 9.5 mL, 15 mmol)와 천천히 혼합하고, 0℃에서 2 시간 동안 교반하였다. 상기 용액을 -78℃로 냉각시키고, THF(5 ml) 중 디메틸디클로로실란(0.59 g, 4.5 mmol)의 용액을 첨가하였다. 상기 용액을 밤새 실온으로 교반시키고, NH<sub>4</sub>Cl 용액(20 ml)과 혼합하며, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>로 추출하였다. 유기상을 Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>로 건조시키고, 농축시켰다. FC(SiO<sub>2</sub>, 시클로헥산:CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 9:1)로 생성물 32(2.08 g, 64%)을 산출하였다.

[0547] <sup>1</sup>H-NMR (CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 400 MHz): δ = 1.02 (s, 6H), 7.24 (m, 8H), 7.30 (d, 4H), 7.40 (dd, 2H), 7.55 (dd, 2H), 7.65 (d, 2H), 7.80 (s, 2H), 7.98 (d, 2H), 8.15 (d+s, 4+2H)

[0548] **합성 실시예 33:** 화합물 33의 합성



[0549]

[0550] THF(60 ml) 중 30(2.2 g, 6.7 mmol)의 용액을 아르곤 하 -40℃에서 n-부틸리튬(헥산 중 1.6 M, 7.3 ml, 11.7 mmol)과 천천히 혼합하고, 0℃에서 2 시간 동안 교반하였다. 상기 용액을 -78℃로 냉각시키고, THF(5 ml) 중 디페닐디클로로실란(0.86 g, 3.35 mmol)의 용액을 첨가하였다. 상기 용액을 밤새 실온으로 교반하고, NH<sub>4</sub>Cl 용액(20 ml)과 혼합하며, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>로 추출하였다. 상기 유기상을 Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>로 건조시키고, 농축시켰다. FC(SiO<sub>2</sub>, 시클로헥산:CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 9:1)로 생성물 33(1.82 g, 64%)을 산출하였다.

[0551] <sup>1</sup>H-NMR (CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 400 MHz): δ = 7.18 (m, 8H), 7.32 (d, 4H), 7.40 (m, 8H), 7.50 (m, 4H), 7.70 (s, 2H), 7.88 (d, 4H), 7.98 (d, 2H), 8.08 (d, 4H), 8.25 (s, 2H)

[0552] **다이오드 실시예**

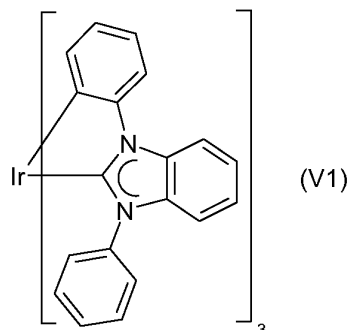
[0553] *비교예:*

[0554] 매트릭스 물질(91.5 중량%) 및 정공/여기자 차단체로서 9-페닐-3,6-비스(트리페닐실릴)카르바졸을 포함하는 OLED의 제조

[0555] 애노드로서 사용되는 상기 ITO 기재는 우선 LCD 제조용 상업용 세정제(Deconex<sup>®</sup> 20NS, 및 25ORGAN-ACID<sup>®</sup> 중성 화제)로 우선 세척한 후, 초음파조 중 아세톤/이소프로판올 혼합물에서 세척하였다. 임의의 가능한 유기 잔류물

을 제거하기 위해서, 상기 기재를 오존 오븐 중 연속 오존 흐름에 추가 25 분 동안 노출시켰다. 이 처리는 또한 상기 IT0의 정공 주입 특성을 향상시킨다.

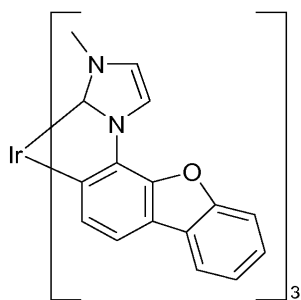
[0556] 이후, 하기 명시된 유기 물질을 약  $10^{-8}$  mbar에서 대략 0.5~5 nm/mm의 속도로 상기 세정된 기재 상에 증착에 의해 도포시켰다. 정공 전도체 및 여기자 차단체, Ir(dpbi)<sub>3</sub> (V1) 를 두께가 45 nm인 기재에 도포하였다.



Ir(dpbi)<sub>3</sub>

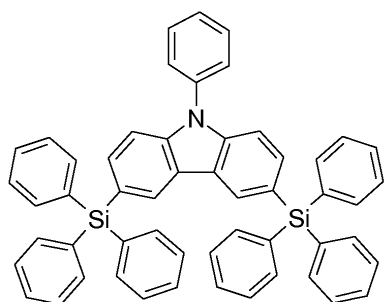
[0557]  
[0558] (제조에 대해서, 출원 WO 2005/019373에 Ir 착물(7) 참조)

[0559] 이후, 하기 화학식 (V2) 8.5 중량% 및 상기 화학식 (V1)의 9.15 중량%의 혼합물을 증착에 의해 두께 10 nm로 도포하며, 전자의 화합물은 발광체 물질로서 작용하고, 후자는 매트릭스 물질로서 작용하였다:



V2

[0560]  
[0561] 이후, 화학식 (V2) 8.5 중량% 및 화합물 9-페닐-3,6-비스(트리페닐실릴)카르바졸(V3) 91.5 중량%의 혼합물을 증착에 의해 두께 10 nm로 도포하며, 전자의 화합물은 발광체 물질로서 작용하고, 후자는 매트릭스 물질로서 작용하였다.



V3

[0562]  
[0563] 이후, 상기 물질 9-페닐-3,6-비스(트리페닐실릴)카르바졸(V3)을 여기자 및 정공 차단체로서 증착에 의해 두께 10 nm로 도포하였다.

[0564] 이어서, 전자 전도체 BCP를 증착에 의해 40 nm의 두께로 도포하고, 0.75 nm 두께의 불화리튬 층 및 최종적으로, 110 nm 두께의 Al 전극을 도포하였다.

[0565] 상기 OLED를 특성화하기 위해서, 전계발광 스펙트럼을 다양한 전류 및 전압에서 기록하였다. 또한, 전류-전압

특성치는 발광된 광 산출량과 함께 특정하였다. 상기 광 산출량은 광도계에 의한 보정에 의해 광도계 파라미터로 전환시킬 수 있다.

**다이오드 실시예 1:**

OLED의 제조 및 구조는 상기 비교예와 동일하나, 화합물 3을 9-페닐-3,6-비스(트리페닐실릴)카르바졸(V3) 대신에 사용하였다.

표 1은 상기 비교예 및 다이오드 실시예 1로부터의 OLED의 전기적 특성의 비교를 나타낸다. 화합물 V3 대신에 화합물 3을 사용하여 전력 효율 및 양자 전압 QE 둘 모두를 증가시키고, 전압을 감소시켰다.

표 1의 제1의 2개의 칼럼에서, 발광층 및 정공 차단체/여기자 차단체 층의 매트릭스 물질 및 이의 구조식이 보고되어 있다.

표 1의 오른쪽 칼럼에서, 다양한 층의 물질을 특정 OLED의 구조 및 이의 두께를 나타내었다. 상기 애노드는  $125 \text{ nm} \pm 20 \text{ nm}$  두께의 ITO 층이며, 그 위에 침착된다.

- 45 nm 두께의, 물질 (V1)의 정공 전도체/여기자 차단체 층,

- (V1)의 매트릭스 물질 중 발광체로서 (V2) 8.5 중량%를 갖는 제1 10 nm 두께의 발광층,

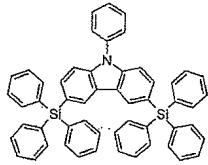
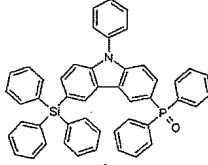
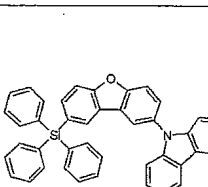
- 발광체로서 (V2) 및 매트릭스 물질로서 (V3)(비교예) 또는 3(다이오드 실시예 1) 8.5 중량%를 갖는 제2 40 nm 두께의 발광층,

- (V3)(비교예) 또는 3(다이오드 실시예 1)로 구성된 10 nm 두께의 정공 차단체/여기자 차단체 층,

- BCP의 40 nm 두께의 전자 전도체 층

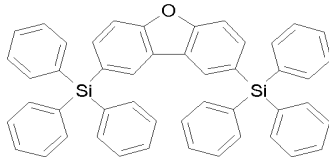
- LiF/알루미늄의 캐소드.

표 1

물질	구조	300 cd/m <sup>2</sup> 에서의 전력 효율	300 cd/m <sup>2</sup> 에서의 QE	300 cd/m <sup>2</sup> 에서의 전압 [V]	애노드 상의 OLED의 구조 (두께 = 125 +/- 20 nm)  (비교예와 동일한 제조)
V3		100	100	100	V1 (45nm)//8,5%V2:V1 (10nm)//8,5%V2:V3 (40 nm)// V3 (10nm)//BCP (40nm)//LiF//Alu
3		157	156	81	V1 (45nm)//8,5%V2:V1 (10nm)//8,5%V2:3 (40 nm)// 3 (10nm)//BCP (40nm)//LiF//Alu
14		142	162	58	PEDOT-PSS //V1:MoO3 (10%) (35nm)// V1 (10 nm)// 10%V2:V1 (10nm)//10%V2:14 (30 nm)// V4 (5nm)//BCP (30nm)//LiF//Alu

상기 전력 효율, 양자 효율 및 전압은 각각 물질 V3를 포함하는 OLED를 기준으로 하는 상대치이다.

[0580] PEDOT-PSS는 정공 주입층으로서 사용하였다(다이오드 실시예 16 참조)



V4

[0581]

[0582] 다이오드 실시예 2:

[0583] 비교예에서와 같으나, 화합물 2를 9-페닐-3,6-비스(트리페닐실릴)카르바졸(V3) 대신에 사용하였다.

[0584] 다이오드 실시예 3:

[0585] 다이오드 실시예 1에 따르나, 청색 발광 발광체 물질(V2) 대신에 녹색 발광 발광체 물질을 사용하였으며, 이는 트리스(2-페닐피리딘)이리듐(III), 트리스(2-(*p*-톨릴)피리딘)이리듐(III) 및 비스(2-페닐-피리딘)(아세틸아세토네이트)이리듐(III)으로부터 선택된다.

[0586] 다이오드 실시예 4:

[0587] 다이오드 실시예 1에 따르나, 청색 발광 발광체 물질(V2) 대신에 적색 발광 발광체 물질을 사용하였으며, 이는 하기로부터 선택된다:

[0588] 이리듐(III)트리스(1-페닐이소퀴놀린), 트리스(2-페닐퀴놀린)이리듐 (III), 이리듐(III)비스(2-2'-벤조-티에닐)피리디나토-N,C3')(아세틸아세토네이트), 이리듐(III)비스(1-페닐이소퀴놀린)(아세틸아세토네이트), 비스(2-페닐퀴놀린)(아세틸아세토네이트)이리듐(III), 이리듐(III)비스(디벤조[f,h]키녹살린)(아세틸아세토네이트), 이리듐(III)비스(2-메틸디벤조[f,h]키녹살린)(아세틸아세토네이트), 비스[1-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)이소퀴놀린](아세틸아세토네이트)이리듐(III), 비스(2-벤조[b]티오오펜-2-일-피리딘)(아세틸아세토네이트)이리듐(III), 비스(2-페닐벤조티아졸라토)(아세틸아세토네이트)이리듐(III), 비스(2-(9,9-디헥실플루오레닐)-1-피리딘)(아세틸아세토네이트)이리듐 (III), 비스[3-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)이소퀴놀린](아세틸아세토네이트)이리듐(III), 트리스(디벤조일아세토나토)-모노(페난트롤린)유로퓸(III), 오스뮴(II)비스(3-(트리플루오로메틸)-5-(4-*tert*-부틸피리딜)-1,2,4-트리아졸레이트)디페닐메틸포스핀, 오스뮴(II)비스(3-(트리플루오로메틸)-5-(2-피리딜)-1,2,4-트리아졸)디메틸페닐포스핀, 오스뮴(II)비스(3-(트리플루오로메틸)-5-(4-*tert*-부틸피리딜)-1,2,4-트리아졸레이트)디메틸페닐포스핀, 오스뮴(II)비스(3-(트리플루오로메틸)-5-(2-피리딜)-피라졸레이트)디메틸페닐포스핀, 트리스[4,4'-*di-tert*-부틸(2,2')-비피리딘]루테튬(III), 오스뮴(II)비스(2-(9,9-디부틸플루오레닐)-1-이소퀴놀린(아세틸아세토네이트)).

[0589] 다이오드 실시예 5:

[0590] 다이오드 실시예 1에 따르나, 상기 정공 전도체/여기자 차단체 층용 물질(V1) 대신에, 하기로부터 선택되는 물질을 사용하였다:

[0591] 4,4',4"-트리스(N,N'-디페닐아미노)트리페닐아민(TDTA), N,N'-비스(나프탈렌-2-일)-N,N'-비스(페닐)벤지딘( $\beta$ -NPB), N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)-9,9-스피로비플루오렌(스피로-TPD), N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)-9,9-스피로비플루오렌(스피로-NPB), N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)-9,9-디메틸플루오렌(DMFL-TPD), N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)-9,9-디메틸플루오렌, N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)-2,2-디메틸벤지딘, N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)-벤지딘, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)-벤지딘, 2,3,5,6-테트라플루오로-7,7,8,8-테트라시아노-퀴노디메탄(F4-TCNQ), 4,4',4"-트리스(N-3-메틸페닐-N-페닐-아미노)트리페닐아민, 4,4',4"-트리스(N-(2-나프틸)-N-페닐아미노)-트리페닐아민, 피라지노[2,3-*f*][1,10]페난트롤린-2,3-디카르보니트릴(PPDN), N,N,N',N'-테트라키스(4-메톡시페닐)벤지딘(MeO-TPD), 2,7-비스[N,N'-비스(4-메톡시페닐)아미노]-9,9-스피로비플루오렌(MeO-스피로-TPD), 2,2'-비스[N,N'-비스(4-메톡시페닐)아미노]-9,9-스피로비플루오렌(2,2'-MeO-스피로-TPD), N,N'-디-페닐-N,N'-디-[4-(N,N'-디-톨릴-아미노)페닐]벤지딘(NTNPB), N,N'-디-페닐-N,N'-디-[4-(N,N'-디-페닐-아미노)페닐]벤지딘(NPNPB), N,N'-디(나프탈렌-2-일)-N,N'-디페닐벤젠-1,4-디아민( $\beta$ -NPP), N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)-9,9-디페닐플루오렌(DPFL-TPD), N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)-9,9-디페닐플루오렌(DPFL-NPB), 2,2',7,7'-테트라키스(N,N'-디페닐아미노)-9,9'-스피로비플루오렌(스피로-TAD), 9,9-비스[4-N,N'-비스비페닐-4-일-아미노)페닐]-9H-플

루오렌 (BPAPF), 9,9-비스[4-(N,N-비스나프탈렌-2-일-아미노)페닐]-9H-플루오렌(NPAPF), 9,9-비스[4-(N,N-비스나프탈렌-2-일-N,N'-비스페닐-아미노)페닐]-9H-플루오렌(NPBAPF), 2,2',7,7'-테트라키스[N-나프탈레닐(페닐)-아미노]-9,9'-스피로비플루오렌(스피로-2NPB), N,N'-비스(페난트렌-9-일)-N,N'-비스(페닐)-벤지딘(PAPB), 2,7-비스[N,N-비스(9,9-스피로비플루오렌-2-일)-아미노]-9,9-스피로비플루오렌(스피로-5), 2,2'-비스[N,N-비스(비페닐-4-일)아미노]-9,9-스피로비플루오렌(2,2'-스피로-DBP), 2,2'-비스(N,N-디-페닐-아미노)-9,9-스피로비플루오렌(스피로-BPA), 2,2',7,7'-테트라(N,N-디-톨릴)아미노-스피로-비플루오렌 (스피로-TTB), N,N,N',N'-테트라-나프탈렌-2-일-벤지딘(TNB), 디-[4-(N,N-디톨릴-아미노)-페닐]시클로헥산, 구리 프탈로시아닌 및 티탄 옥시드 프탈로시아닌.

[0592] **다이오드 실시예 6:**

[0593] 다이오드 실시예 1, 3~5에 따르면, 상기 정공 차단체/여기자 차단체 물질 및/또는 전자 전도체 물질을 상기 화합물(V3) 또는 3 및 BCP 대신에 하기로부터 선택되는 물질로 사용하였다:

[0594] 2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린(바토쿠프로인, (BCP)), 비스(2-메틸-8-키놀리나토)-4-페닐-페닐라토)-알루미늄(III)(BAIq), 2,2',2''-(1,3,5-벤젠트리일)-트리스(1-페닐-1H-벤즈이미다졸), 2-(4-비페닐릴)-5-(4-tert-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸, 8-히드록시퀴놀리노라토-리튬, 4-(나프탈렌-1-일)-3,5-디페닐-4H-1,2,4-트리아졸, 1,3-비스[2-(2,2'-비피리딘-6-일)-1,3,4-옥사디아조-5-일]벤젠, 4,7-디페닐-1,10-페난트롤린, 3-(4-비페닐릴)-4-페닐-5-tert-부틸페닐-1,2,4-트리아졸, 6,6'-비스[5-(비페닐-4-일)-1,3,4-옥사디아조-2-일]-2,2'-비피리딜, 2-페닐-9,10-디(나프탈렌-2-일)-안트라센, 2,7-비스[2-(2,2'-비피리딘-6-일)-1,3,4-옥사디아조-5-일]-9,9-디메틸플루오렌, 1,3-비스[2-(4-tert-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아조-5-일]벤젠, 2-(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린, 트리스(2,4,6-트리메틸-3-(피리딘-3-일)페닐)보란, 2,9-비스(나프탈렌-2-일)-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린, 1-메틸-2-(4-(나프탈렌-2-일)페닐)-1H-이미다조[4,5-f][1,10]페난트롤린.

[0595] **다이오드 실시예 7:**

[0596] 다이오드 실시예 1에 따르면, 적색광을 발광하는 제1 추가 발광층 및 녹색광을 발광하는 제2 추가 발광층이 사용된다.

[0597] 상기 제1 및 제2 추가 발광층은 청색광을 발광하고 발광체로서 물질(V2) 및 매트릭스 물질로서 3 및 (V1)을 포함하는 발광층과 함께 상기 애노드와 캐소드 사이에 배치되며, 상기 발광체 물질 이외에 각 경우에 매트릭스 물질, 예컨대 전하 캐리어 이송 물질 및/또는 전하 캐리어 차단체 물질을 포함한다. 이러한 OLED는 모든 발광층의 발광으로 구성된 발광을 보유했으며, 백색광을 포함한다.

[0598] **다이오드 실시예 8:**

[0599] 백색광을 발광하는 부품을 위해서, 각 경우에 실시예 1, 3, 4, 5, 6 중 하나에 따라 OLED를 사용하였다. 이러한 목적으로, 상이한 색을 발광하는 복수의 단색 OLED를 서로 적층하고, 서로 '전하 발생층'(CGL)로 연결하였다. 상기 CGL은 OLED의 전하 캐리어를 위 또는 아래에 배치된 OLED로 이송시킬 수 있다. 상기 화합물 3를 매트릭스 물질 및/또는 정공 차단체/여기자 차단체 물질로서 OLED에서 사용하였다.

[0600] **다이오드 실시예 9:**

[0601] 백색광을 발광하는 부품을 위해서, 각 경우에 실시예 1, 3, 4, 5, 6 중 하나에 따라 OLED를 사용하였다. 이러한 목적으로, 상이한 색을 발광하는 복수의 단색 OLED를 서로 적층하여 백색 발광 부품을 얻었다. 적절히 제어하여 또한 색조절가능한 성분을 얻을 수 있다.

[0602] **다이오드 실시예 10:**

[0603] 실시예 7에 따르면, 단지 하나의 발광층이 존재하며, 이는 적색 발광체, 청색 발광체 및 녹색 발광체, 및 매트릭스 물질로서 화합물 3를 포함한다. 이로써 하나의 층에 모든 발광체를 갖는 백색 발광 OLED를 산출하였다.

[0604] **다이오드 실시예 11:**

[0605] 다이오드 실시예 1~10와 같으나, Cu, Au, Pt, Ph, Os, Al, Mg, Ca, Ba, Ag, Yb, Fe, Co, Ni, Au, ITO, AZO로부터 선택된 물질을 상기 제1 및/또는 제2 전극층으로 선택하였다.

[0606] **다이오드 실시예 12:**

[0607] 상기 비교예와 같으나, 화합물 10을 9-페닐-3,6-비스(트리페닐실릴)카르바졸 V3 대신에 사용하였다.

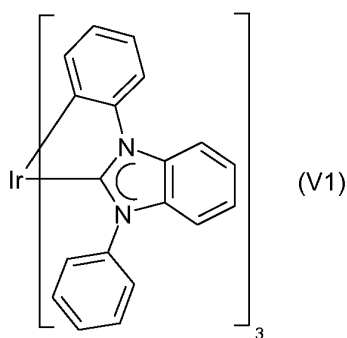
[0608] 다이오드 실시예 13:

[0609] 상기 비교예와 같으나, 화합물 17을 9-페닐-3,6-비스(트리페닐실릴)카르바졸 V3 대신에 사용하였다.

[0610] 다이오드 실시예 14:

[0611] 애노드로서 사용되는 상기 ITO 기재는 우선 LCD 제조용 상업용 세정제(Deconex<sup>®</sup> 20NS, 및 25ORGAN-ACID<sup>®</sup> 중성 화제)로 우선 세척한 후, 초음파조 중 아세톤/이소프로판올 혼합물에서 세척하였다. 임의의 가능한 유기 잔류물을 제거하기 위해서, 상기 기재를 오존 오븐 중 연속 오존 흐름에 추가 25 분 동안 노출시켰다. 이 처리는 또한 상기 ITO의 정공 주입 특성을 향상시킨다. 이후, Plexcore로부터의 정공 주입층 AJ20-1000을 용액으로부터 스핀 코팅으로 도포하였다(~40 nm).

[0612] 이후, 하기 명시된 유기 물질을 약  $10^{-8}$  mbar에서 대략 0.5~5 nm/mm의 속도로 상기 세정된 기재 상에 증착에 의해 도포시켰다. 정공 전도체 및 여기자 차단체, Ir(dpbc)<sub>3</sub> (V1) 를 두께가 45 nm인 기재에 도포하고, 이의 제1 35 nm를 MoO<sub>x</sub>로 도핑하여 전도도를 향상시켰다.

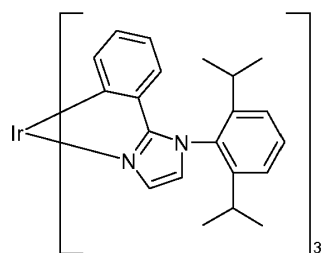


Ir(dpbc)<sub>3</sub>

[0613]

[0614] (제조에 대해서, 출원 WO 2005/019373에 Ir 착물(7) 참조)

[0615] 이후, 하기 화학식 (V5) 15 중량% 및 화합물 28의 85 중량%의 혼합물을 증착에 의해 두께 40 nm로 도포하며, 전자의 화합물은 발광체 물질로서 작용하고, 후자는 매트릭스 물질로서 작용하였다:

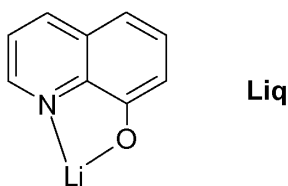


V5

[0616]

[0617] 이후, 물질 14를 여기자 및 정공 차단체로서 증착에 의해 5 nm로 도포하였다.

[0618] 이어서, 전자 이송체로서, 하기 Liq 및 BCP(2,9-디메틸-4,7-디페닐-1,10-페난트롤린)의 혼합물을 40 nm의 두께로 증착에 의해 도포하고, 0.1 nm 두께의 Liq 층 및 최종적으로 100 nm 두께의 Al 전극을 도포하였다. 모든 부품을 비활성 질소 분위기에서 유리 두께에 접착 결합시켰다.



[0619]

[0620] 상기 OLED를 특성화하기 위해서, 전계발광 스펙트럼을 다양한 전류 및 전압에서 기록하였다. 또한, 전류-전압

특성치는 발광된 광 산출량과 함께 특정하였다. 상기 광 산출량은 광도계에 의한 보정에 의해 광도계 파라미터로 전환시킬 수 있다.

CIE	300 cd/m <sup>2</sup> 전력 효율 Cd/A	300 cd/m <sup>2</sup> 에서의 QE (%)	300 cd/m <sup>2</sup> 에서의 전압 [V]
0.19;0.35	33.3	15.4	4.0

[0621]

[0622]

다이오드 실시예 15:

[0623]

실시예 14와 같으나, 사용된 매트릭스 물질은 화합물 28 대신에 화합물 26이고, 사용된 여기자 및 정공 차단체는 14 대신에 26이었다. V5의 도판트 농도는 15% 대신에 20%였다.

CIE	300 cd/m <sup>2</sup> 전력 효율 Cd/A	300 cd/m <sup>2</sup> 에서의 QE (%)	300 cd/m <sup>2</sup> 에서의 전압 [V]
0.20;0.35	33	15	5.9

[0624]

[0625]

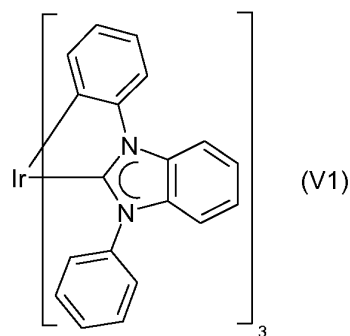
다이오드 실시예 16:

[0626]

애노드로서 사용되는 상기 ITO 기제는 우선 LCD 제조용 상업용 세정제(Deconex<sup>®</sup> 20NS, 및 250ORGAN-ACID<sup>®</sup> 중성 화제)로 우선 세척한 후, 초음파조 중 아세톤/이소프로판올 혼합물에서 세척하였다. 임의의 가능한 유기 잔류물을 제거하기 위해서, 상기 기제를 오존 오븐 중 연속 오존 흐름에 추가 25 분 동안 노출시켰다. 이 처리는 또한 상기 ITO의 정공 주입 특성을 향상시킨다. 이후, 정공 주입층 PEDOT-PSS(HC-Starck, ~40 nm)을 스핀 코팅으로 도포하였다.

[0627]

이후, 하기 명시된 유기 물질을 약 10<sup>-8</sup> mbar에서 대략 0.5~5 nm/mm의 속도로 상기 세정된 기제 상에 증착에 의해 도포시켰다. 정공 전도체 및 여기자 차단체, Ir(dpbc)<sub>3</sub> (V1) 를 두께가 55 nm인 기제에 도포하고, 이의 제1 35 nm를 MoO<sub>x</sub>로 도핑하여 전도도를 향상시켰다.



Ir(dpbc)<sub>3</sub>

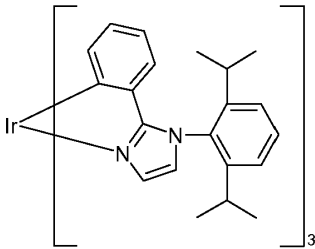
[0628]

[0629]

(제조에 대해서, 출원 WO 2005/019373에 Ir 착물(7) 참조)

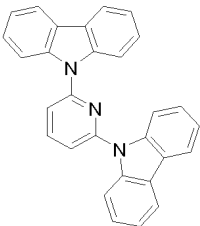
[0630]

이후, 하기 화학식 (V5) 15 중량% 및 화합물 28의 85 중량%의 혼합물을 증착에 의해 두께 40 nm로 도포하며, 전자의 화합물은 발광체 물질로서 작용하고, 후자는 매트릭스 물질로서 작용하였다:



V5

이후, 물질 V6를 여기자 및 정공 차단체로서 증착에 의해 5 nm로 도포하였다.



V6

이어서, 전자 이송체로서, 하기 트리스(8-퀴놀리놀라토)알루미늄( $\text{Alq}_3$ )을 50 nm의 두께로 증착에 의해 도포하고, 0.1 nm 두께의 LiF 층 및 최종적으로 100 nm 두께의 Al 전극을 도포하였다. 모든 부품을 비활성 질소 분위기에서 유리 두껍에 접착 결합시켰다.

상기 OLED를 특성화하기 위해서, 전계발광 스펙트럼을 다양한 전류 및 전압에서 기록하였다. 또한, 전류-전압 특성치는 발광된 광 산출량과 함께 특정하였다. 상기 광 산출량은 광도계에 의한 보정에 의해 광도계 파라미터로 전환시킬 수 있다.

CIE	300 cd/m <sup>2</sup> 에서의 전력 효율 (Cd/A)	300 cd/m <sup>2</sup> 에서의 QE (%)	300 cd/m <sup>2</sup> 에서의 전압 [V]
0.19;0.37	24.7	11.3	5.7