(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2024년08월19일
(11) 등록번호 10-2696532
(24) 등록일자 2024년08월14일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07C 13/567 (2006.01) *C07D 219/02* (2006.01)
C07D 307/91 (2006.01) *C07D 333/50* (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01) *H10K 50/00* (2023.01)
(52) CPC특허분류
C07C 13/567 (2013.01)
C07D 219/02 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2021-7043044(분할)
(22) 출원일자(국제) 2013년06월27일
심사청구일자 2021년12월29일
(85) 번역문제출일자 2021년12월29일
(65) 공개번호 10-2022-0003643
(43) 공개일자 2022년01월10일
(62) 원출원 특허 10-2021-7018641
원출원일자(국제) 2013년06월27일
심사청구일자 2021년06월16일
(86) 국제출원번호 PCT/EP2013/001889
(87) 국제공개번호 WO 2014/015935
국제공개일자 2014년01월30일
(30) 우선권주장
12005371.5 2012년07월23일
유럽특허청(EPO)(EP)
(56) 선행기술조사문헌
KR1020120052993 A*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

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

전체 청구항 수 : 총 18 항 심사관 : 김예훈

(54) 발명의 명칭 **플루오렌 및 이를 함유하는 전자 소자**

(57) 요 약

본 발명은 특정 플루오렌에 관한 것이며, 전자 소자에서 상기 화합물의 용도 및 이들 화합물을 하나 이상 포함하는 전자 소자에 관한 것이다. 또한, 본 발명은 상기 화합물의 제조 방법 및 상기 화합물을 하나 이상 포함하는 제형 및 조성물에 관한 것이다.

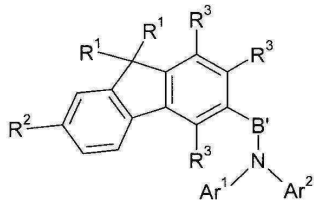
(52) CPC특허분류
C07D 307/91 (2013.01)
C07D 333/50 (2013.01)
C09K 11/06 (2022.01)
H10K 50/00 (2023.02)
(72) 발명자
파르함 아미르 호싸인
독일 65929 프랑크푸르트 암 마인 프란츠-헨레-슈트라쎄 4
뷔징 아르네
독일 65929 프랑크푸르트 암 마인 그라스뮈켄벡 26
포게스 프랑크
독일 67098 바트 뒤르크하임 바이트플라츠 2

명 세 서

청구범위

청구항 1

일반식 (4) 의 화합물:



화학식 (4)

[식 중, 사용되는 기호 및 지수에는 하기가 적용된다:

R^1 은 각 경우, 동일하게 또는 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, NO_2, $P(=O)(R^4)_2$, $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, 탄소수 1 내지 20의 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기, 또는 탄소수 3 내지 20의 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기, 또는 탄소수 2 내지 20의 알케닐 또는 알키닐 기 (이때 상기 언급된 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 각각 치환될 수 있고 이때 상기 언급된 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, C=O, C=S, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, $P(=O)(R^4)$, -O-, -S-, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수 있고, 이때 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수 있음), 또는 방향족 고리원자수 6 내지 30의 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 방향족 고리원자수 5 내지 60 의 아릴옥시 기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 방향족 고리원자수 5 내지 60의 아르알킬 기 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고, 이때 2개의 라디칼 R^1 은 서로 연결될 수 있고 고리를 형성할 수 있어, 플루오렌의 위치 9 에서 스피로 화합물이 형성되며, 이때 스피로바이플루오렌이 제외되고;

R^2 은 H, D, F, $N(R^4)_2$, 탄소수 1 내지 20의 직쇄 알킬기, 또는 탄소수 3 내지 20의 분지형 또는 시클릭 알킬기(이때 상기 언급된 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 각각 치환될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 에 의해 대체될 수 있음), 또는 방향족 고리원자수 6 내지 30의 방향족 또는 헤테로-방향족 고리계 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고;

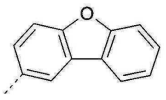
R^3 은 각 경우, 동일하게 또는 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, NO_2, $P(=O)(R^4)_2$, $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, $N(R^4)_2$, 탄소수 1 내지 20의 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기, 또는 탄소수 3 내지 20의 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기, 또는 탄소수 2 내지 20의 알케닐 또는 알키닐 기 (이때 상기 언급된 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 각각 치환될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, C=O, C=S, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, $P(=O)(R^4)$, -O-, -S-, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수 있음), 또는 방향족 고리원자수 6 내지 30의 방향족 또는 헤테로-방향족 고리계 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 방향족 고리원자수 5 내지 60의 아릴옥시 기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 방향족 고리원자수 5 내지 60의 아르알킬 기 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고, 이때 2개 이상의 라디칼 R^3 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고;

R^4 는 각 경우, 동일하게 또는 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^5$, CN, $Si(R^5)_3$, NO_2, $P(=O)(R^5)_2$, $S(=O)R^5$, $S(=O)_2R^5$, $N(R^5)_2$, 탄소수 1 내지 20의 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기, 또는 탄소수 3 내지 20의 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기, 또는 탄소수 2 내지 20의 알케닐 또는 알키닐 기 (이때 상기 언급된 기는 각각 하나 이상의 라디칼 R^5 에 의해 치환될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^5C=CR^5-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^5)_2$, C=O, C=S, $C=NR^5$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^5-$, $P(=O)(R^5)$, -O-, -S-, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수 있고, 이때 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수 있음), 또는 방향족 고리원자수 5 내지 30의 방향족 또는 헤테로-방향족 고리계 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^5 에 의해 치환될 수 있음), 또는 방향족 고리원자수 5 내지 30의 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^5 에 의해 치환될 수 있음) 이고;

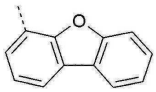
R^5 는 H, D, F, 탄소수 1 내지 20의 지방족 탄화수소 라디칼, 또는 탄소수 5 내지 30의 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이때 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 에 의해 대체될 수 있음) 로 구성된 군에서 선택되고, 이때 2개 이상의 인접 치환기 R^5 는 서로 함께 모노- 또는 폴리시클릭 지방족 고리계를 형성할 수 있고;

B' 는 단일 결합, 또는 페닐렌, 바이페닐렌, 테르페닐렌, 나프틸렌, 디벤조푸라닐렌 또는 디벤조티오페닐렌기 (이의 각각은 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고;

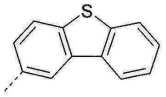
Ar^1 는 하기 화학식 (76) 내지 (93) 의 기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^6 에 의해 치환될 수 있음)로부터 선택되고



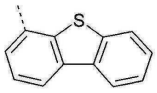
화학식 (76)



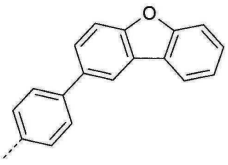
화학식 (77)



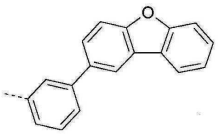
화학식 (78)



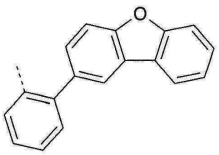
화학식 (79)



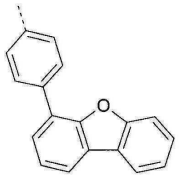
화학식 (80)



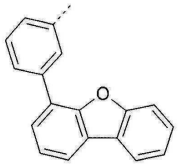
화학식 (81)



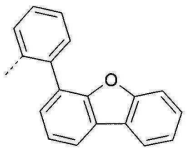
화학식 (82)



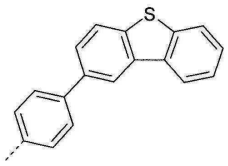
화학식 (83)



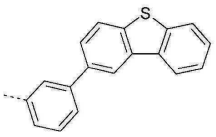
화학식 (84)



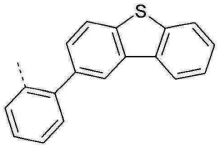
화학식 (85)



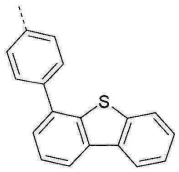
화학식 (86)



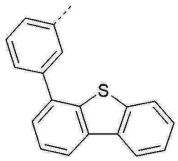
화학식 (87)



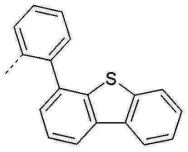
화학식 (88)



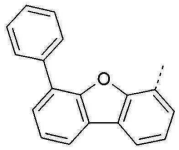
화학식 (89)



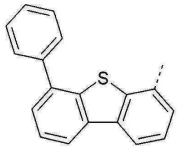
화학식 (90)



화학식 (91)



화학식 (92)



화학식 (93) ;

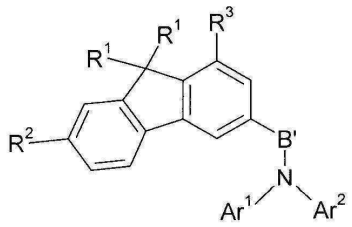
Ar^2 는 방향족 고리원자수 10 내지 60의 방향족 또는 헤테로방향족 라디칼 (이는 서로 동일하거나 상이한 하나 이상의 라디칼 R^6 에 의해 치환될 수 있음) 이고, 이때 Ar^2 는 적어도 2개 이상의 방향족 또는 헤테로방향족 고리를 함유하고;

R^6 은 각 경우, 동일하게 또는 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^5$, CN, $Si(R^5)_3$, NO_2, $P(=O)(R^5)_2$, $S(=O)R^5$, $S(=O)_2R^5$, 탄소수 1 내지 20의 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기, 또는 탄소수 3 내지 20의 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기, 또는 탄소수 2 내지 20의 알케닐 또는 알키닐 기 (이때 상기 언급된 기는 하나 이상의 라디칼 R^5 에 의해 각각 치환될 수 있고 이때 상기 언급된 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^5C=CR^5-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^5)_2$, C=O, C=S, $C=NR^5$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^5-$, $P(=O)(R^5)$, -O-, -S-, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수 있고, 이때 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수 있음), 또는 방향족 고리원자수 6 내지 30의 방향족 고리계 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^5 에 의해 치환될 수 있음) 임],

단, 화학식 (4) 의 화합물은 카르바졸 또는 추가의 플루오렌 또는 10 개 초과의 고리 원자를 갖는 추가의 축합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 함유하지 않음.

청구항 2

제 1 항에 있어서, 일반식 (7) 를 갖는 것을 특징으로 하는 화합물:

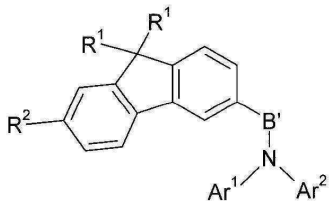


화학식 (7)

[식 중, 사용된 기호에는 제 1 항의 정의가 적용됨].

청구항 3

제 1 항에 있어서, 일반식 (10) 를 갖는 것을 특징으로 하는 화합물:

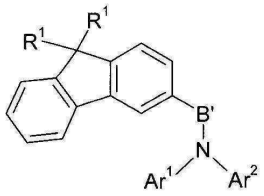


화학식 (10)

[식 중, 사용된 기호에는 제 1 항의 정의가 적용됨].

청구항 4

제 1 항에 있어서, 일반식 (13) 를 갖는 것을 특징으로 하는 화합물:



화학식 (13)

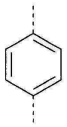
[식 중, 사용된 기호에는 제 1 항의 정의가 적용됨].

청구항 5

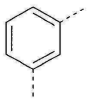
제 1 항에 있어서, B' 이 o-페닐렌, m-페닐렌 또는 p-페닐렌 기, 1,4-나프틸렌, 2,4-나프틸렌, 1,5-나프틸렌 또는 2,5-나프틸렌 기, 3,7-디벤조푸라닐렌기 또는 3,7-디벤조티오페닐렌기이고, 이때 상기 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있고, 이는 각 경우 동일하거나 상이할 수 있는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 6

제 1 항에 있어서, B' 이 하기 화학식 (15) 내지 (36) 의 기로부터 선택되며, 이때 이들 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있고, 이는 서로 독립적인 것을 특징으로 하는 화합물:



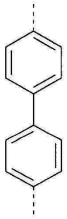
화학식 (15)



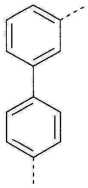
화학식 (16)



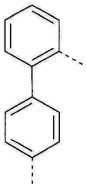
화학식 (17)



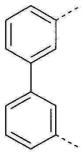
화학식 (18)



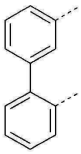
화학식 (19)



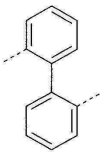
화학식 (20)



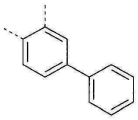
화학식 (21)



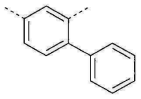
화학식 (22)



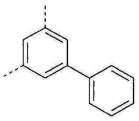
화학식 (23)



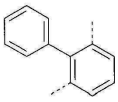
화학식 (24)



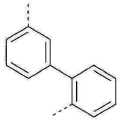
화학식 (25)



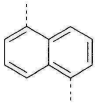
화학식 (26)



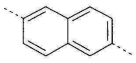
화학식 (27)



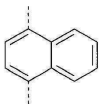
화학식 (28)



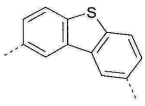
화학식 (29)



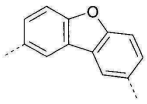
화학식 (30)



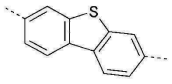
화학식 (31)



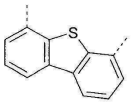
화학식 (32)



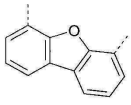
화학식 (33)



화학식 (34)



화학식 (35)



화학식 (36)

청구항 7

제 1 항에 있어서, 2개의 R^1 이 동일한 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 8

제 1 항에 있어서, 모노아민 화합물인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 9

이탈기를 함유하는 플루오렌 유도체와 Ar^2-NH-Ar^1 의 반응에 의한 1-단계 부흐발트 (Buchwald) 커플링에 의한, 제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 따른 화합물의 제조 방법.

청구항 10

이탈기를 함유하는 플루오렌 유도체와 (1) Ar^1-NH_2 및 (2) Ar^2-Y(여기서 Y 는 이탈기)의 단계적 반응에 의한 2-단계 부흐발트 커플링에 의한, 제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 따른 화합물의 제조 방법.

청구항 11

제 10 항에 있어서, Y 가 할로겐인, 방법.

청구항 12

화합물이 벤조크로멘-6-온으로부터 제조되는 것을 특징으로 하는, 제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 따른 화합물의 제조 방법으로서, 하기 단계를 포함하는 제조 방법:

a) 벤조크로멘-6-온 상의 유기금속 화합물의 첨가 단계, 및 이어서

b) 4-히드록시플루오렌 유도체를 생성하기 위한 산-촉매작용의 환화 단계, 및 이어서

c) 플루오렌의 위치 4 에서의 히드록실 기의 이탈기로의 전환 단계, 및 이어서

d) 플루오렌의 목적 생성물로의 전환 단계.

청구항 13

중합체, 올리고머 또는 덴드리머로의 결합(들)이 R^1 내지 R^6 에 의해 치환되는 화학식 (4) 에서 임의의 원하는 위치에서 위치될 수 있는, 제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 따른 화합물을 하나 이상 함유하는 올리고머, 중합체 또는 덴드리머.

청구항 14

하기 (a) 및 (b) 중 어느 하나 및 하나 이상의 유기 관능성 재료를 포함하는 조성물로서, 여기서 유기 관능성 재료는 형광 이미터, 인광 이미터, 호스트 재료, 매트릭스 재료, 전자-수송 재료, 전자-주입 재료, 정공-전도체 재료, 정공-주입 재료, 전자-차단 재료 및 정공-차단 재료로 구성된 군에서 선택되는 것인 조성물:

(a) 제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 따른 화합물,

(b) 중합체, 올리고머 또는 덴드리머로의 결합(들)이 R^1 내지 R^6 에 의해 치환되는 화학식 (4) 에서 임의의 원하는 위치에서 위치될 수 있는, 상기 화합물을 함유하는 중합체, 올리고머 또는 덴드리머.

청구항 15

하기 (a) 내지 (c) 중 어느 하나 및 하나 이상의 용매를 포함하는 제형:

(a) 제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 따른 화합물,

(b) 중합체, 올리고머 또는 덴드리머로의 결합(들)이 R^1 내지 R^6 에 의해 치환되는 화학식 (4) 에서 임의의 원하는 위치에서 위치될 수 있는, 상기 화합물을 함유하는 중합체, 올리고머 또는 덴드리머,

(c) 상기 화합물, 중합체, 올리고머 및 덴드리머 중 어느 하나 및 하나 이상의 유기 관능성 재료를 포함하는 조성물로서, 여기서 유기 관능성 재료는 형광 이미터, 인광 이미터, 호스트 재료, 매트릭스 재료, 전자-수송 재료, 전자-주입 재료, 정공-전도체 재료, 정공-주입 재료, 전자-차단 재료 및 정공-차단 재료로 구성된 군에서 선택되는 것인 조성물.

청구항 16

하기 (a) 내지 (c) 중 어느 하나를 포함하는 전자 소자:

(a) 제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 따른 화합물,

(b) 중합체, 올리고머 또는 덴드리머로의 결합(들)이 R^1 내지 R^6 에 의해 치환되는 화학식 (4) 에서 임의의 원하는 위치에서 위치될 수 있는, 상기 화합물을 함유하는 중합체, 올리고머 또는 덴드리머,

(c) 상기 화합물, 중합체, 올리고머 및 덴드리머 중 어느 하나 및 하나 이상의 유기 관능성 재료를 포함하는 조성물로서, 여기서 유기 관능성 재료는 형광 이미터, 인광 이미터, 호스트 재료, 매트릭스 재료, 전자-수송 재료, 전자-주입 재료, 정공-전도체 재료, 정공-주입 재료, 전자-차단 재료 및 정공-차단 재료로 구성된 군에서 선택되는 것인 조성물.

청구항 17

제 16 항에 있어서, 유기 집적 회로 (O-IC), 유기 전계효과 트랜지스터 (O-FET), 유기 박막 트랜지스터(O-TFT), 유기 발광 트랜지스터 (O-LET), 유기 태양 전지 (O-SC), 유기 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 필드 켄치 소자 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드(O-레이저) 및 유기 전계발광 소자 (OLED) 에서 선택되는 것을 특징으로 하는 전자 소자.

청구항 18

제 16 항에 있어서, 상기 화합물, 또는 상기 중합체, 올리고머 또는 덴드리머, 또는 상기 조성물이 하기 기능 중 하나 이상:

- 정공-수송 또는 정공-주입층에서의 정공-수송 재료로서의 기능,
- 방출 층에서의 매트릭스 재료로서의 기능,
- 전자-차단 재료로서의 기능,
- 여기자-차단 재료로서의 기능,

으로 사용되거나, 정공-수송 또는 정공-주입 층에서의 정공-수송 재료로서 사용되는 것을 특징으로 하는, 유기 전계발광 소자의 군에서 선택되거나, 유기 발광 다이오드 (OLED) 인 전자 소자.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본 발명은 신규한 유기 화합물, 전자 소자에서 상기 화합물의 용도, 및 하나 이상의 상기 화합물을 포함하는 전자 소자에 관한 것이다. 또한, 본 발명은 상기 화합물의 제조 방법 및 하나 이상의 화합물을 포함하는 조성물 및 제형물에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] 전자 소자에 사용되기 위한 기능적 화합물의 개발은 현재 집중적으로 연구되고 있는 주제이다. 특히, 여기서의 목적은, 예를 들어 전력 효율, 수명 또는 발광 색 좌표와 같은 전자 소자의 개선된 특성이 하나 이상의 관련 포인트에서 달성될 수 있는 화합물을 개발하는 것이다.

[0003] 본 발명에 따라, 용어 전자 소자는 그 중에서도 유기 집적 회로 (OIC), 유기 전계-효과 트랜지스터 (OFET), 유기 박막 트랜지스터 (OTFT), 유기 발광 트랜지스터 (OLET), 유기 태양 전지 (OSC), 유기 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 전계-켄치 소자 (OFQD), 유기 발광 전기화학 전지 (OLEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 유기 전계발광 소자 (OLED) 를 의미한다.

[0004] OLED 라 불리는 마지막에 언급된 전자 소자에서 사용되기 위한 화합물의 제공에 특히 관심을 둔다. OLED 의 일반적 구조 및 기능적 원리는 당업자에 공지되어 있고, 특히 US 4539507, US 5151629, EP 0676461 및 WO 1998/27136 에 기재되어 있다.

[0005] 특히, 광대한 상업적 용도 측면에서, 예를 들어 디스플레이 소자에서 또는 광원으로서 OLED 의 성능 데이터에 대한 추가의 개선이 여전히 요구된다. 이와 관련하여, 특히 중요한 것은 OLED 의 수명, 효율 및 작동 전압 및 달성되는 색채 값이다. 특히, 청색-방사 OLED 의 경우에는, 소자의 수명에 대한 개선점에 있어서 잠재성을 갖는다. 또한, 전자 소자에서 기능적 물질로서 사용되도록 화합물이 높은 열 안정성 및 높은 유리-전이 온도를 갖고 분해 없이 승화가능한 것이 바람직하다.

[0006] 이와 관련하여, 특히 대안적인 정공-수송 물질에 대한 필요성이 존재한다. 선행기술에 따른 정공-수송 물질에서, 전압은 일반적으로 정공-수송층의 층 두께에 따라 증가한다. 실제로, 정공-수송층의 보다 두꺼운 층 두께가 흔히 요망될 것이지만, 이는 때로는 더 높은 작동 전압 및 더 불량한 성능 데이터를 유도한다. 이와 관련하여, 보다 두꺼운 정공-수송층이 작동 전압의 단지 약간의 증가로 달성될 수 있도록, 높은 전하-운반 이동성을 갖는 신규한 정공-수송 물질이 요구되고 있다.

[0007] 종래 기술은 전자 소자 및 전계발광 소자에서 전하-수송 재료로서 다양한 플루오렌의 용도를 기재하고 있다.

[0008] WO 2011/055493 은 위치 3 에서 플루오렌에 의해 다치환되는 2차 아민을 개시하고 있다.

[0009] JP 2008-34701 및 WO 2007/072952 는 아민 기에 의해 위치 4 에서 치환되는 플루오렌을 개시하고 있으며, 여기서 아민 기 그 자체는 다시 다수의 플루오렌을 함유한다.

[0010] WO 2010/110553 은 위치 2, 3 또는 4 에서 아민 기에 의해 치환되는 플루오렌을 개시하고 있으며, 이때 아민 기는 카르바졸 기를 함유한다.

[0011] JP 05303221 위치 2 또는 4 에서 아민 기에 의해 치환될 수 있는 플루오렌을 개시하고 있다. 플루오렌의 위치 4 에서 아민 기를 함유하는 화합물은 페닐 라디칼을 함유한다. 화합물은 광수용체로서 사용된다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0012] 이미 공지된 화합물에도 불구하고, OLED 에 사용되기 위한 신규한 정공-수송 및 정공-주입 재료가 여전히 요망된다. 특히, 성능 데이터에서의 매우 바람직한 개선 및 OLED 의 특성이 달성될 수 있는 재료가 요망된다.

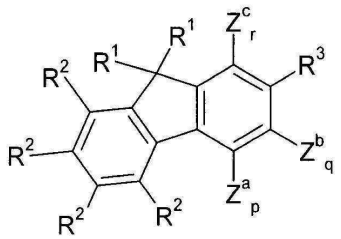
[0013] 마찬가지로, OLED 에서 사용되기 위한 신규한 매트릭스 재료 및 기타 전자 소자에서 사용되기 위한 신규한 매트릭스 재료가 요구되고 있다. 특히, 바람직하게는 전자 소자의 양호한 효율, 장기간의 수명 및 낮은 작동 전압을 생성시키는, 인광 도판트용 매트릭스 재료에 대한 필요성 및 혼합 매트릭스 시스템에 대한 매트릭스 재료에 대한 필요성이 존재한다.

과제의 해결 수단

[0014] 따라서 본 발명은 전계발광 소자, 예컨대, 예를 들어, 형광 또는 인광 OLED 에서 사용되는데 적합한 화합물 및 전계발광 소자를 제공하는 목적을 기반으로 하고 있으며, 이는 특히, 정공-수송 재료로서 및/또는 정공-주입 재료로서 (정공-수송 또는 여기-차단 층에서) 또는 매트릭스 재료로서 (방출 층에서) 사용될 수 있다.

[0015] 본 발명의 일부로서, 놀랍게도, 하기 나타내는 화학식 (1) 의 화합물이 전자 소자, 특히 전계발광 소자에서 상기 언급된 용도에 매우 적합한 것으로 밝혀졌다.

[0016] 따라서, 본 발명은 일반식 (1) 의 화합물에 관한 것이다:



[0017] 화학식 (1)

[0018] 식 중, 사용되는 기호 및 지수에는 하기가 적용된다:

[0019] R^1 은 각 경우, 동일하게 또는 상이하게, 바람직하게는 동일하게, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, NO_2, $P(=O)(R^4)_2$, $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬- 기 (탄소수 3 내지 20) 또는 알케닐 또는 알키닐 기 (탄소수 2 내지 20) (이때 상기 언급된 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 각각 치환될 수 있고 이때 상기 언급된 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, C=O, C=S, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, $P(=O)(R^4)$, -O-, -S-, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수 있고, 이때 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수 있음), 또는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30), (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 아릴옥시 기 (방향족 고리원자수 5 내지 60), (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 아르알킬 기 (방향족 고리원자수 5 내지 60) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있고 이때 2개의 라디칼 R^1 은 서로 연결될 수 있고 고리를 형성할 수 있어, 플루오렌의 위치 9 에서 스피로 화합물이 형성되며, 이때 스피로바이플루오렌이 제외됨) 이고;

[0020] R^2, R^3 은 각 경우, 동일하게 또는 상이하게, 바람직하게는 동일하게, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, NO_2, $P(=O)(R^4)_2$, $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, $N(R^4)_2$, 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬- 기 (탄소수 3 내지 20) 또는 알케닐 또는 알키닐 기 (탄소수 2 내지 20) (이때 상기 언급된 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 각각 치환될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, C=O, C=S, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, $P(=O)(R^4)$, -O-, -S-, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수 있음), 또는 방향족 또는 헤테로-방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 아릴옥시 기 (방향족 고리원자수 5 내지 60) (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 아르알킬 기 (방향족 고리원자수 5 내지 60) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있고, 이때 2개 이상의 라디칼 R^2 또는 2개 이상의 라디칼 R^3 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있음) 이고;

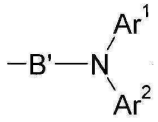
[0021] R^4 는 각 경우, 동일하게 또는 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^5$, CN, $Si(R^5)_3$, NO_2, $P(=O)(R^5)_2$, $S(=O)R^5$, $S(=O)_2R^5$, $N(R^5)_2$, 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬- 기 (탄소수 3 내지 20) 또는 알케닐 또는 알키닐 기 (탄소수 2 내지 20) (이때 상기 언급된 기는 각각 하나 이상의 라디칼 R^5 에 의해 치환될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^5C=CR^5-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^5)_2$, C=O, C=S, $C=NR^5$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^5-$, $P(=O)(R^5)$, -O-, -S-, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수 있고, 이때 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수 있음), 또는 방향족 또는 헤테로-방향족 고리계 (방향족 고리원자수 5 내지 30) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^5 에 의해 치환될 수 있음), 또는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기 (방향족 고리원자수 5 내지 30) (이는 하나 이상의 라디칼 R^5 에 의해 치환될 수 있음) 이고;

[0022] R^5 는 H, D, F, 지방족 탄화수소 라디칼 (탄소수 1 내지 20) 또는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (탄소수 5 내지 30) (이때 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 에 의해 대체될 수 있음) 로 구성된 군에서 선택되고, 이때 2개 이상의 인접 치환기 R^5 는 서로 함께 모노- 또는 폴리시클릭 지방족 고리계를 형성할 수 있고;

[0023] p, q, r 는 0 또는 1 이고, 이때 $p + q + r = 1$, 바람직하게는 $p = 1$ 또는 $r = 1$ 및 매우 바람직하게는 $p = 1$ 이고;

[0024] Z^a_0, Z^b_0, Z^c_0 는, 각 경우 동일하게 또는 상이하게, R^3 과 동일하고;

[0025] Z^a_1, Z^b_1, Z^c_1 은 하기의 것과 동일하고:

[0026] 

[0027] B' 는 단일 결합, 아릴 기 (고리 원자수 6 내지 30) 또는 모노- 또는 바이시클릭 헤테로아릴 기 (고리원자수 5 내지 30) (이의 각각은 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고,

[0028] 바람직하게는 단일 결합 또는 페닐렌, 바이페닐렌, 테르페닐렌, 나프틸렌, 피리디닐렌, 피리미디닐렌, 피라지닐렌, 피리다지닐렌, 트리아지닐렌, 디벤조-푸라닐렌또는 디벤조-티오페닐렌- 기 (이의 각각은 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고,

[0029] 매우 바람직하게는 단일 결합 또는 페닐렌, 바이페닐렌, 테르페닐렌, 나프틸렌, 디벤조-푸라닐렌또는 디벤조-티오페닐렌 기 (이의 각각은 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고,

[0030] B' 는 매우 특히 바람직하게는 단일 결합 또는 페닐렌 기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고,

[0031] B' 는 특히 바람직하게는 단일 결합이고,

[0032] 이때, B' 가 단일 결합인 경우, 질소 원자는 플루오렌에 직접 결합되고;

[0033] Ar^1, Ar^2 는 각 경우, 동일하게 또는 상이하게, 방향족 또는 헤테로방향족 라디칼 (방향족 고리원자수 10 내지 60) (이는 서로 동일하거나 상이한 하나 이상의 라디칼 R^6 에 의해 치환될 수 있음) 이고, 이때 2개의 기 Ar^1 또는 Ar^2 는 각각 적어도 2개 이상의 방향족 또는 헤테로방향족 고리를 함유하고,

[0034] 이때 Ar^1 또는 Ar^2 에서 2개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 축합될 수 있으나, 바람직하게는 축합되지 않은 형태로 존재하며,

[0035] 이때 Ar^1 에서 2개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 2가 기 -O-, -S- 또는 $-Si(R^6)_2-$ 에 의해 가교될 수 있고,

[0036] 이때 -O- 또는 $-Si(R^6)_2-$ 를 통한 가교가 바람직하거나, 또는 Ar^2 에서 2개의 방향족 또는 헤테로-방향족 고리는 2가 기 -O-, -S- 또는 $-Si(R^6)_2-$ 에 의해 가교될 수 있고,

[0037] 이때 -O- 또는 $-Si(R^6)_2-$ 를 통한 가교가 바람직하며, 이때 가교되지 않은 고리가 매우 바람직하며,

[0038] 이때 Ar^1 로부터의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 2가 기 -O-, -S-, $-Si(R^6)_2-$, $-NR^6-$ 또는 $-C(R^6)_2-$ 에 의해 Ar^2 로부터 방향족 또는 헤테로방향족 고리에 가교될 수 있고, 이때 가교되지 않은 Ar^1 및 Ar^2 기가 바람직하고;

[0039] R^6 은 각 경우, 동일하게 또는 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^5$, CN, $Si(R^5)_3$, NO_2, $P(=O)(R^5)_2$, $S(=O)R^5$, $S(=O)_2R^5$, 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬- 기 (탄소수 3 내지 20) 또는 알케닐 또는 알키닐 기 (탄소수 2 내지 20) (이때 상기 언급된 기는 하나 이상의 라디칼 R^5 에 의해 각각 치환될 수 있고 이때 상기 언급된 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^5C=CR^5-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^5)_2$, C=O, C=S, $C=NR^5$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^5-$, $P(=O)(R^5)$, -O-, -S-, SO 또는 SO_2 에 의

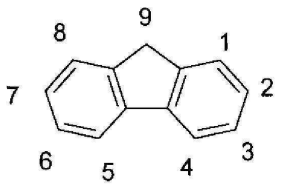
해 대체될 수 있고, 이때 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2, 에 의해 대체될 수 있음), 또는 방향족 또는 헤테로-방향족 고리계 (방향족 고리원자수 5 내지 30) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^5 에 의해 치환될 수 있음), 또는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기 (방향족 고리원자수 5 내지 30) (이는 하나 이상의 라디칼 R^5 에 의해 치환될 수 있음) 이고;

[0040] 단, 화학식 (1) 의 화합물에서 Z^a_1, Z^b_1 및 Z^c_1 은 플루오렌 또는 카르바졸 기를 함유하지 않고;

[0041] 단, 화학식 (1) 의 화합물은 10 개 초과의 고리 원자를 갖는 축합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 함유하지 않고, 이때 화학식 (1) 의 화합물이 축합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 함유하지 않는 것이 바람직하다.

[0042] 본 발명의 의미 내에서 화학식 (1) 의 화합물이 추가의 플루오렌 또는 카르바졸을 함유하지 않는 것이 또한 바람직하다.

[0043] 플루오렌에 대한 넘버링은 하기와 같이 정의된다:

[0044] 

.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0045] 본 발명의 의미에서, 아릴기는 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 함유하고; 본 발명의 의미에서, 헤테로아릴기는 이론상 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 함유하며, 이들 중 하나 이상은 헤테로원자이다. 바람직하게는, 헤테로원자는 N, O 및 S 로부터 선택된다. 이는 기본 정의를 나타낸다. 예를 들어, 기존 방향족 고리 원자 또는 헤테로원자의 수에 관하여, 본 발명의 설명에서 기타 바람직한 것들이 지시되는 경우, 이들이 적용된다.

[0046] 여기서 아릴기 또는 헤테로아릴기는 단순 방향족 고리, 즉 벤젠, 또는 단순 헤테로방향족 고리, 예를 들어 피리딘, 피리미딘, 티오펜, 또는 축합 (융합) 방향족 또는 헤테로방향족 폴리사이클, 예를 들어 나프탈렌, 페난트렌, 퀴놀린 또는 카르바졸을 의미한다. 본 발명의 의미에서, 축합 (융합) 방향족 또는 헤테로방향족 폴리사이클은 서로 축합된 둘 이상의 단순 방향족 또는 헤테로방향족 고리로 이루어진다.

[0047] 각 경우에 상기 언급된 라디칼에 의해 치환될 수 있고 임의의 목적하는 위치를 통해 방향족 또는 헤테로방향족 고리계에 연결될 수 있는 아릴 또는 헤테로아릴기는 특히 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 피렌, 디히드로피렌, 크리센, 페릴렌, 플루오란텐, 벤즈안트라센, 벤조페난트렌, 테트라센, 펜타센, 벤조피렌, 푸란, 벤조푸란, 이소벤조푸란, 디벤조푸란, 티오펜, 벤조티오펜, 이소벤조티오펜, 디벤조티오펜, 피롤, 인돌, 이소인돌, 카르바졸, 피리딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 아크리딘, 페난트리딘, 벤조-5,6-퀴놀린, 벤조-6,7-퀴놀린, 벤조-7,8-퀴놀린, 페노티아진, 페녹사진, 피라졸, 인다졸, 이미다졸, 벤지미다졸, 나프티미다졸, 페난트리미다졸, 피리디미다졸, 피라지니미다졸, 퀴녹살린이미다졸, 옥사졸, 벤족사졸, 나프톡사졸, 안트록사졸, 페난트록사졸, 이속사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴녹살린, 피라진, 페나진, 나프티리딘, 아자카르바졸, 벤조카르볼린, 페난트롤린, 1,2,3-트리아졸, 1,2,4-트리아졸, 벤조트리아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아졸, 1,2,5-옥사디아졸, 1,3,4-옥사디아졸, 1,2,3-티아디아졸, 1,2,4-티아디아졸, 1,2,5-티아디아졸, 1,3,4-티아디아졸, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 1,2,3-트리아진, 테트라졸, 1,2,4,5-테트라진, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,3,5-테트라진, 푸린, 프테리딘, 인돌리진 및 벤조티아디아졸로부터 유래된 기를 의미한다.

[0048] 본 발명의 정의에 따른 아릴옥시기는 산소 원자를 통해 결합된 상기 정의된 바와 같은 아릴기를 의미한다. 유사한 정의가 헤테로아릴옥시기에 적용된다.

[0049] 본 발명의 의미에서, 방향족 고리계는 고리계 내에 6 내지 60 개의 C 원자를 함유한다. 본 발명의 의미에서, 헤테로방향족 고리계는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 함유하고, 이들 중 하나 이상은 헤테로원자이다. 헤테로원자는 바람직하게는 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 본 발명의 의미에서, 방향족 또

는 헤테로방향족 고리계는 반드시 오직 아릴 또는 헤테로아릴기만을 함유하지는 않지만, 대신에 또한 복수의 아릴 또는 헤테로아릴기가 비-방향족 단위 (바람직하게는, H 외의 원자 10% 미만), 예를 들어 sp^3-하이브리드화 C, Si, N 또는 O 원자, sp^2-하이브리드화 C 또는 N 원자, 또는 sp-하이브리드화 C 원자에 의해 연결될 수 있는 계를 의미한다. 따라서, 예를 들어 9,9'-스피로바이플루오렌, 9,9'-디아릴플루오렌, 트리아릴아민, 디아릴에테르, 스틸벤 등과 같은 계는 또한 본 발명의 의미에서 방향족 고리계인 것으로 취해지는 것으로 의도되는데, 둘 이상의 아릴기가 예를 들어 선형 또는 시클릭 알킬, 알케닐 또는 알키닐기, 또는 실릴기에 의해 연결되는 계이기 때문이다. 또한, 예를 들어 바이페닐, 터페닐 또는 디페닐트리아진과 같은 2 개 이상의 아릴 또는 헤테로아릴기가 단일 결합을 통해 서로 연결되는 계는 또한 본 발명의 의미에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리계인 것으로 취해진다.

[0050] 각 경우에 또한 상기 정의된 라디칼에 의해 치환될 수 있고, 임의의 목적하는 위치를 통해 방향족 또는 헤테로방향족기에 연결될 수 있는, 5 - 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계는, 특히 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센, 페난트렌, 벤조페난트렌, 피렌, 크리센, 페릴렌, 플루오란텐, 나프타센, 펜타센, 벤조피렌, 바이페닐, 바이페닐렌, 터페닐, 터페닐렌, 쿼터페닐, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 디히드로페난트렌, 디히드로피렌, 테트라히드로피렌, 시스- 또는 트랜스-인데노플루오렌, 트룩센, 이소트룩센, 스피로트룩센, 스피로이소트룩센, 푸란, 벤조푸란, 이소벤조푸란, 디벤조푸란, 티오펜, 벤조티오펜, 이소벤조티오펜, 디벤조티오펜, 피롤, 인돌, 이소인돌, 카르바졸, 인돌로카르바졸, 인데노카르바졸, 피리딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 아크리딘, 페난트리딘, 벤조-5,6-퀴놀린, 벤조-6,7-퀴놀린, 벤조-7,8-퀴놀린, 페노티아진, 페녹사진, 피라졸, 인다졸, 이미다졸, 벤지미다졸, 나프티미다졸, 페난트리미다졸, 피리디미다졸, 피라지니미다졸, 퀴녹살린이미다졸, 옥사졸, 벤족사졸, 나프톡사졸, 안트록사졸, 페난트록사졸, 이속사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴녹살린, 1,5-디아자안트라센, 2,7-디아자피렌, 2,3-디아자피렌, 1,6-디아자피렌, 1,8-디아자피렌, 4,5-디아자피렌, 4,5,9,10-테트라아자페릴렌, 피라진, 페나진, 페녹사진, 페노티아진, 플루오루빈, 나프티리딘, 아자카르바졸, 벤조카르볼린, 페난트롤린, 1,2,3-트리아졸, 1,2,4-트리아졸, 벤조트리아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아졸, 1,2,5-옥사디아졸, 1,3,4-옥사디아졸, 1,2,3-티아디아졸, 1,2,4-티아디아졸, 1,2,5-티아디아졸, 1,3,4-티아디아졸, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 1,2,3-트리아진, 테트라졸, 1,2,4,5-테트라진, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,3,5-테트라진, 푸린, 프테리딘, 인돌리진 및 벤조티아디아졸 또는 이러한 기의 조합으로부터 유래한 기를 의미한다.

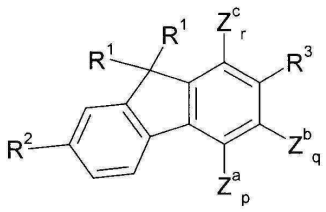
[0051] 본 발명의 목적을 위해, 탄소수 1 내지 40 의 직쇄 알킬기, 또는 탄소수 3 내지 40 의 분지형 또는 시클릭 알킬기, 또는 탄소수 2 내지 40 의 알케닐 또는 알키닐기 (여기서, 또한 개별적 H 원자 또는 CH_2 기는 라디칼의 정의 하에 상기 언급된 기에 의해 치환될 수 있음) 는 바람직하게는 라디칼 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, s-부틸, t-부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, s-펜틸, 시클로펜틸, 네오펜틸, n-헥실, 시클로헥실, 네오헥실, n-헵틸, 시클로헵틸, n-옥틸, 시클로옥틸, 2-에틸헥실, 트리플루오로메틸, 펜타플루오로에틸, 2,2,2-트리플루오로에틸, 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 시클로펜테닐, 헥세닐, 시클로헥세닐, 헵테닐, 시클로헵테닐, 옥테닐, 시클로옥테닐, 에티닐, 프로피닐, 부티닐, 펜티닐, 헥시닐 또는 옥티닐을 의미한다. 탄소수 1 내지 40 의 알콕시 또는 티오알킬기는 바람직하게는 메톡시, 트리플루오로메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, s-부톡시, t-부톡시, n-펜톡시, s-펜톡시, 2-메틸부톡시, n-헥속시, 시클로헥실옥시, n-헵톡시, 시클로헵틸옥시, n-옥틸옥시, 시클로옥틸옥시, 2-에틸헥실옥시, 펜타플루오로에톡시, 2,2,2-트리플루오로에톡시, 메틸티오, 에틸티오, n-프로필티오, i-프로필티오, n-부틸티오, i-부틸티오, s-부틸티오, t-부틸티오, n-펜틸티오, s-펜틸티오, n-헥실티오, 시클로헥실티오, n-헵틸티오, 시클로헵틸티오, n-옥틸티오, 시클로옥틸티오, 2-에틸헥실티오, 트리플루오로메틸티오, 펜타플루오로에틸티오, 2,2,2-트리플루오로에틸티오, 에테닐티오, 프로페닐티오, 부테닐티오, 펜테닐티오, 시클로펜테닐티오, 헥세닐티오, 시클로헥세닐티오, 헵테닐티오, 시클로헵테닐티오, 옥테닐티오, 시클로옥테닐티오, 에티닐티오, 프로피닐티오, 부티닐티오, 펜티닐티오, 헥시닐티오, 헵티닐티오 또는 옥티닐티오를 의미한다.

[0052] 화학식 (1) 의 화합물에서 B' 가 단일 결합인 것이 바람직하다.

[0053] 화학식 (1) 의 화합물에서 B' 가 화학식 (1) 의 화합물이 o-페닐렌, m-페닐렌 또는 p-페닐렌 기, 1,4-나프틸렌, 2,4-나프틸렌, 1,5-나프틸렌 또는 2,5-나프틸렌 기, 3,7-디벤조푸라닐렌기 또는 3,7-디벤조티오페닐렌 기인 것이 또한 바람직하며, 이때 B' 가 o-페닐렌, m-페닐렌 또는 p-페닐렌 기인 것이 매우 바람직하고, B' 가 p-페닐렌 기인 것이 매우 특히 바람직하고, 이때 상기 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있고, 이는 각

경우 동일하거나 상이할 수 있으며, 이때 치환되지 않는 것이 바람직하다.

[0054] 본 발명의 의미 내에서 바람직한 것은 일반식 (2) 의 화합물이다:



화학식 (2)

[0055]

[0056] 식 중, 상기 정의는 사용되는 기호 및 지수에 적용된다.

[0057] 일반식 (1) 또는 (2) 의 화합물이 또한 바람직하며, 이는 하기를 특징으로 한다: R^1 은 각 경우, 동일하게 또는 상이하게, 바람직하게는 동일하게, 직쇄 알킬 또는 알콕시 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시 기 (탄소수 3 내지 20) (이때 상기 언급된 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 각각 치환될 수 있음), 또는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 아릴옥시 기 (방향족 고리원자수 5 내지 60) (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 아르알킬 기 (방향족 고리원자수 5 내지 60) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고, 이때 2개의 라디칼 R^1 은 서로 연결될 수 있고 고리를 형성할 수 있어, 스피로 화합물이 플루오렌의 위치 9 에서 스피로 화합물을 형성하며, 이때 스피로바이플루오렌이 배제된다.

[0058] 일반식 (1) 또는 (2) 의 화합물이 또한 바람직하며, 이는 하기를 특징으로 한다: R^1 은 각 경우, 동일하게 또는 상이하게, 바람직하게는 동일하게, 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (탄소수 3 내지 20) (이때 상기 언급된 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 각각 치환될 수 있음), 또는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고, 이때 2개의 라디칼 R^1 은 서로 연결될 수 있고 고리를 형성할 수 있어, 플루오렌의 위치 9 에서 스피로 화합물을 형성하고, 이때 스피로바이플루오렌이 배제된다.

[0059] 일반식 (1) 또는 (2) 의 화합물이 또한 매우 특히 바람직하며, 이는 하기를 특징으로 한다: R^1 은 각 경우, 동일하게, 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (탄소수 3 내지 20) (이때 상기 언급된 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 각각 치환될 수 있음) 이고, 이때 R^1 이 메틸, 에틸, n-/i-프로필 또는 n-/i-/t-부틸 기인 것이 특히 바람직하다.

[0060] 최종적으로, 일반식 (1) 또는 (2) 의 화합물이 또한 매우 특히 바람직하며, 이는 하기를 특징으로 한다: R^1 은 각 경우 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고, 이때 고리계는 특히 바람직하게는 페닐, 바이페닐, 테르페닐 또는 피리딜 기로 구성된 군에서 선택된다.

[0061] 일반식 (1) 또는 (2) 의 화합물이 또한 바람직하며 이는 하기를 특징으로 한다: R^2 는 각 경우, 동일하게 또는 상이하게, 바람직하게는 동일하게, H, D, F, Cl, Br, I, $N(R^5)_2$, 직쇄 알킬 또는 알콕시 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시 기 (탄소수 3 내지 20) 또는 알케닐 또는 알키닐 기 (탄소수 2 내지 20) (이때 상기 언급된 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 각각 치환될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수 있음), 또는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 아릴옥시 기 (방향족 고리원자수 5 내지 60) (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 아르알킬 기 (방향족 고리원자수 5 내지 60) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 에서 선택되며,

이때 2개 이상의 라디칼 R^2 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있다.

[0062] 일반식 (1) 또는 (2) 의 화합물이 또한 바람직하며, 이는 하기를 특징으로 한다: R^2 는 각 경우, 동일하게 또는 상이하게, 바람직하게는 동일하게, H, D, F, Cl, Br, I, $N(R^5)_2$, 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (탄소수 3 내지 20) (이때 상기 언급된 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 각각 치환될 수 있고 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수 있음), 또는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 에서 선택된다.

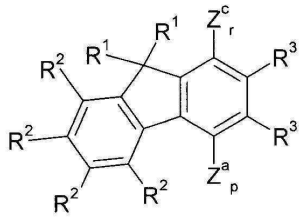
[0063] 매우 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 R^2 가 H 와 동일한 것을 특징으로 하는, 일반식 (1) 의 화합물에 관한 것이다.

[0064] 추가의 매우 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 R^2 가 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (탄소수 3 내지 20) 인 것을 특징으로 하는 일반식 (1) 의 화합물에 관한 것이다.

[0065] 추가의 매우 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 R^2 가 6 내지 30개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 나타내는 것을 특징으로 하는 일반식 (1) 의 화합물에 관한 것이다.

[0066] 일반식 (1) 또는 (2) 의 화합물이 또한 바람직하며 이는 하기를 특징으로 한다: R^3 은 각 경우, 동일하게 또는 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, $N(R^5)_2$, 직쇄 알킬 또는 알콕시 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시 기 (탄소수 3 내지 20) (이때 상기 언급된 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 각각 치환될 수 있고 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수 있음), 또는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 아릴옥시 기 (방향족 고리원자수 5 내지 60) (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 아르알킬 기 (방향족 고리원자수 5 내지 60) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 에서 선택되며, 이때 2개 이상의 라디칼 R^3 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있다.

[0067] 본 발명의 의미 내에서 바람직한 것은 일반식 (1a) 의 화합물이다:

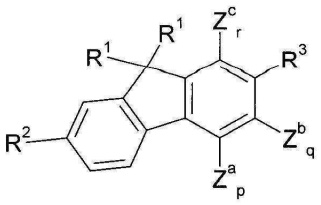


화학식 (1a)

[0068]

[0069] 식 중, 사용되는 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용되며 본원에서 기술된 바람직한 구현예가 적용된다.

[0070] 본 발명의 의미 내에서 바람직한 것은 일반식 (2a) 의 화합물이다:

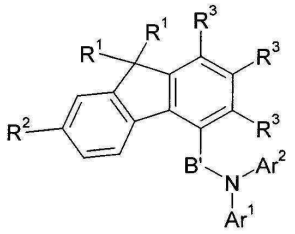


화학식 (2a)

[0071]

[0072] 식 중, 사용되는 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용되며 본원에서 기술된 바람직한 구현예가 적용된다.

[0073] 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (3) 의 화합물에 관한 것이다:

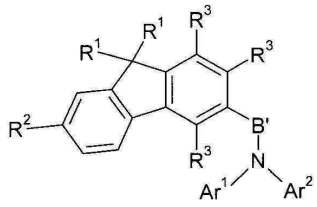


화학식 (3)

[0074]

[0075] 식 중, 사용되는 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용된다.

[0076] 바람직한 추가 구현예에서, 본 발명은 일반식 (4) 의 화합물에 관한 것이다:



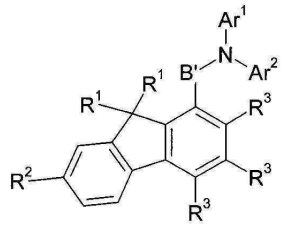
화학식 (4)

[0077]

[0078] 식 중, 사용되는 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용된다.

[0079] Ar^1 및 Ar^2 기를 함유하는 아민이 플루오렌의 3 위치에서 위치하는 경우, Ar^1 또는 Ar^2 기가 산소를 통한 가교가 없는 것이 특히 바람직한데, 왜냐하면 OLED 에서 이들 화합물의 사용이 특히 유리한 성능 데이터를 생성하기 때문이다.

[0080] 바람직한 추가 구현예에서, 본 발명은 일반식 (5) 의 화합물에 관한 것이다:

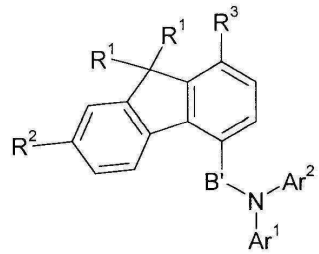


화학식 (5)

[0081]

[0082] 식 중, 사용되는 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용된다.

[0083] 매우 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (6) 의 화합물에 관한 것이다.

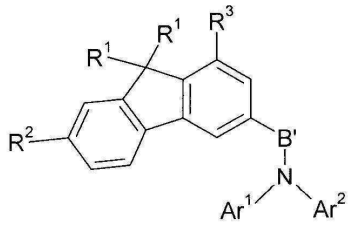


화학식 (6)

[0084]

[0085] 식 중, 사용되는 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용된다.

[0086] 또한 매우 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (7) 의 화합물에 관한 것이다:

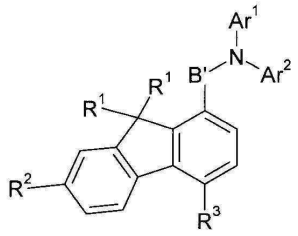


화학식 (7)

[0087]

[0088] 식 중, 사용되는 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용된다.

[0089] 또한 매우 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (8) 의 화합물에 관한 것이다:

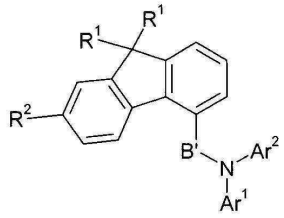


화학식 (8)

[0090]

[0091] 식 중, 사용되는 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용된다.

[0092] 매우 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (9) 의 화합물에 관한 것이다:

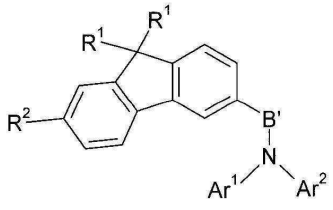


화학식 (9)

[0093]

[0094] 식 중, 사용되는 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용된다.

[0095] 또한 매우 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (10) 의 화합물에 관한 것이다:

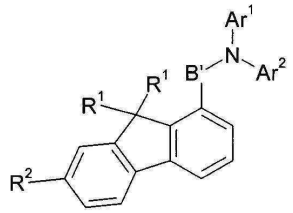


화학식 (10)

[0096]

[0097] 식 중, 사용되는 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용된다.

[0098] 또한 매우 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (11) 의 화합물에 관한 것이다:

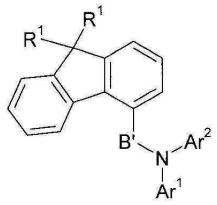


화학식 (11)

[0099]

[0100] 식 중, 사용되는 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용된다.

[0101] 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (12) 의 화합물에 관한 것이다:

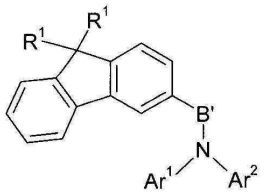


화학식 (12)

[0102]

[0103] 식 중, 사용되는 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용된다.

[0104] 또한 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (13) 의 화합물에 관한 것이다:

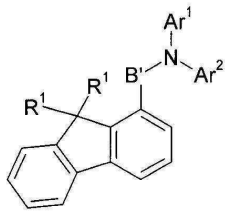


화학식 (13)

[0105]

[0106] 식 중, 사용되는 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용된다.

[0107] 또한 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (14) 의 화합물에 관한 것이다:

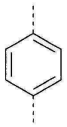


화학식 (14)

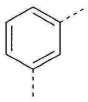
[0108]

[0109] 식 중, 사용되는 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용된다.

[0110] 바람직한 것은 또한 상기 나타낸 화학식 (1) 내지 (14) 의 화합물이며, 이때 B' 는 화학식 (15) 내지 (36) 의 기로부터 선택되며, 이때 이들 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있고, 이는 서로 독립적이며, 이때 R^4 는 상기 정의된 바와 같다.



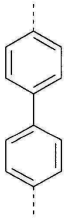
화학식 (15)



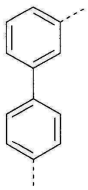
화학식 (16)



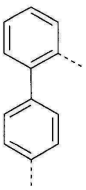
화학식 (17)



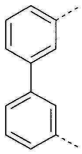
화학식 (18)



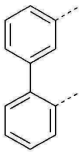
화학식 (19)



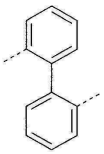
화학식 (20)



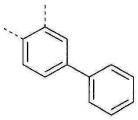
화학식 (21)



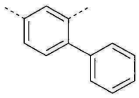
화학식 (22)



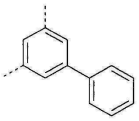
화학식 (23)



화학식 (24)

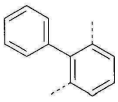


화학식 (25)

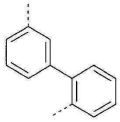


화학식 (26)

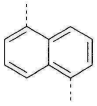
[0111]



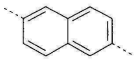
화학식 (27)



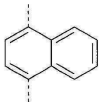
화학식 (28)



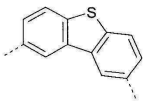
화학식 (29)



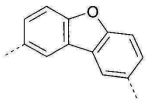
화학식 (30)



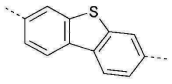
화학식 (31)



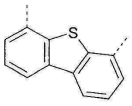
화학식 (32)



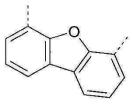
화학식 (33)



화학식 (34)



화학식 (35)



화학식 (36)

[0112]

[0113] 식 중, 파선은 연결 위치를 나타낸다.

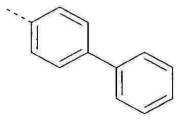
[0114] 바람직한 것은 상기 나타내는 화학식 (1) 내지 (14) 의 화합물이며, 이때 B' 는 화학식 (15) 내지 (36) 의 기에서 선택되며, 이때 이들 기는 치환되지 않는다.

[0115] 매우 특히 바람직한 것은 상기 나타낸 화학식 (1) 내지 (14) 의 화합물이며, 이때 B' 는 화학식 (15) 에 상응하고, 이러한 기는 치환되지 않는다.

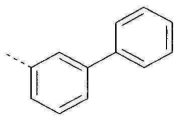
[0116] 특히 바람직한 것은 화학식 (1) 내지 (14) 의 화합물이며, B' 가 단일 결합이고, 이때 질소 원자는 단일 결합을 통해 플루오렌에 직접 결합되는 것을 특징으로 한다.

[0117] Ar^1 및 Ar^2 는 바람직하게는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 페닐-피리딜, 페닐-나프틸, 바이페닐, 테르페닐 또는 콰테르페닐 기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^6 에 의해 치환될 수 있rhm 이는 서로 동일하거나 상이할 수 있음) 에서 선택되며, Ar^1 에서 2개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 2가 기 -O-, -S- 또는 $-Si(R^6)_2-$ 에 의해 가교될 수 있거나, 또는 Ar^2 에서 2개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 2가 기 -O-, -S- 또는 $-Si(R^6)_2-$ 에 의해 가교될 수 있고, 이때 가교되지 않은 고리가 바람직하며, 이때 Ar^1 으로부터의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 Ar^2 로부터의 방향족 또는 헤테로방향족 고리로 2가 기 -O-, -S-, $-Si(R^6)_2-$, $-NR^6-$ 또는 $-C(R^6)_2-$ 에 의해 가교될 수 있고, 이때 가교되지 않은 기 Ar^1 및 Ar^2 가 바람직하다.

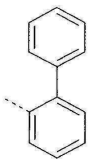
[0118] 본 발명의 매우 바람직한 구현예에서, Ar^1 및 Ar^2 는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 화학식 (37) 내지 (116) (이는 하나 이상의 라디칼 R^6 에 의해 치환될 수 있음) 의 하기 기에서 선택된다:



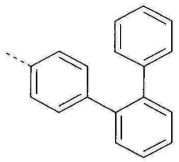
화학식 (37)



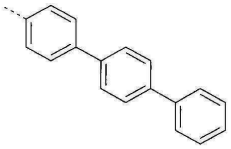
화학식 (38)



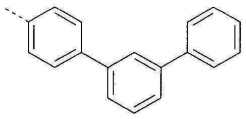
화학식 (39)



화학식 (40)

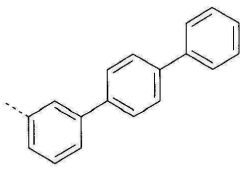


화학식 (41)

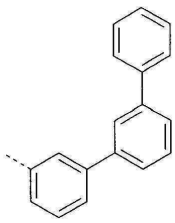


화학식 (42)

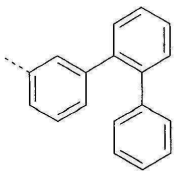
[0119]



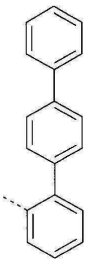
화학식 (43)



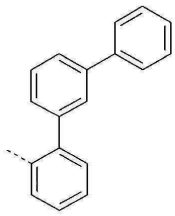
화학식 (44)



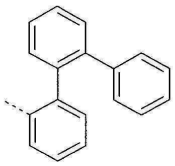
화학식 (45)



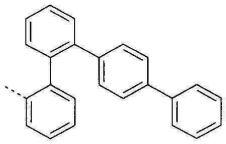
화학식 (46)



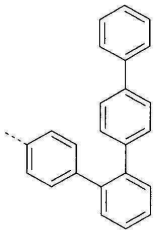
화학식 (47)



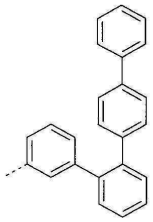
화학식 (48)



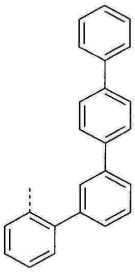
화학식 (49)



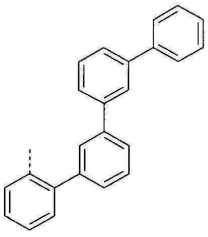
화학식 (50)



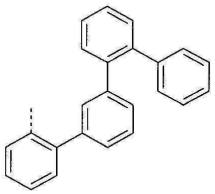
화학식 (51)



화학식 (52)

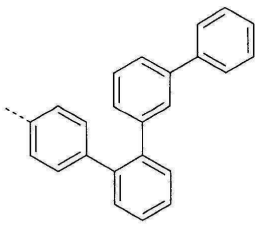


화학식 (53)

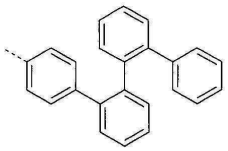


화학식 (54)

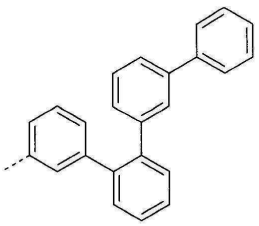
[0120]



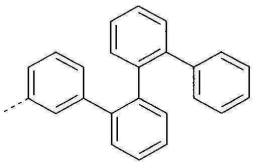
화학식 (55)



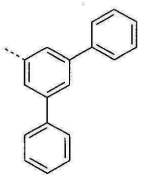
화학식 (56)



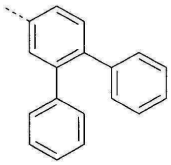
화학식 (57)



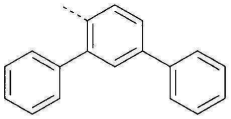
화학식 (58)



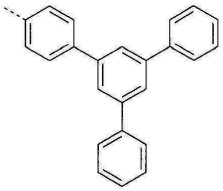
화학식 (59)



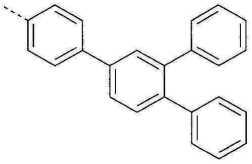
화학식 (60)



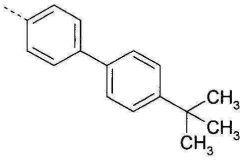
화학식 (61)



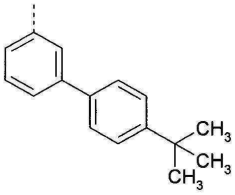
화학식 (62)



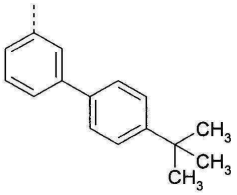
화학식 (63)



화학식 (64)



화학식 (65)

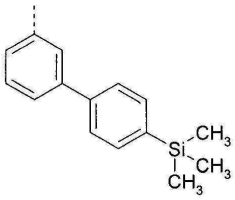


화학식 (66)

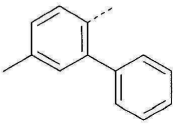
[0121]



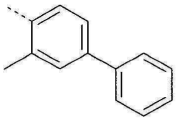
화학식 (67)



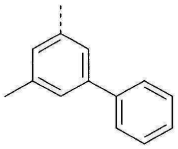
화학식 (68)



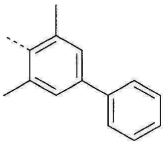
화학식 (69)



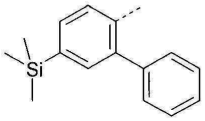
화학식 (70)



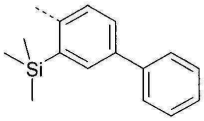
화학식 (71)



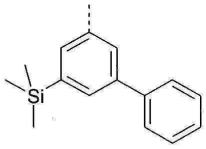
화학식 (72)



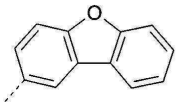
화학식 (73)



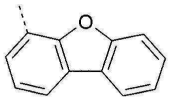
화학식 (74)



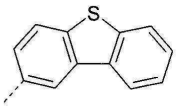
화학식 (75)



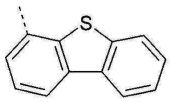
화학식 (76)



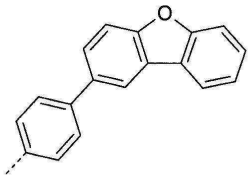
화학식 (77)



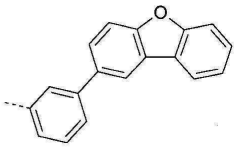
화학식 (78)



화학식 (79)

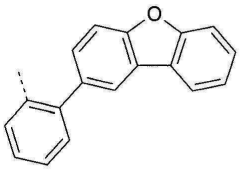


화학식 (80)

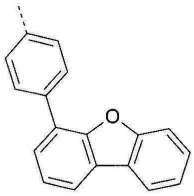


화학식 (81)

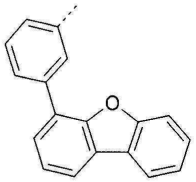
[0122]



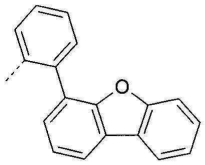
화학식 (82)



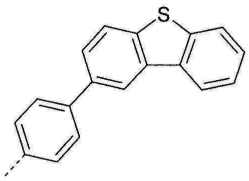
화학식 (83)



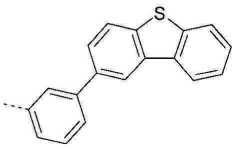
화학식 (84)



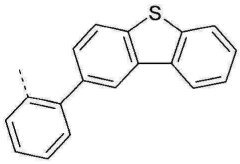
화학식 (85)



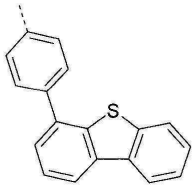
화학식 (86)



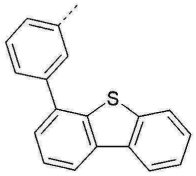
화학식 (87)



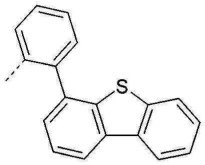
화학식 (88)



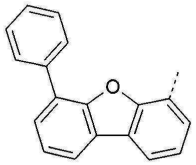
화학식 (89)



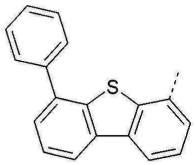
화학식 (90)



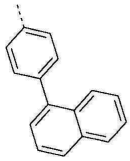
화학식 (91)



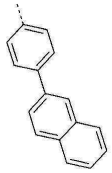
화학식 (92)



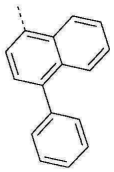
화학식 (93)



화학식 (94)

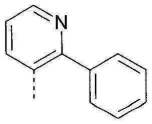


화학식 (95)

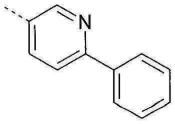


화학식 (96)

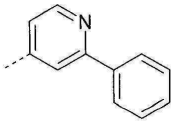
[0123]



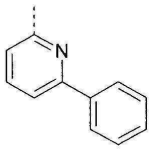
화학식 (97)



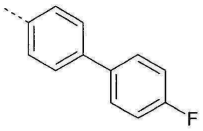
화학식 (98)



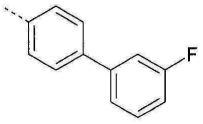
화학식 (99)



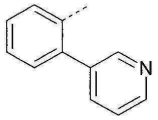
화학식 (100)



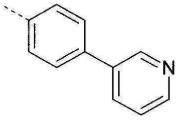
화학식 (101)



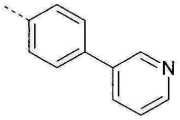
화학식 (102)



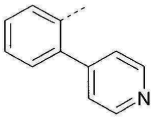
화학식 (103)



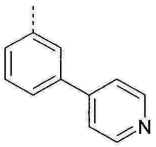
화학식 (104)



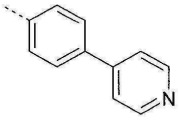
화학식 (105)



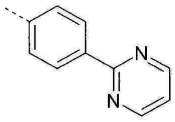
화학식 (106)



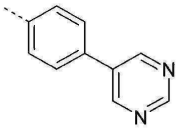
화학식 (107)



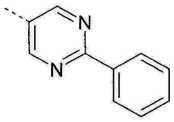
화학식 (108)



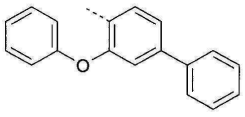
화학식 (109)



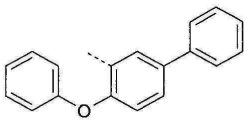
화학식 (110)



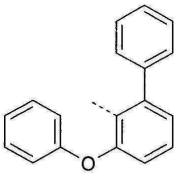
화학식 (111)



화학식 (112)

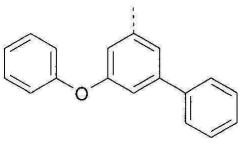


화학식 (113)

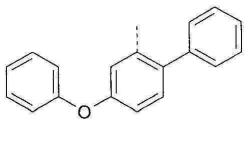


화학식 (114)

[0124]



화학식 (115)



화학식 (116)

[0125]

[0126] 식 중, 파선은 질소 원자로의 연결 위치를 나타낸다.

[0127] 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (6) 의 화합물에 관한 것이며, 이때 사용되는 기호에는 하기가 적용된다:

[0128] R^1 은 각 경우, 동일하게 또는 상이하게, 바람직하게는 동일하게, 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (탄소수 3 내지 20) (이때 상기 언급된 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 각각 치환될 수 있음), 또는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 각 경우 하나 이상

의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 이때 2개의 라디칼 R^1 은 서로 연결될 수 있고 고리를 형성할 수 있어, 스피로 화합물이 플루오렌의 위치 9 에서 형성되며, 이때 스피로바이플루오렌이 배제되고;

[0129] R^2 는 H, 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (탄소수 3 내지 20), (상기 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 를 나타내고;

[0130] R^3 은 H, D, F, Cl, Br, I, 직쇄 알킬 또는 알콕시 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시 기 (탄소수 3 내지 20) (이때 상기 언급된 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 각각 치환될 수 있고 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수 있음), 또는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 아릴옥시 기 (방향족 고리원자수 5 내지 60) (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 아르알킬 기 (방향족 고리원자수 5 내지 60) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고, 이때 2개 이상의 라디칼 R^3 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고;

[0131] B' 는 H 또는 화학식 (15) 내지 (36) 의 기에서 선택되며, 이때 이들 기는 또한 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있으며, 이는 서로 독립적이며, 및 이때 R^4 는 상기 정의된 바와 같고;

[0132] Ar^1, Ar^2 는, 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 페닐-피리딜, 페닐-나프틸, 바이페닐, 테르페닐 또는 콰테르페닐 기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^6 에 의해 치환될 수 있음) 이고, 이는 서로 동일하거나 상이할 수 있으며, 이때 Ar^1 에서 2개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 2가 기 -O-, -S- 또는 $-Si(R^6)_2-$ 에 의해 가교될 수 있거나, 또는 Ar^2 에서 2개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 2가 기 -O-, -S- 또는 $-Si(R^6)_2-$, 에 의해 가교될 수 있고, 이때 가교되지 않은 고리가 바람직하며, 이때 Ar^1 으로부터의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 2가 기 -O-, -S-, $-Si(R^6)_2-$, $-NR^6-$ 또는 $-C(R^6)_2-$ 에 의해 Ar^2 로부터의 방향족 또는 헤테로방향족 고리에 가교될 수 있고, 이때 가교되지 않은 기 Ar^1 및 Ar^2 가 바람직하다.

[0133] 매우 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (6) 의 화합물에 관한 것이며, 이때 사용되는 기호에는 하기가 적용된다:

[0134] R^1 은 각 경우, 동일하게 또는 상이하게, 바람직하게는 동일하게, 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 20) (이때 상기 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 이때 2개의 라디칼 R^1 은 서로 연결될 수 있고 고리를 형성할 수 있어, 스피로 화합물이 플루오렌의 위치 9 에서 형성되며, 이때 스피로바이플루오렌이 배제되고;

[0135] R^2 는 H, 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (탄소수 3 내지 20) (이때 상기 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고;

[0136] R^3 은 H 또는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고, 이때 R^3 은 특히 바람직하게는 H 와 동일하고;

[0137] B' 는 단일 결합이고;

[0138] Ar^1, Ar^2 는, 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 바이페닐, 테르페닐 또는 콰테르페닐 기 (이는 서로 동일하거나

상이한 하나 이상의 라디칼 R^6 에 의해 치환될 수 있고 Ar^1 및 Ar^2 에서 고리는 가교되지 않음) 이고, Ar^1 및 Ar^2 는 특히 바람직하게는 바이페닐 기 (이는 서로 동일하거나 상이한 하나 이상의 라디칼 R^6 에 의해 치환될 수 있음) 이다.

[0139] 매우 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (6) 의 화합물에 관한 것이며, 이때 사용되는 기호에는 하기가 적용된다:

[0140] R^1 은 각 경우 동일하고 이는 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 5), 바람직하게는 메틸 기 또는 에틸 기 (이때 상기 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이거나, 또는 이는 페닐, 바이페닐 또는 피리딜 기 (이의 각각은 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 을 나타내며, 이때 2개의 알킬 기 R^1 은 서로 연결될 수 있고 고리를 형성할 수 있어, 스피로 화합물이 플루오렌의 위치 9 에서 형성되며, 이때 스피로바이플루오렌이 배제되고;

[0141] R^2 는 H, 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (탄소수 3 내지 20)(이때 상기 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고;

[0142] R^3 은 H 또는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고, 이때 R^3 은 특히 바람직하게는 H 와 동일하고;

[0143] B' 는 단일 결합이고;

[0144] Ar^1, Ar^2 는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 바이페닐, 테르페닐 또는 콰테르페닐 기 (이는 동일하거나 상이한 하나 이상의 라디칼 R^6 에 의해 치환될 수 있음), 이때 Ar^1 및 Ar^2 에서 고리는 가교되지 않으며, Ar^1 및 Ar^2 는 특히 바람직하게는 바이페닐 기 (이는 동일하거나 상이한 하나 이상의 라디칼 R^6 에 의해 치환될 수 있음) 이다.

[0145] 추가 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (8) 의 화합물에 관한 것이며, 이때 사용되는 기호에는 하기가 적용된다:

[0146] R^1 은 각 경우, 동일하게 또는 상이하게, 바람직하게는 동일하게, 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (탄소수 3 내지 20) (이때 상기 언급된 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 각각 치환될 수 있음), 또는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 이때 2개의 라디칼 R^1 은 서로 연결될 수 있고 고리를 형성할 수 있어, 스피로 화합물이 플루오렌의 위치 9 에서 형성되며, 이때 스피로바이플루오렌이 배제되고;

[0147] R^2 는 H, 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (탄소수 3 내지 20)(이때 상기 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고;

[0148] R^3 은 H, D, F, Cl, Br, I, 직쇄 알킬 또는 알콕시 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시 기 (탄소수 3 내지 20) (이때 상기 언급된 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 각각 치환될 수 있고 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수 있음), 또는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 아릴옥시 기 (방향족 고리원자수 5 내지 60) (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 아르알킬 기 (방향족 고리원자수 5 내지 60) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고, 이때 2개 이상의 라디칼 R^3 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고;

[0149] B' 는 H 또는 화학식 (15) 내지 (36) 의 기에서 선택되고, 이때 이들 기는 또한 서로 독립적으로 하나 이상의

라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있고, 이는 서로 독립적이며, 이때 R^4 는 상기 정의된 바와 같고;

[0150] Ar^1, Ar^2 는 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 페닐-피리딜, 페닐-나프틸, 바이페닐, 테르페닐 또는 콰테르페닐기 (이는 서로 동일하게 또는 상이하게 하나 이상의 라디칼 R^6 에 의해 치환될 수 있음) 이고, 이때 Ar^1 에서 2개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 2가 기 -O-, -S- 또는 $-Si(R^6)_2-$ 에 의해 가교될 수 있거나, 또는 Ar^2 에서 2개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 2가 기 -O-, -S- 또는 $-Si(R^6)_2-$ 에 의해 가교될 수 있고,

[0151] 이때 가교되지 않은 고리가 바람직하고, 이때 Ar^1 으로부터 방향족 또는 헤테로방향족 고리가 Ar^2 로부터 방향족 또는 헤테로-방향족 고리에 2가 기 -O-, -S-, $-Si(R^6)_2-$, $-NR^6-$ 또는 $-C(R^6)_2-$ 에 의해 가교될 수 있고, 이때 가교되지 않은 기 Ar^1 및 Ar^2 가 바람직하다.

[0152] 매우 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (8) 의 화합물에 관한 것이며, 이때 사용되는 기호에는 하기가 적용된다:

[0153] R^1 은 각 경우, 동일하게 또는 상이하게, 바람직하게는 동일하게, 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 20) (이때 상기 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 또는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고, 이때 2개의 라디칼 R^1 은 서로 연결될 수 있고 고리를 형성할 수 있어, 스피로 화합물이 플루오렌의 위치 9 에서 형성되며, 이때 스피로바이플루오렌이 배제되고;

[0154] R^2 은 H, 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (탄소수 3 내지 20) (이때 상기 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고;

[0155] R^3 은 H 또는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고, 이때 R^3 은 특히 바람직하게는 H 이고;

[0156] B' 는 단일 결합이고;

[0157] Ar^1, Ar^2 은, 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 바이페닐, 테르페닐 또는 콰테르페닐 기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^6 에 의해 치환될 수 있음) 이고, 이때 Ar^1 및 Ar^2 에서 고리는 가교되지 않고, Ar^1 및 Ar^2 는 특히 바람직하게는 바이페닐 기 (이는 동일하거나 상이한 하나 이상의 라디칼 R^6 에 의해 치환될 수 있음) 이다.

[0158] 매우 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (8) 의 화합물에 관한 것이며, 이때 사용되는 기호에는 하기가 적용된다:

[0159] R^1 은 각 경우 동일하고 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 5), 바람직하게는 메틸 기 또는 에틸 기 (이때 상기 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이거나, 또는 페닐, 바이페닐 또는 피리딜 기 (이의 각각은 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 를 나타내고, 이때 2개의 알킬 기 R^1 은 서로 연결될 수 있고 고리를 형성할 수 있어, 스피로 화합물이 플루오렌의 위치 9 에서 형성되며, 이때 스피로바이플루오렌이 배제되고;

[0160] R^2 는 H, 직쇄 알킬 기 (탄소수 1 내지 20) 또는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (탄소수 3 내지 20) (이때 상기 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음), 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고;

[0161] R^3 는 H 또는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (방향족 고리원자수 6 내지 30) (이는 각 경우 하나 이상의 라

디칼 R^4 에 의해 치환될 수 있음) 이고, 이때 R^3 은 특히 바람직하게는 H 이고;

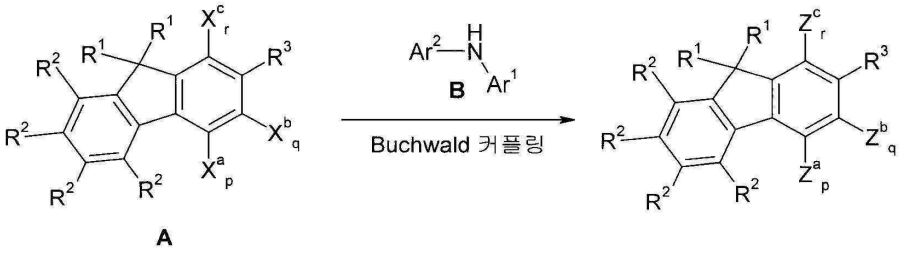
[0162] B' 는 단일 결합이고;

[0163] Ar^1, Ar^2 는, 각 경우 동일하게 또는 상이하게, 바이페닐, 테르페닐 또는 콰테르페닐 기 (이는 동일하거나 상이한 하나 이상의 라디칼 R^6 에 의해 치환될 수 있음) 이고, 이때 Ar^1 및 Ar^2 에서 고리는 가교되지 않으며, Ar^1 및 Ar^2 는 특히 바람직하게는 바이페닐 기 (이는 서로 동일하거나 상이한 하나 이상의 라디칼 R^6 에 의해 치환될 수 있음) 이다.

[0164] 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (1) 의 화합물에 관한 것이며, 이들이 모노아민 화합물인 것을 특징으로 한다.

[0165] 본 발명에 따른 화합물의 합성은 당업자에게 공지되어 있는 방법에 의해 수행될 수 있다. 제조는 예를 들어 할로겐화, Buchwald 커플링 및 Suzuki 커플링에 의해 수행될 수 있다.

[0166] 하기 반응식은 본 발명에 따른 화학식 (1) 의 화합물의 제조에 대한 바람직한 합성 경로를 나타낸다. 본 발명에 따른 화합물의 합성을 위해, 플루오렌 화합물 A 는 Buchwald 커플링에서 화학식 Ar^1-NH-Ar^2 의 아민 B 와 반응된다:



A

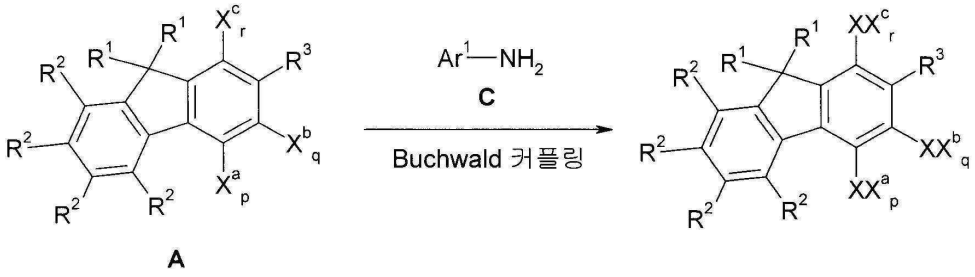
[0167]

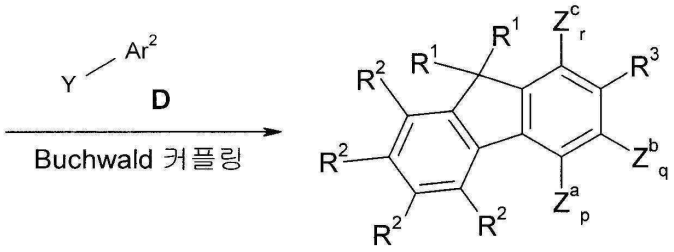
[0168] [식 중, 사용되는 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용됨:

[0169] X^a_0, X^b_0, X^c_0 는, 각 경우 동일하게 또는 상이하게, R^3 과 동일하고,

[0170] X^a_1, X^b_1, X^c_1 는 -B'-Y 과 동일하고, 이때 Y 는 이탈기, 예를 들어 할로겐임].

[0171] 본 발명에 따른 화합물의 제조를 위한 또다른 바람직한 합성 경로는 하기 반응식에서 나타난다. 합성 경로는 2개의 커플링 반응을 포함한다: 우선, 플루오렌 화합물 A 를 제 1 의 Buch-wald 커플링에서 화학식 Ar^1-NH_2 의 아민 B 와 반응시킨다. 최종적으로, 제 2 의 Buchwald 커플링은 화합물 D, 예를 들어 브로모아릴 화합물을 이용하여 수행된다.





[0172]

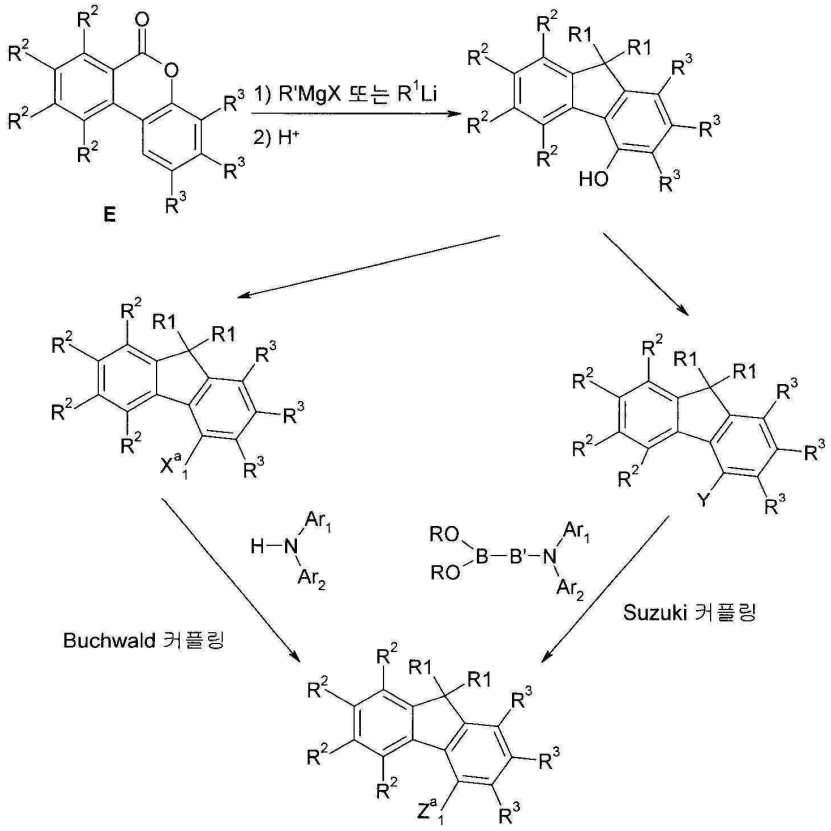
[0173] 이때 Y 는 또한 이탈기, 예를 들어 할로겐이고;

[0174] 이때

[0175] XX^a_0, XX^b_0, XX^c_0 는, 각 경우 동일하게 또는 상이하게, R^3 과 동일하고,

[0176] XX^a_1, XX^b_1, XX^c_1 은 -B'-NH-Ar^1 과 동일하다.

[0177] 하기 반응식은 본 발명에 따른 화합물의 제조를 위한 추가적으로 바람직한 합성 경로를 나타낸다. 이러한 목적을 위해, 벤조크로메논 E 는 출발점으로서 제공된다. 오가노메탈릭 시약의 첨가 반응 예를 들어 Grignard 또는 오가노리튬 시약, 및 중간체 알코올레이트의 후속적인 산-촉매작용의 환화는 상응하는 4-히드록시플루오렌 F 를 생성한다. 히드록실 기는 당업자에게 친숙한 방법 (C-C 커플링, 예컨대 Suzuki, Negishi, Yama-moto, Grignard-Cross, Stille, Heck 커플링, 등, C-N 커플링, 예컨대 Buchwald 커플링) 에 의해 이탈기 Y 또는 -B'-Y (= X^a_1), 예를 들어 트리플레이트 (TfO) 또는 할라이드 (바람직하게는 Br 또는 Cl), 및 추가의 본 발명에 따른 화합물로 후속 전환되며, 이때 Buchwald 커플링 또는 Suzuki 커플링이 바람직하다. X^a_1 의 경우, Y 만이 물론 이탈기이다.

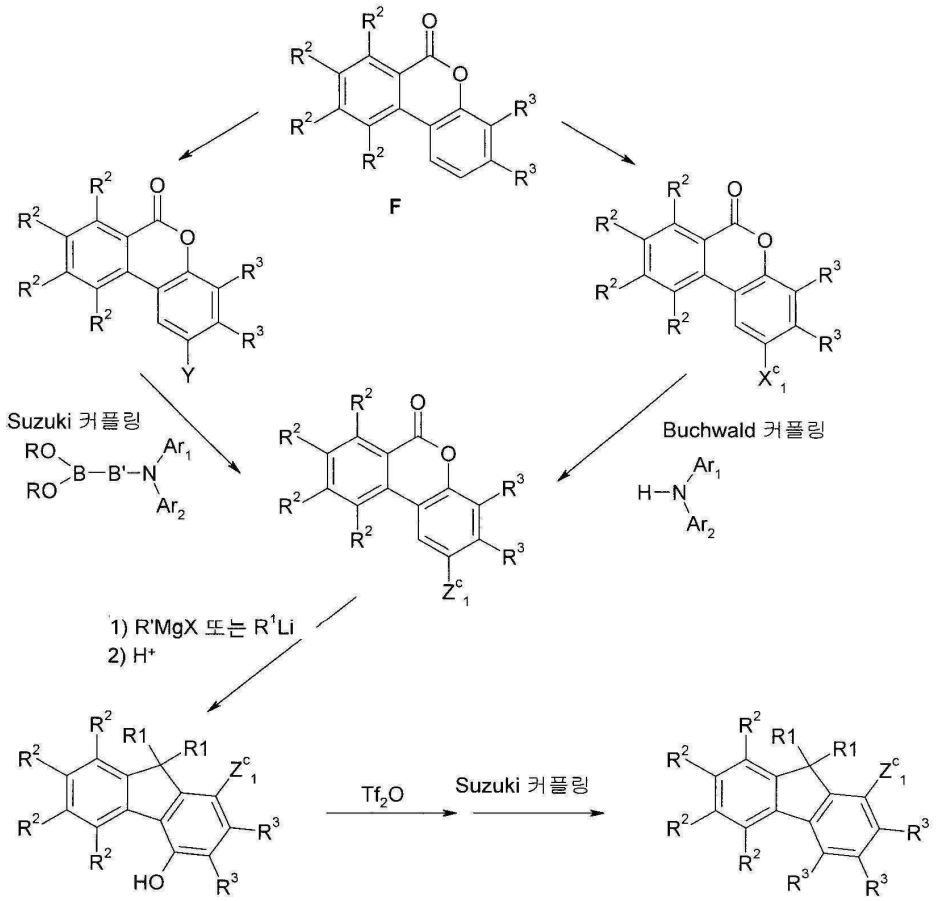


[0178]

[0179] 이때 사용되는 지수는 상기 정의된 바와 같이 규정되며, B 는 붕소 원자를 나타낸다.

[0180] 이는 바람직한 위치 4 에서 아민을 갖는 플루오렌의 제조를 가능하게 한다.

[0181] 플루오렌의 위치 1 에서 아민을 갖는 본 발명에 따른 플루오렌은 전체적으로 이와 유사하게 제조될 수 있다.



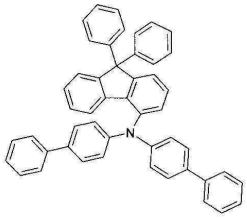
[0182]

[0183] Suzuki 커플링에 대해 사용되는 R 기를 함유하는 보론산 에스테르는 당업자에게 익히 공지되어 있다.

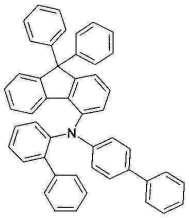
[0184] 본 발명에 따른 화합물의 합성에 사용되는 출발 화합물 A, B, C, D, E 및 F 에 대한 합성 경로는 당업자에게 친숙하다. 또한, 일부 명시적 합성 방법은 작업 실시예에서 상세히 기술된다.

[0185] 일반식 (1) 의 화합물의 제조에 바람직한 커플링 반응은 Buchwald 커플링이다.

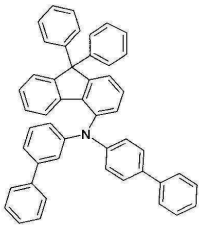
[0186] 바람직한 본 발명에 따른 화합물은 하기 표에서 예로서 나타낸다.



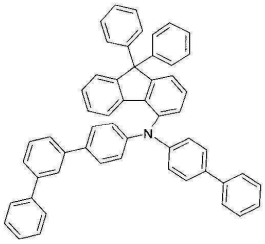
화학식 (117)



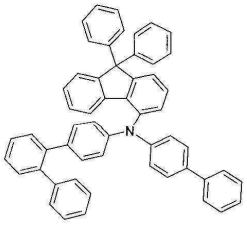
화학식 (118)



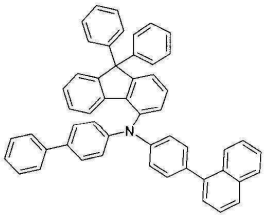
화학식 (119)



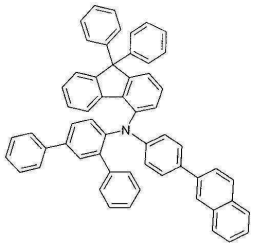
화학식 (120)



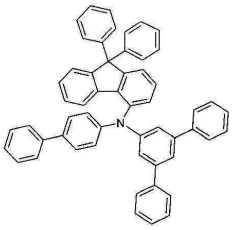
화학식 (121)



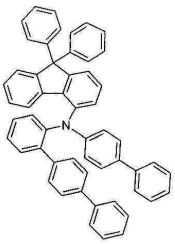
화학식 (123)



화학식 (124)

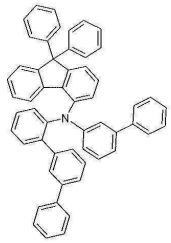


화학식 (125)

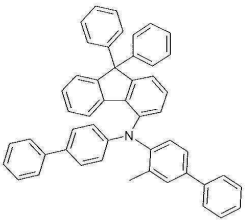


화학식 (126)

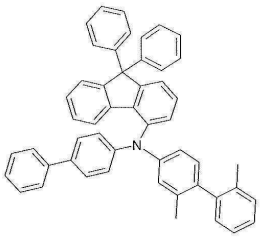
[0187]



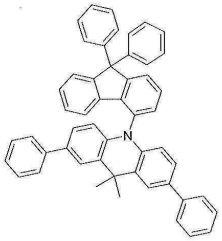
화학식 (127)



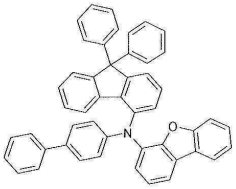
화학식 (129)



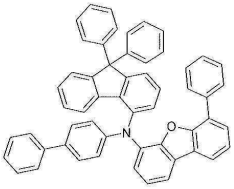
화학식 (130)



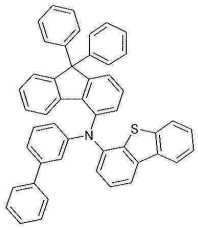
화학식 (131)



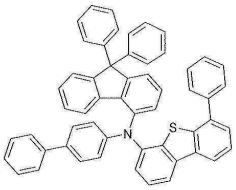
화학식 (132)



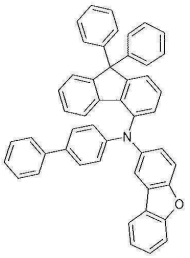
화학식 (133)



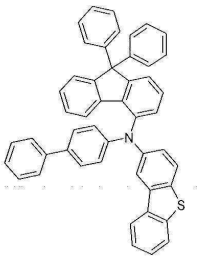
화학식 (134)



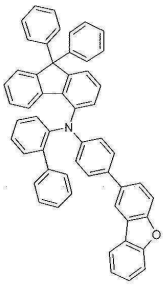
화학식 (135)



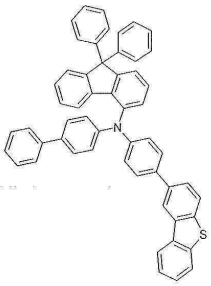
화학식 (136)



화학식 (137)

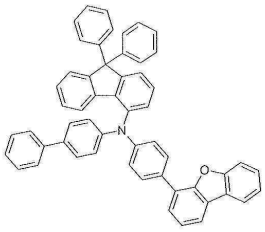


화학식 (138)

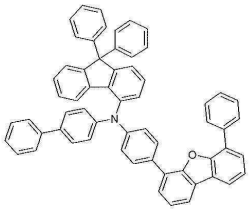


화학식 (139)

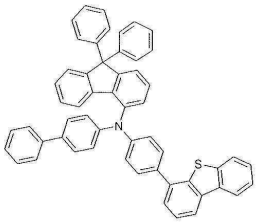
[0188]



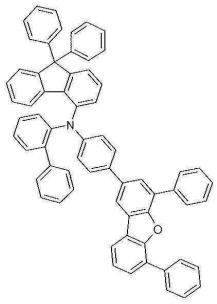
화학식 (140)



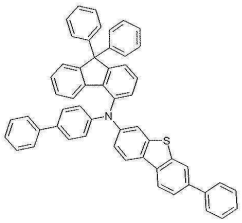
화학식 (141)



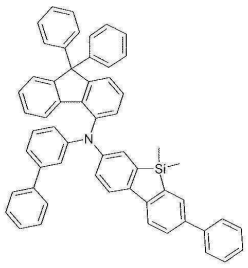
화학식 (142)



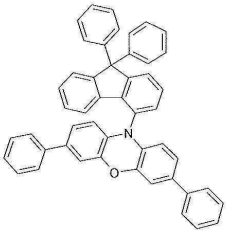
화학식 (143)



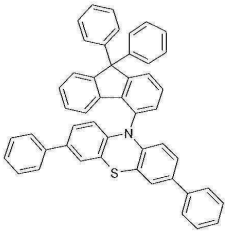
화학식 (144)



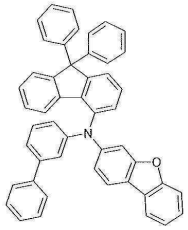
화학식 (145)



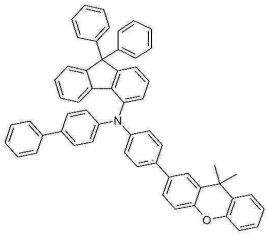
화학식 (146)



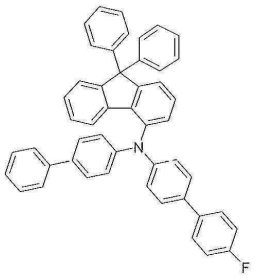
화학식 (147)



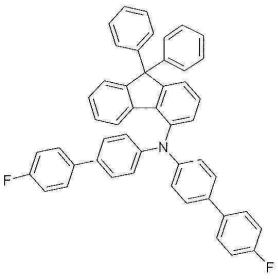
화학식 (148)



화학식 (149)

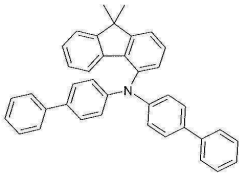


화학식 (150)

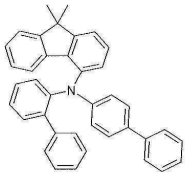


화학식 (151)

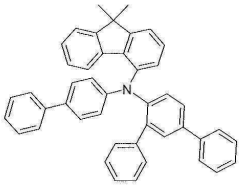
[0189]



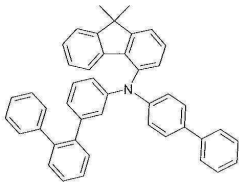
화학식 (152)



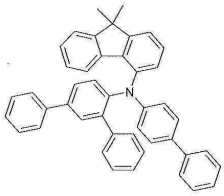
화학식 (153)



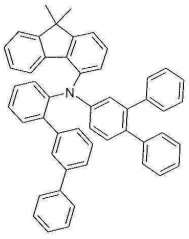
화학식 (154)



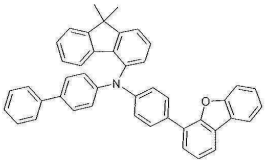
화학식 (155)



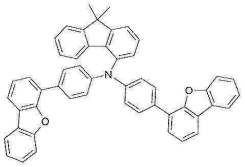
화학식 (156)



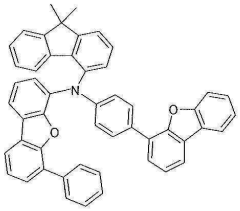
화학식 (157)



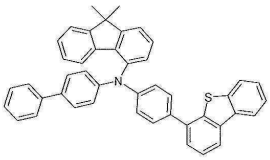
화학식 (158)



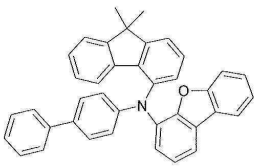
화학식 (159)



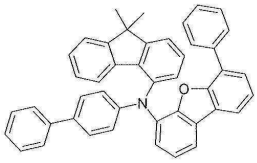
화학식 (160)



화학식 (161)

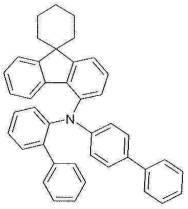


화학식 (162)

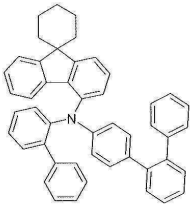


화학식 (163)

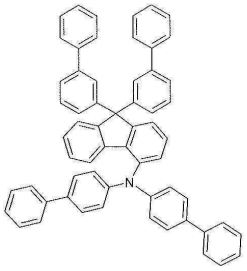
[0190]



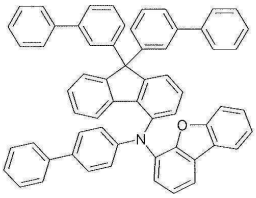
화학식 (164)



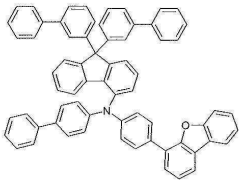
화학식 (165)



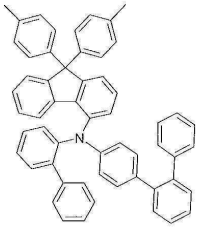
화학식 (166)



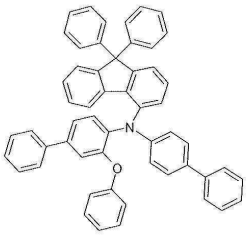
화학식 (167)



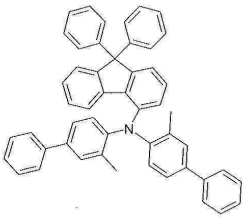
화학식 (168)



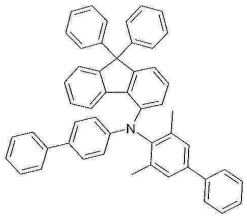
화학식 (169)



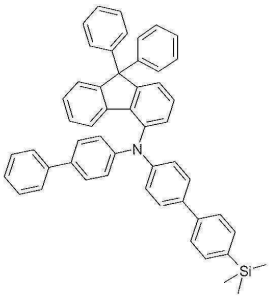
화학식 (170)



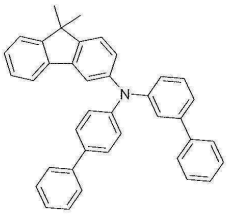
화학식 (171)



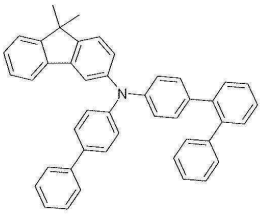
화학식 (172)



화학식 (173)

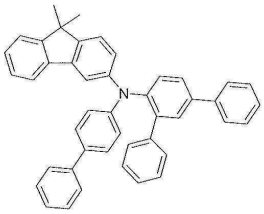


화학식 (174)

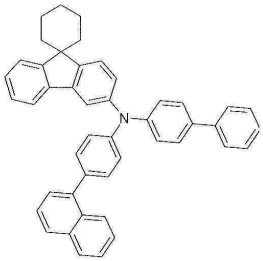


화학식 (175)

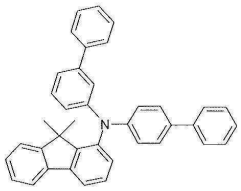
[0191]



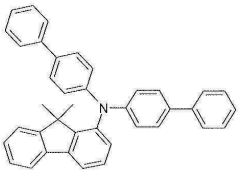
화학식 (176)



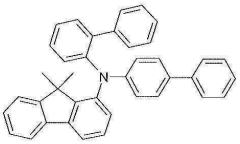
화학식 (177)



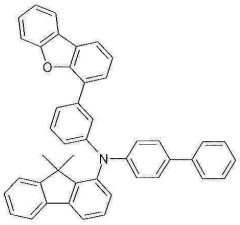
화학식 (178)



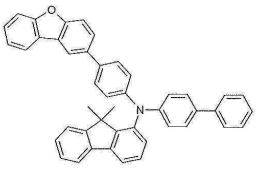
화학식 (179)



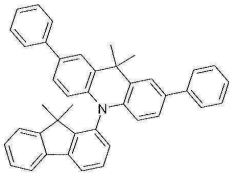
화학식 (180)



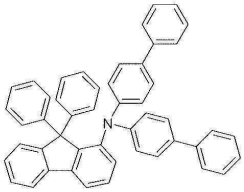
화학식 (181)



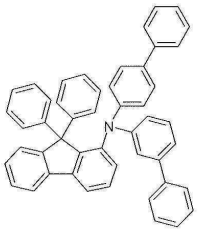
화학식 (182)



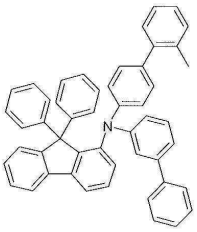
화학식 (183)



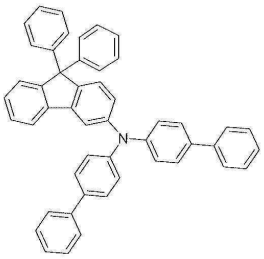
화학식 (184)



화학식 (185)

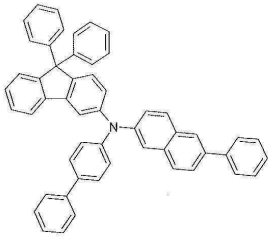


화학식 (186)

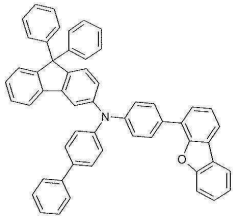


화학식 (187)

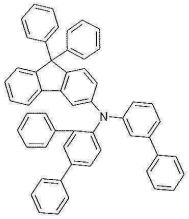
[0192]



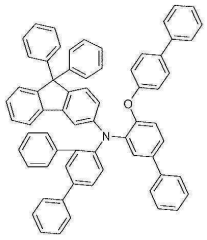
화학식 (188)



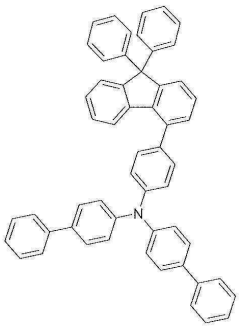
화학식 (189)



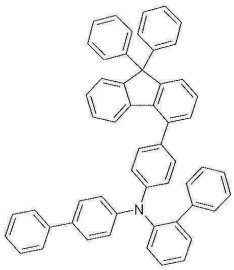
화학식 (190)



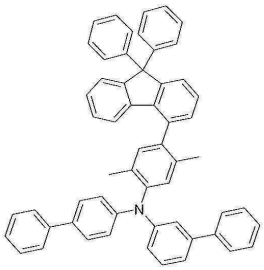
화학식 (191)



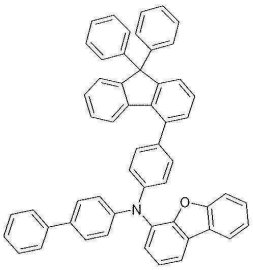
화학식 (192)



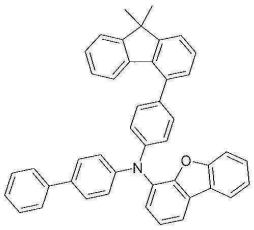
화학식 (193)



화학식 (194)

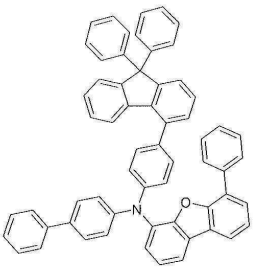


화학식 (195)

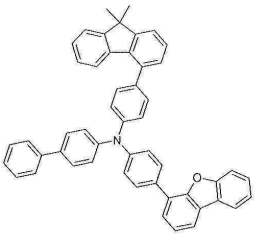


화학식 (196)

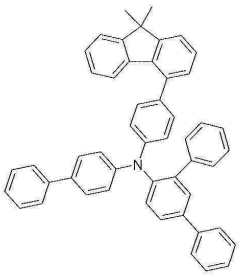
[0193]



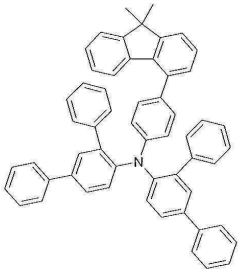
화학식 (197)



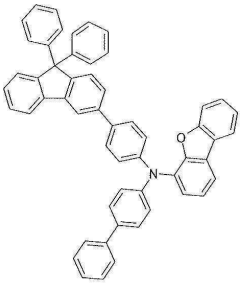
화학식 (198)



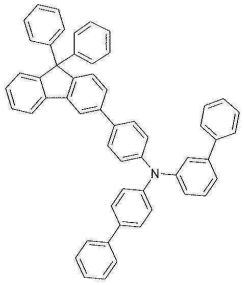
화학식 (199)



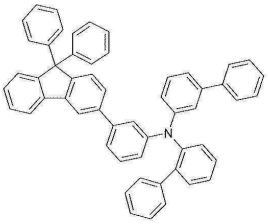
화학식 (200)



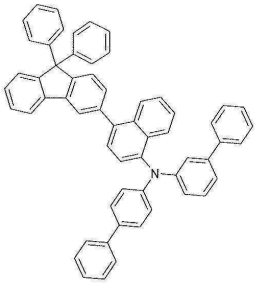
화학식 (201)



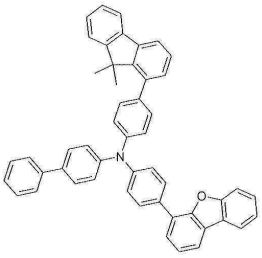
화학식 (202)



화학식 (203)

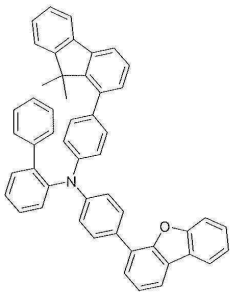


화학식 (204)

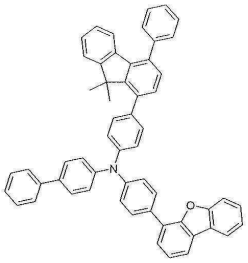


화학식 (205)

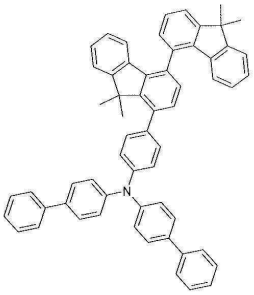
[0194]



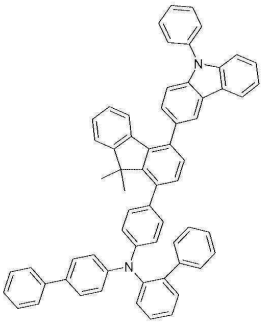
화학식 (206)



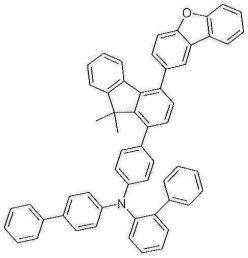
화학식 (207)



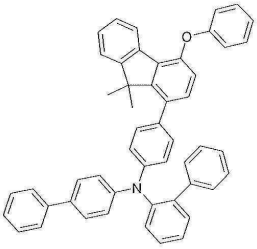
화학식 (208)



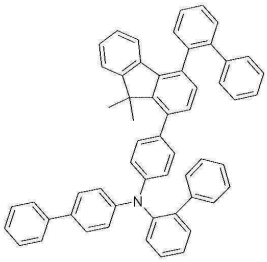
화학식 (209)



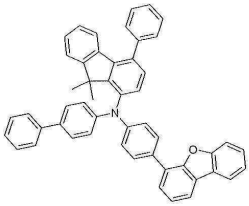
화학식 (210)



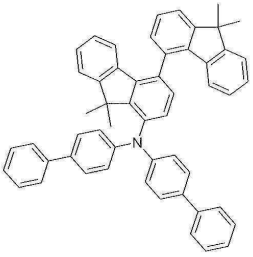
화학식 (211)



화학식 (212)

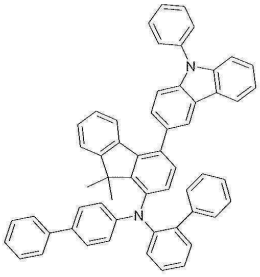


화학식 (213)

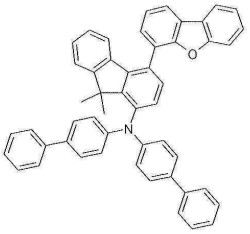


화학식 (214)

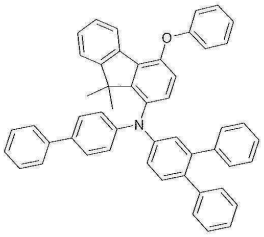
[0195]



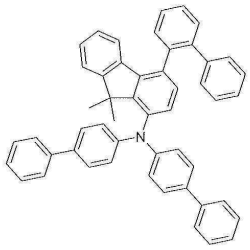
화학식 (215)



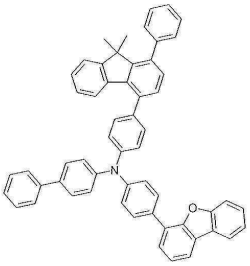
화학식 (216)



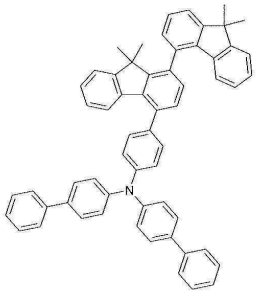
화학식 (217)



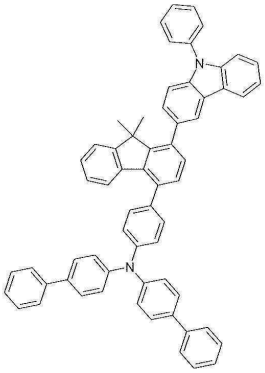
화학식 (218)



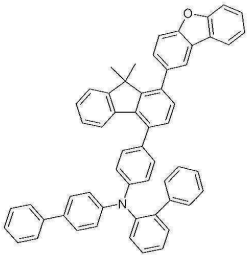
화학식 (219)



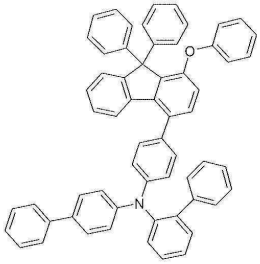
화학식 (220)



화학식 (221)

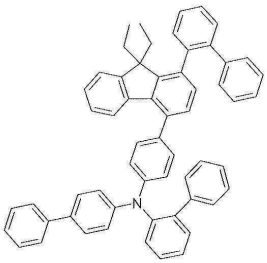


화학식 (222)

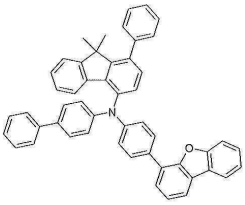


화학식 (223)

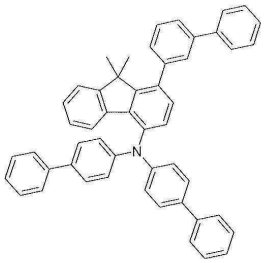
[0196]



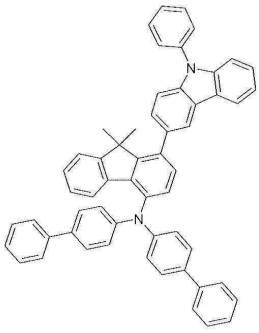
화학식 (224)



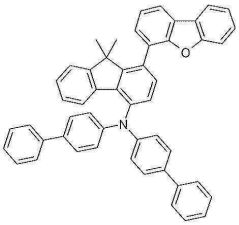
화학식 (225)



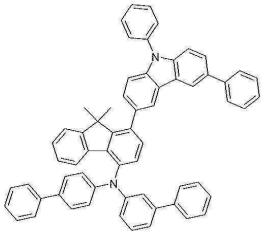
화학식 (226)



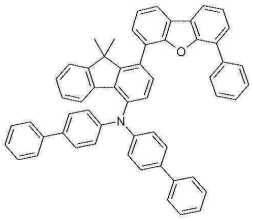
화학식 (227)



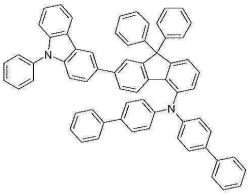
화학식 (228)



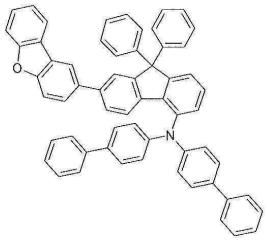
화학식 (229)



화학식 (230)

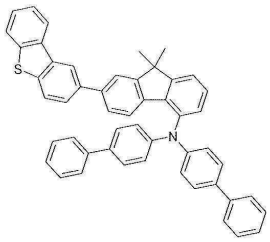


화학식 (231)

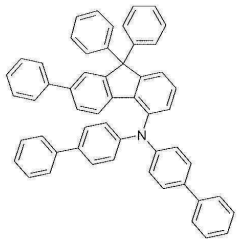


화학식 (232)

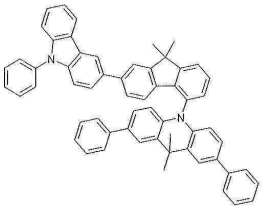
[0197]



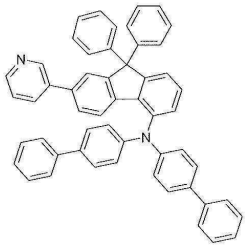
화학식 (233)



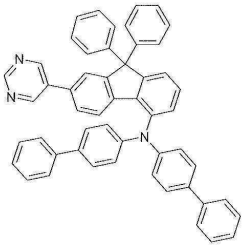
화학식 (234)



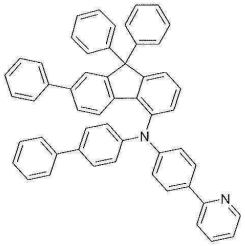
화학식 (235)



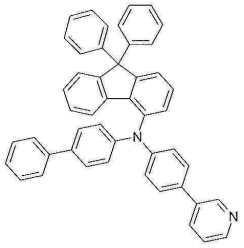
화학식 (236)



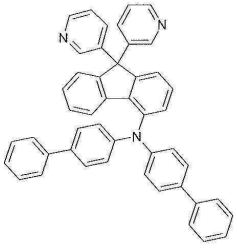
화학식 (237)



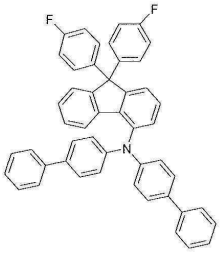
화학식 (238)



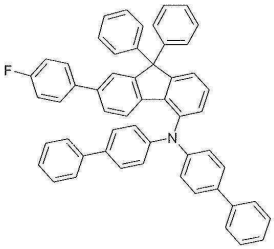
화학식 (239)



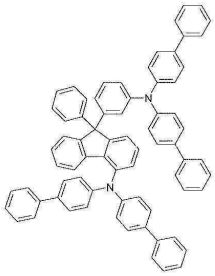
화학식 (240)



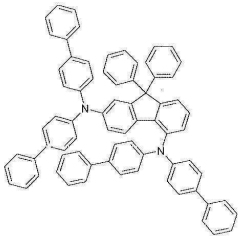
화학식 (241)



화학식 (242)

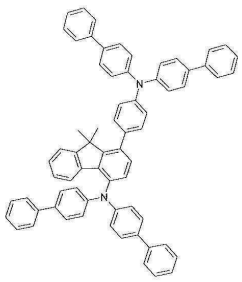


화학식 (243)

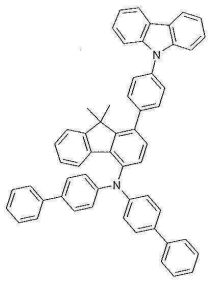


화학식 (244)

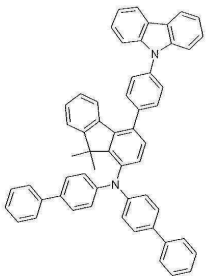
[0198]



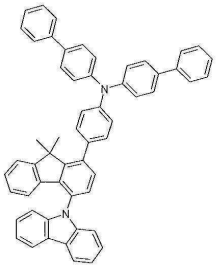
화학식 (245)



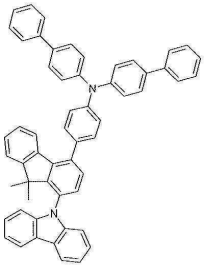
화학식 (246)



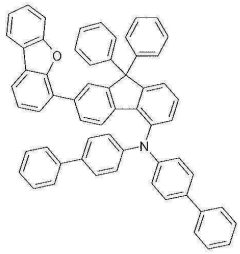
화학식 (247)



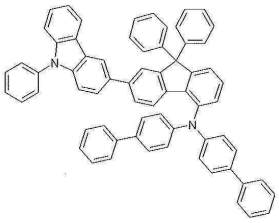
화학식 (248)



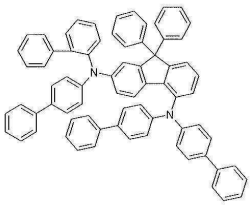
화학식 (249)



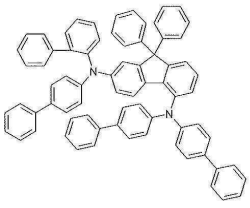
화학식 (250)



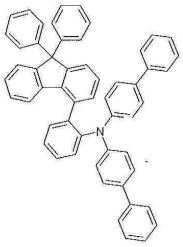
화학식 (251)



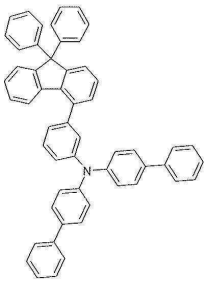
화학식 (252)



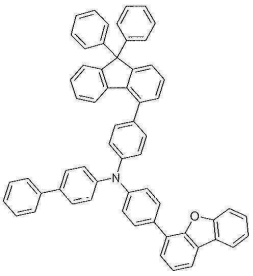
화학식 (253)



화학식 (254)

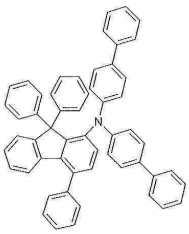


화학식 (255)

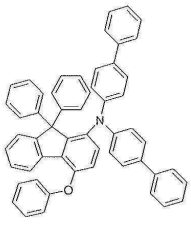


화학식 (256)

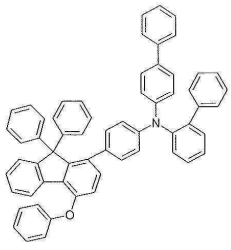
[0199]



화학식 (257)



화학식 (258)



화학식 (259)

[0200]

[0201] 화학식 (1) 의 화합물은 반응성 이탈기, 예컨대 브롬, 요오드, 염소, 보론산 또는 보론산 에스테르에 의해 치환될 수 있다. 이들은 상응하는 올리고머, 덴드리머 또는 중합체의 제조를 위한 단량체로서 이용될 수 있다.

적합한 반응성 이탈 기는 예를 들어 브롬, 요오드, 염소, 보론산, 보론산 에스테르, 아민, 알케닐 또는 알키닐 기 (말단 C-C 이중 결합 또는 C-C 삼중 결합을 가짐), 옥시란, 옥세탄, 시클로첨가를 겪는 기, 예를 들어

1,3-양극성 시클로첨가를 겪는 기, 예를 들어 디엔 또는 아지드, 카르복실산 유도체, 알코올 및 실란이다.

[0202] 따라서, 본 발명은 또한 하나 이상의 화학식 (1) 의 화합물을 포함하는 올리고머, 중합체 또는 덴드리머로서, 중합체, 올리고머 또는 덴드리머에 대한 결합(들) 이 식 (1) 의, R^1 에 의해 치환되는 임의의 목적하는 위치에서 국지화될 수 있는 것에 관한 것이다. 본 발명에 따른 화합물의 연결에 따라, 상기 화합물은 올리고머 또는 중합체의 측쇄 성분 또는 주쇄 성분이다. 본 발명의 의미에서, 올리고머는 3 개 이상의 단량체 단위로부터 구축되는 화합물을 의미한다. 본 발명의 의미에서, 중합체는 10 개 이상의 단량체 단위로부터 구축되는 화합물을 의미한다. 본 발명에 따른 중합체, 올리고머 또는 덴드리머는 공액, 부분 공액 또는 비-공액일 수 있다. 본 발명에 따른 올리고머 또는 중합체는 선형, 분지형 또는 수지형일 수 있다. 선형 방식으로 연결된 구조에서, 화학식 (1) 의 단위는 서로 직접 연결될 수 있거나, 또는 2 가 기를 통해, 예를 들어 치환 또는 미치환된 알킬렌기를 통해, 헤테로원자를 통해, 또는 2 가 방향족 또는 헤테로방향족기를 통해 서로 연결될 수 있다. 분지형 및 수지형 구조에서, 예를 들어 화학식 (1) 의 3 개 이상의 단위는 3 가 또는 다가 기를 통해, 예를 들어 3 가 또는 다가 방향족 또는 헤테로방향족기를 통해 연결되어 분지형 또는 수지형 올리고머 또는 중합체를 형성할 수 있다.

[0203] 본 발명에 따른 화합물에 대해 상기 기재된 바와 동일한 바람직한 것이 올리고머, 덴드리머 및 중합체에서의 화학식 (1) 의 반복 단위에 적용된다.

[0204] 올리고머 또는 중합체의 제조를 위해, 본 발명에 따른 단량체는 추가의 단량체와 공중합되거나 또는 단일중합된다. 적합하고 바람직한 공단량체는 플루오렌 (예를 들어, EP 842208 또는 WO 2000/22026 에 따름), 스피로바이플루오렌 (예를 들어, EP 707020, EP 894107 또는 WO 2006/061181 에 따름), 파라-페닐렌 (예를 들어, WO 1992/18552 에 따름), 카르바졸 (예를 들어, WO 2004/070772 또는 WO 2004/113468 에 따름), 티오펜 (예를 들어, EP 1028136 에 따름), 디히드로페난트렌 (예를 들어, WO 2005/014689 또는 WO 2007/006383 에 따름), 시스- 및 트랜스-인데노플루오렌 (예를 들어, WO 2004/041901 또는 WO 2004/113412 에 따름), 케톤 (예를 들어, WO 2005/040302 에 따름), 페난트렌 (예를 들어, WO 2005/104264 또는 WO 2007/017066 에 따름) 또는 또한 복수의 이들 단위로부터 선택된다. 중합체, 올리고머 및 덴드리머는 통상적으로 추가의 단위, 예를 들어 방사 (형광 또는 인광) 단위, 예를 들어 비닐트리아릴아민 (예를 들어, WO 2007/068325 에 따름) 또는 인광 금속 착물 (예를 들어, WO 2006/003000 에 따름) 및/또는 전하-수송 단위, 특히 트리아릴아민 기재의 것들을 또한 함유한다.

[0205] 본 발명에 따른 중합체, 올리고머 및 덴드리머는 유리한 특성, 특히 긴 수명, 높은 효율 및 양호한 색 좌표를 갖는다.

[0206] 본 발명에 따른 중합체 및 올리고머는 일반적으로 하나 이상의 단량체 유형의 중합에 의해 제조되며, 이때 하나 이상의 단량체는 중합체에서 화학식 (1) 의 반복 단위를 유도한다. 적합한 중합 반응은 당업자에 알려져 있고, 문헌에 기재되어 있다. C-C 또는 C-N 연결을 유도하는 특히 적합하고 바람직한 중합 반응은 하기이다:

[0207] (A) SUZUKI 중합;

[0208] (B) YAMAMOTO 중합;

[0209] (C) STILLE 중합; 및

[0210] (D) HARTWIG-BUCHWALD 중합.

[0211] 이러한 방법에 의해 중합이 실행될 수 있는 방식 및 중합체가 이후에 반응 매질로부터 분리되고 정제될 수 있는 방식이 당업자에 알려져 있고, 문헌, 예를 들어 WO 2003/048225, WO 2004/037887 및 WO 2004/037887 에 상세히 기재되어 있다.

[0212] 따라서, 본 발명은 또한 SUZUKI 중합, YAMAMOTO 중합, STILLE 중합 또는 HARTWIG-BUCHWALD 중합에 의해 제조되는 것을 특징으로 하는, 본 발명에 따른 중합체, 올리고머 및 덴드리머의 제조 방법에 관한 것이다. 본 발명에 따른 덴드리머는 당업자에게 알려져 있는 방법 또는 이와 유사한 방법에 의해 제조될 수 있다. 적합한 방법은 문헌, 예를 들어 [Frechet, Jean M. J.; Hawker, Craig J., "Hyper-branched polyphenylene and hyperbranched polyesters: new soluble, three-디mensional, reactive polymers", Reactive & Functional Polymers (1995), 26(1-3), 127-36]; [Janssen, H. M.; Meijer, E. W., "The synthesis and characterization of dendritic molecules", Materials Science and Technology (1999), 20 (Synthesis of Polymer), 403-458]; [Tomalia, Donald A., "Dendrimer molecules", Scientific American (1995), 272(5), 62-6]; WO 2002/067343

A1 및 WO 2005/026144 A1 에 기재되어 있다.

[0213] 본 발명에 따른 화합물, 중합체, 올리고머 및 덴드리머는 전자 소자에 사용되는 다른 유기 관능성 재료와의 조성물로서 사용될 수 있다. 다양한 가능한 유기 관능성 재료는 당업계에 공지되어 있다. 따라서, 본 발명은 본 발명에 따른 하나 이상의 화학식 (1) 의 화합물을 포함하는 조성물 및 본 발명에 따른 하나 이상의 중합체, 올리고머 또는 덴드리머 및 형광 이미터, 인광 이미터, 호스트 재료, 매트릭스 재료, 전자-수송 재료, 전자-주입 재료, 정공-전도체 재료, 정공-주입 재료, 전자-차단 재료 및 정공-차단 재료에서 선택되는 유기 관능성 재료를 하나 이상 포함하는 조성물에 관한 것이다.

[0214] 본 발명에 따른 화합물의 가공을 위해, 액체상으로부터 예를 들어 스핀 코팅 또는 인쇄 공정에 의해, 본 발명에 따른 화합물 또는 혼합물의 용액 또는 제형물이 필요하다. 이들 제형물은 예를 들어 용액, 분산액 또는 미니에멀젼일 수 있다. 2 종 이상의 용매의 혼합물을 사용하는 것이 바람직할 수 있다. 적합하고 바람직한 용매는, 예를 들어 톨루엔, 아니솔, o-, m- 또는 p-자일렌, 메틸 벤조에이트, 디메틸 아니솔, 메시틸렌, 테트랄린, 베라트롤, THF, 메틸-THF, THP, 클로로벤젠, 디옥산 또는 이들 용매의 혼합물이다.

[0215] 따라서, 본 발명은 또한 하나 이상의 화학식 (1) 의 화합물, 또는 하나 이상의 화학식 (1) 의 단위를 함유하는 하나 이상의 중합체, 올리고머 또는 덴드리머, 및 하나 이상의 용매, 바람직하게는 유기 용매를 포함하는 제형물, 특히 용액, 분산물 또는 미니에멀전에 관한 것이다. 이러한 유형의 용액이 제조될 수 있는 방식이 당업자에게 공지되어 있고, 예를 들어 출원 WO 2002/072714 및 WO 2003/019694 및 이의 인용 문헌에 기재되어 있다.

[0216] 본 발명에 따른 화합물은 전자 소자, 특히 유기 전계발광 소자 (예를 들어 OLED 또는 OLEC) 에 사용되는데 적합하다. 치환에 따라 화합물은 상이한 기능 및 층으로 사용된다.

[0217] 또한 본 발명은 전자 소자에서 화학식 (1) 의 화합물의 용도에 관한 것이며 하나 이상의 화학식 (1) 의 화합물을 포함하는 전자 소자에 관한 것이다. 전자 소자는 바람직하게는 유기 집적 회로 (OIC), 유기 전계 효과 트랜지스터 (OFET), 유기 박막 트랜지스터(OTFT), 유기 발광 트랜지스터 (OLET), 유기 태양 전지 (OSC), 유기 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 필드 켄치 소자 (OFQD), 유기 발광 전기화학 전지 (OLEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 특히 바람직하게는 유기 전계발광 소자 (OLED 및 OLEC) 로 구성된 군에서 선택된다.

[0218] 본 발명은 상기 언급된 바와 같이, 하나 이상의 화학식 (1) 의 화합물을 포함하는 전자 소자에 관한 것이다. 이때 전자 소자는 바람직하게는 상기 언급된 소자에서 선택된다. 특히 바람직한 것은 애노드, 캐소드 및 하나 이상의 방출 층을 포함하는 유기 전계발광 소자 (OLED) 이며, 방출 층, 정공-수송 층 또는 또다른 층일 수 있는 하나 이상의 유기 층이 하나 이상의 화학식 (1) 의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 한다.

[0219] 캐소드, 애노드 및 방사층 외에, 유기 전계발광 소자는 또한 추가의 층을 포함할 수 있다. 이들은, 예를 들어 각 경우에 하나 이상의 정공-주입층, 정공-수송층, 정공-차단층, 전자-수송층, 전자-주입층, 전자-차단층, 여기-차단층, 사이층, 전하-생성층 (IDMC 2003, Taiwan; Session 21 OLED (5), T. Matsumoto, T. Nakada, J. Endo, K. Mori, N. Kawamura, A. Yokoi, J. Kido, *Multiphoton Organic EL Device Having Charge Generation Layer*), 및/또는 유기 또는 무기 p/n 접합부로부터 선택된다. 그러나, 이들 층 각각이 반드시 존재할 필요는 없고, 층의 선택이 항상 사용되는 화합물, 및 특히 또한 전계발광 소자가 형광 또는 인광인지 여부에 따라 다르다는 것에 주목해야한다.

[0220] 유기 전계발광 소자는 또한 복수의 방사층을 포함할 수 있다. 이들 방사층은 상기 경우에 특히 바람직하게는 복수의 방사 최대치의 합계가 380 nm 내지 750 nm 이며, 이는 전체적으로 백색 방사를 유도하는데, 즉 형광 또는 인광일 수 있고 청색, 황색, 오렌지색 또는 적색 광을 방사하는 다양한 방사 화합물이 방사층에 사용된다. 3-층 시스템, 즉 3 개 방사층을 갖는 시스템이 특히 바람직한데, 여기서 이들 층 중 하나 이상은 본 발명에 따른 화합물 중 하나 이상을 포함하고, 상기 3 개 층은 청색, 녹색 및 오렌지색 또는 적색 방사를 나타낸다 (기본 구조에 대해서는, 예를 들어 WO 2005/011013 참조). 대안적으로 및/또는 추가로, 본 발명에 따른 화합물은 또한 정공-수송층 또는 사이층에 존재할 수 있다. 백색 광 생성에 있어서, 폭넓은 파장 범위에서 방사되는 개별적으로 사용되는 이미터 화합물이 또한 색으로 방사되는 복수의 이미터 화합물 대신에 적합할 수 있음에 숙지해야 한다.

[0221] 본 발명에 따라, 본 발명에 따른 화합물이 하나 이상의 인광 도펀트를 포함하는 전자 소자에 활용되는 것이 바람직하다. 여기서 화합물은 다양한 층, 바람직하게는 정공-수송층, 정공-주입층 또는 방사층에서 사용될 수 있다. 그러나, 화학식 (1) 의 화합물은 하나 이상의 형광 도펀트를 포함하는 전자 소자에 본 발명에 따라 활용될 수 있다.

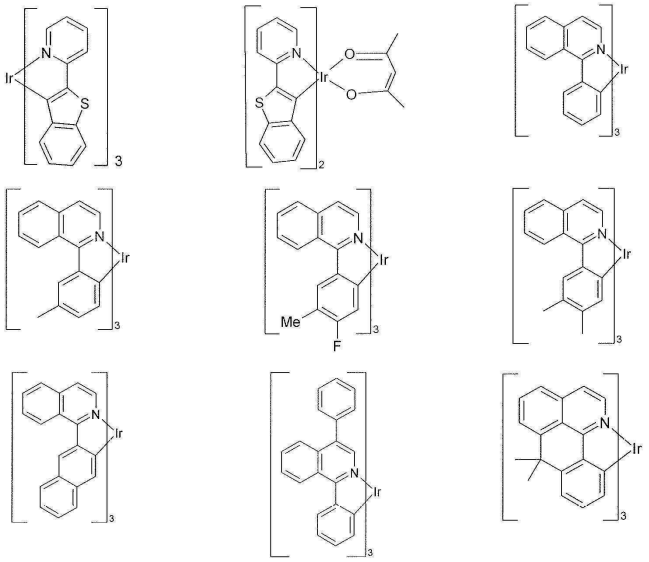
[0222] 전형적으로, 용어 인광 도펀트는, 스핀-금지된 전이, 예를 들어 여기된 삼중항 상태 또는 비교적 높은 스핀 양자수를 갖는 상태, 예를 들어 사중항 상태로부터의 전이에 의해 발광이 발생하는 화합물을 포함한다.

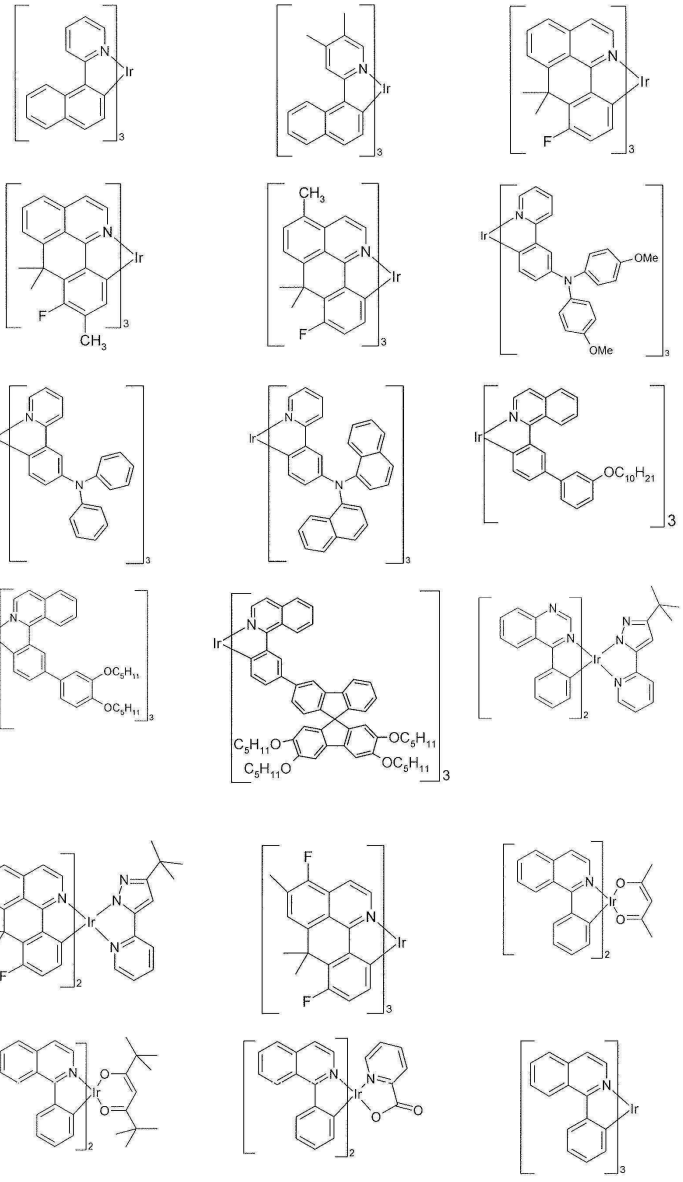
[0223] 특히, 적합한 인광 도펀트 (= 삼중항 이미터) 는 바람직하게는 가시 영역에서 적합한 여기에서 발광되는 화합물이고, 또한 20 초과, 바람직하게는 38 초과 및 84 미만, 특히 바람직하게는 56 초과 및 80 미만의 원자 번호를 갖는 원자를 하나 이상 함유한다. 사용되는 인광 이미터는 바람직하게는 구리, 몰리브덴, 텅스텐, 레늄, 루테늄, 오스뮴, 로듐, 이리듐, 팔라듐, 백금, 은, 금 또는 유로퓸을 함유하는 화합물, 특히 이리듐, 백금 또는 구리를 함유하는 화합물이다.

[0224] 본 발명의 목적을 위해, 모든 발광성 이리듐, 백금 또는 구리 착물은 인광 화합물로서 간주된다.

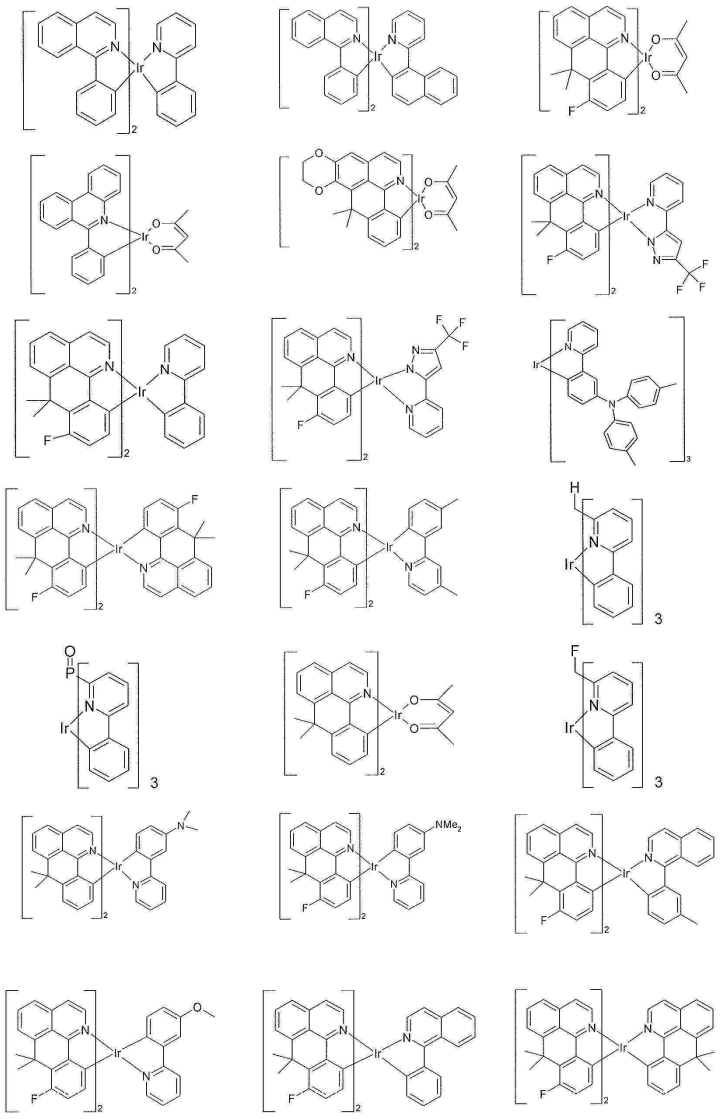
[0225] 상기 기재된 인광 도펀트의 예는 출원 WO 00/70655, WO 01/41512, WO 02/02714, WO 02/15645, EP 1191613, EP 1191612, EP 1191614, WO 05/033244, WO 05/019373 및 US 2005/0258742 에 밝혀져 있다. 일반적으로, 인광 OLED 에 대해 선행기술에 따라 사용되는 바와 같고, 유기 전계발광 소자 분야에서 당업자에 공지되어 있는 모든 인광 착물이 적합하다. 당업자는 또한 유기 전계발광 소자에서 본 발명에 따른 화합물과의 조합으로 진보성 없이 추가의 인광 착물을 활용할 수 있을 것이다.

[0226] 또한, 적합한 인광 이미터 화합물의 명시적 예를 하기 표에 나타낸다.

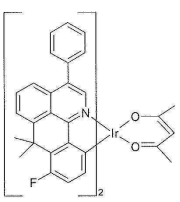
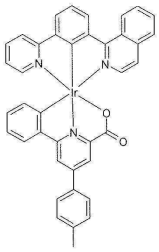
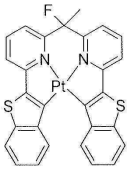
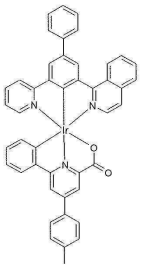
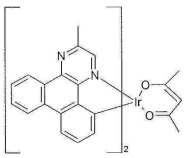
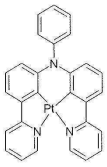
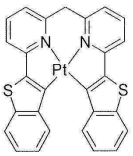
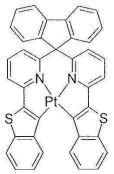
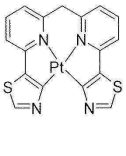
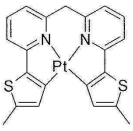
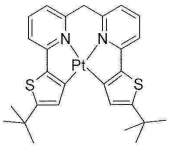
[0227] 

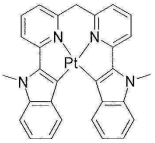
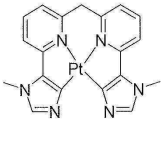
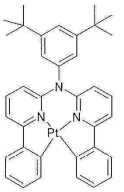


[0228]

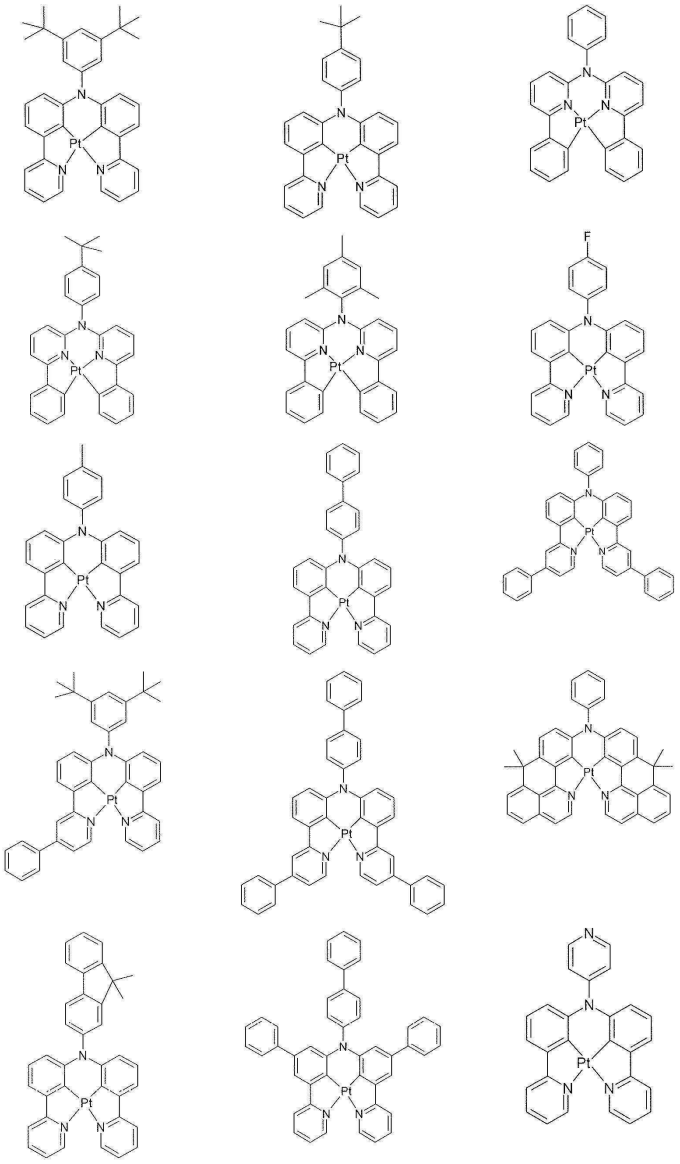


[0229]

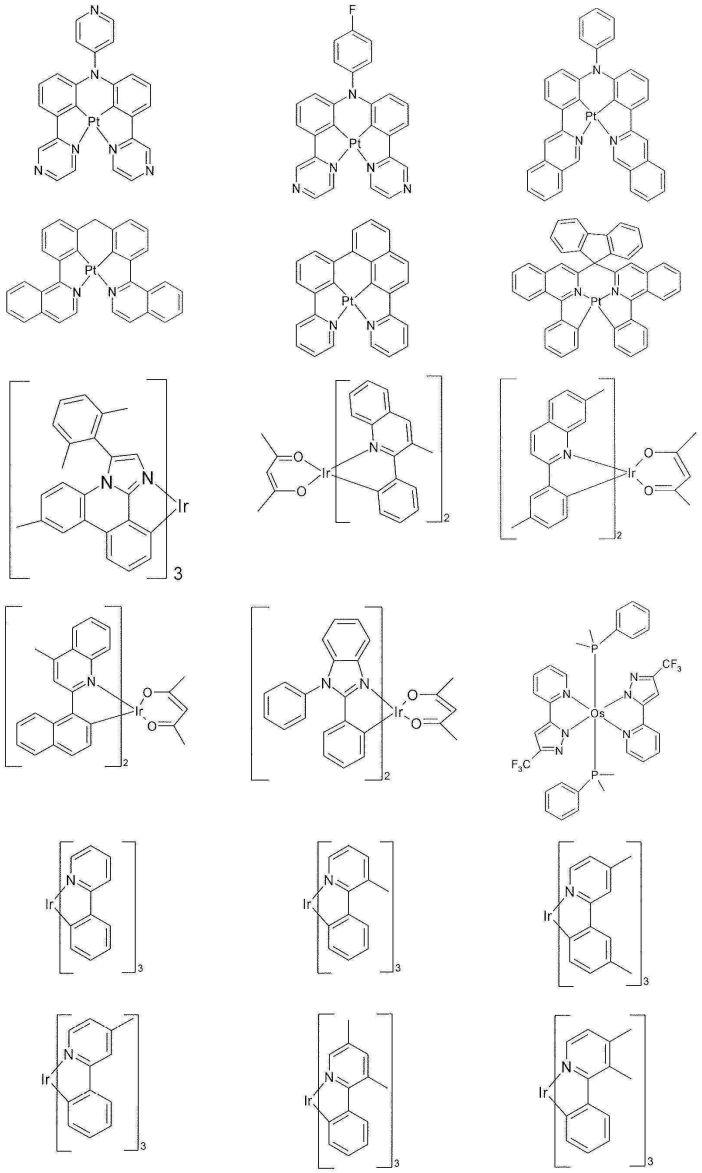












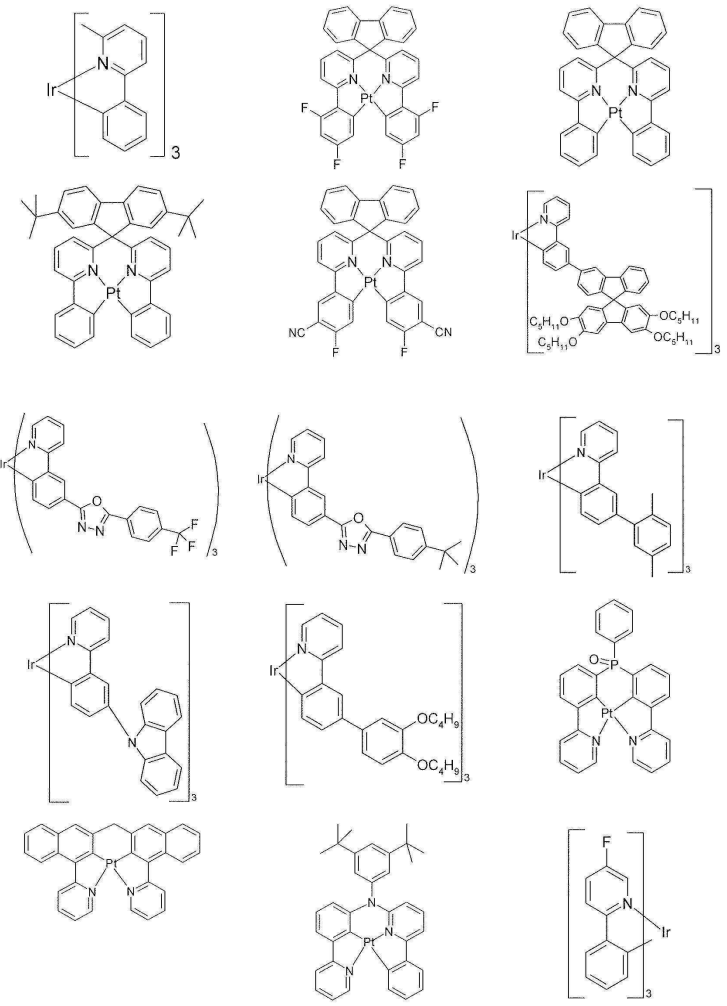
[0230]



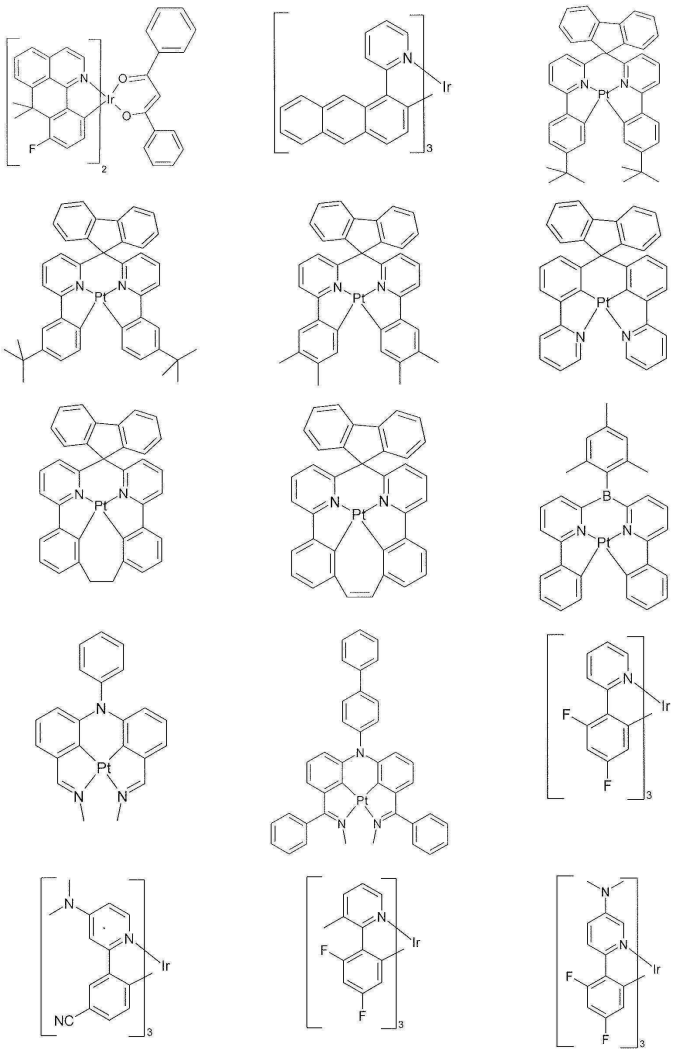
[0231]



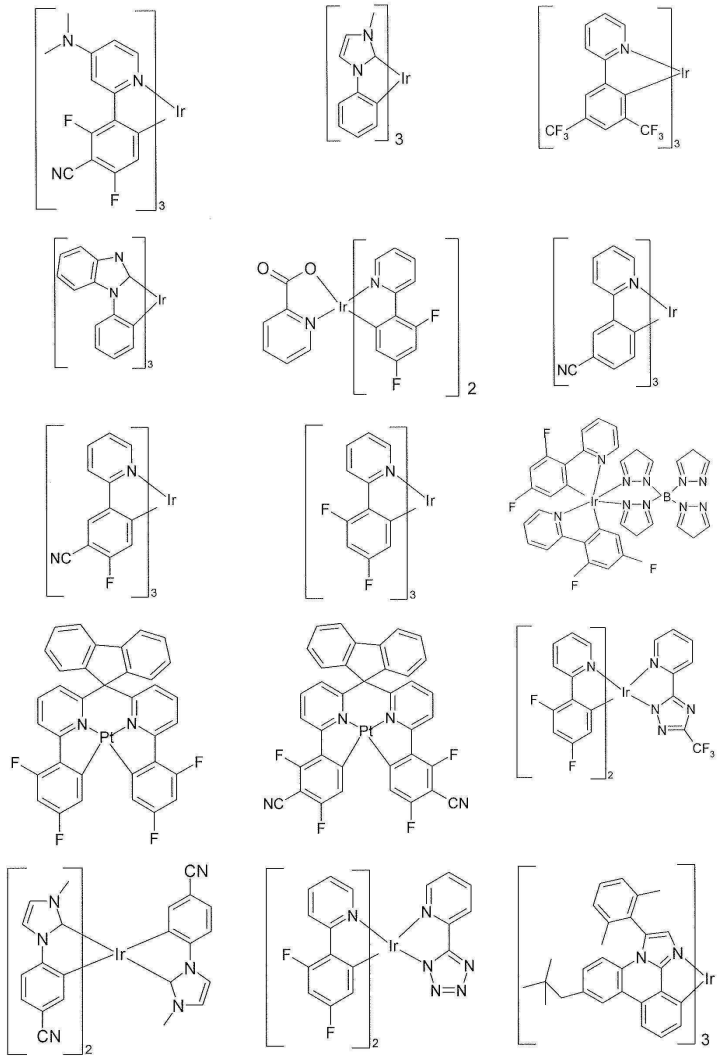
[0232]

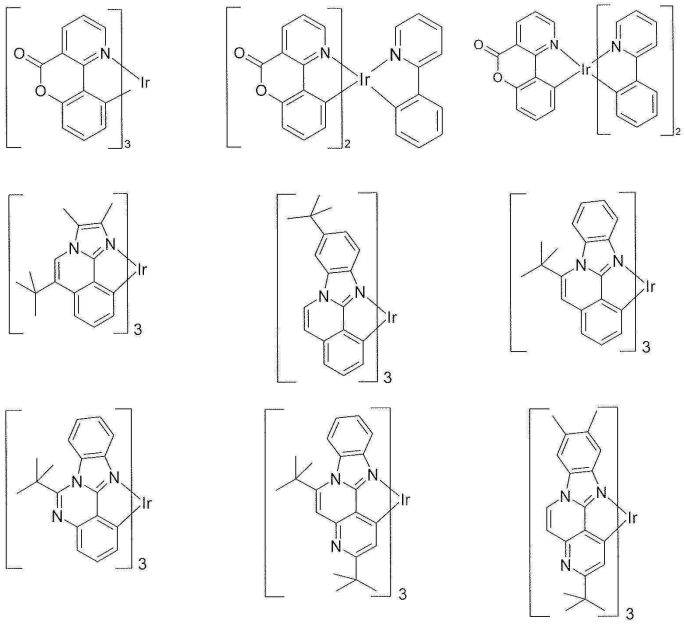


[0233]



[0234]

[0235] 

[0236] 

[0237] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 화합물은 정공-수송 물질로서 활용된다. 이후, 상기 화합물은 바람직하게는 정공-수송층 및/또는 정공-주입층에 활용된다. 본 발명의 의미에서, 정공-주입층은 애노드에 직접 인접한 층이다. 본 발명의 의미에서, 정공-수송층은 정공-주입층 및 방사층 사이에 위치하는 층이다. 정공-수송층은 방사층에 직접 인접해 있을 수 있다. 본 발명에 따른 화합물이 정공-수송 물질 또

는 정공-주입 물질로서 사용되는 경우, 이들이 전자-수용체 화합물, 예를 들어 F_4-TCNQ 또는 EP 1476881 또는 EP 1596445 에 기재된 바와 같은 화합물로 도핑되는 것이 바람직할 수 있다. 본 발명의 추가의 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 화합물은 US 2007/0092755 에 기재된 바와 같이 헥사아자트리페닐렌 유도체와의 조합으로 정공-수송 물질로서 사용된다. 여기서 헥사아자트리페닐렌 유도체는 특히 바람직하게는 분리층에 활용된다.

[0238] 일반식 (1) 의 화합물이 정공-수송층에서 정공-수송 물질로서 활용되는 경우, 상기 화합물은 정공-수송층에서 순수 물질로서, 즉 100% 의 비율로 활용될 수 있거나, 또는 정공-수송층에서 하나 이상의 추가 화합물과의 조합으로 활용될 수 있다.

[0239] 본 발명의 추가 구현예에서, 일반식 (1) 의 화합물은 방사 재료로서 사용된다. 이러한 목적을 위해, 화합물은 바람직하게는 방사 층에서 사용된다. 하나 이상의 일반식 (1) 의 화합물 이외에도, 방사 층 또한 하나 이상의 호스트 재료를 포함한다. 당업자는 창의적 단계나 어려움 없이 공지된 호스트 재료를 선택할 수 있다.

[0240] 본 발명의 추가 구현예에서, 일반식 (1) 의 화합물은 하나 이상의 도펀트, 바람직하게는 인광 도펀트와의 조합으로 매트릭스 물질로서 활용된다.

[0241] 매트릭스 물질 및 도펀트를 포함하는 시스템에서의 도펀트는 혼합물에서의 그 비율이 보다 작은 성분을 의미한다. 상응하게는, 매트릭스 물질은 혼합물에서의 그 비율이 매트릭스 물질 및 도펀트를 포함하는 시스템에서 보다 큰 성분을 의미한다.

[0242] 방사층에서 매트릭스 물질의 비율은 상기 경우에 형광 방사층에 대해 50.0 내지 99.9 부피%, 바람직하게는 80.0 내지 99.5 부피%, 특히 바람직하게는 92.0 내지 99.5 부피%, 및 인광 방사층에 대해 85.0 내지 97.0 부피% 이다.

[0243] 상응하게는, 도펀트의 비율은 형광 방사층에 대해 0.1 내지 50.0 부피%, 바람직하게는 0.5 내지 20.0 부피%, 특히 바람직하게는 0.5 내지 8.0 부피%, 및 인광 방사층에 대해 3.0 내지 15.0 부피% 이다.

[0244] 유기 전계발광 소자의 방사층은 또한 복수의 매트릭스 물질 (혼합 매트릭스 시스템) 및/또는 복수의 도펀트를 포함하는 시스템을 포함할 수 있다. 상기 경우에, 역시 도펀트는 일반적으로 시스템에서의 그 비율이 보다 작은 물질이고 매트릭스 물질은 시스템에서의 그 비율이 보다 큰 물질이다. 그러나, 개별적 경우에, 시스템에서의 개별적 매트릭스 물질의 비율은 개별적 도펀트의 비율보다 작을 수 있다.

[0245] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 화합물은 혼합-매트릭스 시스템의 성분으로서 사용된다. 혼합-매트릭스 시스템은 바람직하게는 2 또는 3 개의 상이한 매트릭스 물질, 특히 바람직하게는 2 개의 상이한 매트릭스 물질을 포함한다. 여기서, 2개의 재료 중 하나는 바람직하게는 정공 수송 특성을 갖는 재료이고 다른 하나의 재료는 전자 수송 특성을 갖는 재료이다. 그러나 혼합 매트릭스 성분의 원하는 전자 수송 및 정공 수송은 원칙적으로 조합될 수 있거나 단일 혼합 매트릭스 성분에서 완전하게 사용되며, 이때 추가의 혼합 매트릭스 성분(들)은 기타 기능을 충족시킨다. 여기서 2 개의 상이한 매트릭스 물질은 1:50 내지 1:1, 바람직하게는 1:20 내지 1:1, 특히 바람직하게는 1:10 내지 1:1 및 매우 특히 바람직하게는 1:4 내지 1:1 의 비율로 존재할 수 있다. 혼합 매트릭스 시스템은 인광 유기 전계발광 소자에서 사용되는 것이 바람직하다. 혼합 매트릭스 시스템에 대한 더욱 정확한 정보는 특히 출원 WO 2010/108579 에서 제공된다.

[0246] 혼합된-매트릭스 시스템은 하나 이상의 도판트, 바람직하게는 하나 이상의 인광 도판트를 포함할 수 있다. 일반적으로, 혼합된-매트릭스 시스템는 바람직하게는 인광 유기 전계발광 소자에서 사용된다.

[0247] 본 발명에 따른 화합물과 조합하여 혼합 매트릭스 시스템의 매트릭스 성분으로서 사용될 수 있는 적합한 매트릭스 재료는 하기 나타내는 인광 도판트용의 바람직한 매트릭스 재료 또는 형광 도판트용의 바람직한 매트릭스 재료에서 선택되며, 이는 혼합-매트릭스 시스템에서 사용되는 유형이 무엇인지에 의존적이다.

[0248] 혼합 매트릭스 시스템에 사용되는 바람직한 인광 도판트는 상기 표에 나타낸 인광 도판트이다.

[0249] 본 발명에 따른 소자에서 관련 기능으로 바람직하게는 사용되는 재료는 하기 나타낸다.

[0250] 바람직한 형광 도펀트는 아릴아민의 부류로부터 선택된다. 본 발명의 의미에서, 아릴아민 또는 방향족 아민은 질소에 직접 결합된 3 개의 치환 또는 미치환된 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 함유하는 화합물을 의미한다. 이들 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 중 하나 이상은 바람직하게는 축합 고리계, 특히 바람직하게

는 14 개 이상의 방향족 고리 원자를 갖는 축합 고리계이다. 그 바람직한 예는 방향족 안트라센아민, 방향족 안트라센디아민, 방향족 피렌아민, 방향족 피렌디아민, 방향족 크리센아민 또는 방향족 크리센디아민이다. 방향족 안트라센아민은 하나의 디아릴아미노기가 안트라센기에 바람직하게는 9-위치에서 직접 결합되는 화합물을 의미한다. 방향족 안트라센디아민은 2 개의 디아릴아미노기가 안트라센기에 바람직하게는 9,10-위치에서 직접 결합되는 화합물을 의미한다. 방향족 피렌아민, 피렌디아민, 크리센아민 및 크리센디아민이 이와 유사하게 정의되며, 이때 디아릴아미노기는 피렌에 바람직하게는 1-위치 또는 1,6-위치에서 결합된다.

[0251] 바람직하게는 형광 도펀트에 적합한 매트릭스 물질은 다양한 부류의 물질로부터의 물질이다. 바람직한 매트릭스 물질은 올리고아릴렌의 부류 (예를 들어, EP 676461 에 따른 2,2',7,7'-테트라페닐스피로바이플루오렌, 또는 디나프틸안트라센), 특히 축합 방향족기를 함유하는 올리고아릴렌, 올리고아릴렌비닐렌 (예를 들어, EP 676461 에 따른 DPVBi 또는 스피로-DPVBi), 폴리포달 금속 착물 (예를 들어, WO 2004/081017 에 따름), 정공-전도성 화합물 (예를 들어, WO 2004/058911 에 따름), 전자-전도성 화합물, 특히 케톤, 포스핀 산화물, 술폭시드 등 (예를 들어, WO 2005/084081 및 WO 2005/084082 에 따름), 회전장애이성질체 (예를 들어, WO 2006/048268 에 따름), 보론산 유도체 (예를 들어, WO 2006/117052 에 따름) 또는 벤즈안트라센 (예를 들어, WO 2008/145239 에 따름) 으로부터 선택된다. 특히 바람직한 매트릭스 물질은 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센 및/또는 피렌, 또는 이들 화합물의 회전장애이성질체, 올리고아릴렌비닐렌, 케톤, 포스핀 산화물 및 술폭시드를 포함하는, 올리고아릴렌의 부류로부터 선택된다. 매우 특히 바람직한 매트릭스 물질은 안트라센, 벤즈안트라센, 벤조페난트렌 및/또는 피렌, 또는 이들 화합물의 회전장애이성질체를 포함하는 올리고아릴렌의 부류로부터 선택된다. 본 발명의 의미에서, 올리고아릴렌은 3 개 이상의 아릴 또는 아릴렌기가 서로 결합되는 화합물을 의미한다.

[0252] 인광 도펀트에 바람직한 매트릭스 물질은 본 발명에 따른 화합물 이외에도 카르바졸 유도체 (예를 들어, CBP (N,N-비스카르바졸릴바이페닐) 또는 WO 2005/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527 또는 WO 2008/086851 에 따른 화합물), 트리아릴아민, 아자카르바졸 (예를 들어, EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160 에 따름), 인돌로카르바졸 유도체 (예를 들어, WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따름), 케톤 (예를 들어, WO 2004/093207 또는 WO 2010/006680 에 따름), 포스핀 산화물, 술폭시드 및 술폰 (예를 들어, WO 2005/003253 에 따름), 올리고페닐렌, 방향족 아민 (예를 들어, US 2005/0069729 에 따름), 쌍극성 매트릭스 물질 (예를 들어, WO 2007/137725 에 따름), 실란 (예를 들어, WO 2005/111172 에 따름), 아자보롤 또는 보론 에스테르 (예를 들어, WO 2006/117052 에 따름), 트리아진 유도체 (예를 들어, WO 2010/015306, WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따름), 아연 착물 (예를 들어, WO 2009/062578 에 따름), 알루미늄 착물 (예를 들어, BAlq), 디아자실롤 및 테트라아자실롤 유도체 (예를 들어, WO 2010/054730 에 따름), 인데노카르바졸 유도체 (예를 들어, WO 2010/136109 및 WO 2011/000455 에 따름) 또는 디아자포스폴 (예를 들어, WO 2010/054730 에 따름) 이다.

[0253] 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자의 정공-주입 또는 정공-수송층, 또는 전자-수송층에 사용될 수 있는 바와 같은 적합한 전하-수송 물질은, 예를 들어 [Y. Shirota et al., *Chem. Rev.* 2007, *107(4)*, 953-1010] 에 개시된 화합물 또는 선행기술에 따른 이들 층에 활용되는 바와 같은 기타 물질이다.

[0254] 캐소드는 바람직하게는 낮은 일 함수를 갖는 금속, 금속 합금 또는 다양한 금속, 예를 들어 알칼리 토금속, 알칼리 금속, 주족 금속 또는 란탄족 (예를 들어, Ca, Ba, Mg, Al, In, Mg, Yb, Sm 등) 을 포함하는 다층 구조를 포함한다. 또한 적합한 것은 알칼리 금속 또는 알칼리 토금속 및 은을 포함하는 합금, 예를 들어 마그네슘 및 은을 포함하는 합금이다. 다층 구조의 경우, 비교적 높은 일 함수를 갖는 추가의 금속, 예를 들어 Ag 또는 Al 이 또한 상기 금속에 추가로 사용될 수 있는데, 상기 경우에 금속의 조합, 예를 들어 Ca/Ag, Ba/Ag 또는 Mg/Ag 가 일반적으로 사용된다. 금속성 캐소드와 유기 반도체 사이에 높은 유전 상수를 갖는 물질의 얇은 사이층을 도입시키는 것이 또한 바람직할 수 있다. 이러한 목적에 적합한 것은, 예를 들어 알칼리 금속 플루오라이드 또는 알칼리 토금속 플루오라이드, 뿐만 아니라 상응하는 산화물 또는 카르보네이트 (예를 들어, LiF, Li_2O, BaF_2, MgO, NaF, CsF, Cs_2CO_3 등) 이다. 또한, 리튬 퀴놀리네이트 (LiQ) 가 이러한 목적을 위해 사용될 수 있다. 상기 층의 층 두께는 바람직하게는 0.5 내지 5 nm 이다.

[0255] 애노드는 바람직하게는 높은 일 함수를 갖는 물질을 포함한다. 상기 애노드는 바람직하게는 진공에 비해 4.5 eV 초과의 일 함수를 갖는다. 이러한 목적에 적합한 것은 한편으로는 높은 산화환원 전위를 갖는 금속, 예를 들어 Ag, Pt 또는 Au 이다. 다른 한편으로는, 금속/금속 산화물 전극 (예를 들어, Al/Ni/NiO_x, Al/PtO_x) 이 또한 바람직할 수 있다. 일부 적용을 위해, 유기 물질 (유기 태양 전지) 의 조사

(irradiation) 또는 광의 커플링-아웃 (coupling-out) (OLED, O-레이저) 을 촉진하기 위해 전극 중 하나 이상은 투명 또는 부분 투명해야 한다. 여기서 바람직한 애노드 물질은 전도성 혼합 금속 산화물이다. 인듐 주석 산화물 (ITO) 또는 인듐 아연 산화물 (IZO) 이 특히 바람직하다. 전도성의 도핑된 유기 물질, 특히 전도성의 도핑된 중합체가 또한 바람직하다.

[0256] 소자는 적절히 (적용에 따라) 접촉부가 제공되고 최종적으로 밀봉되어 구조화되는데, 이는 본 발명에 따른 소자의 수명이 물 및/또는 공기의 존재 하에 단축되기 때문이다.

[0257] 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자는 하나 이상의 층이 승화 공정에 의해 코팅되는 것을 특징으로 하는데, 여기서 물질은 10^{-5} mbar 미만, 바람직하게는 10^{-6} mbar 미만의 초기 압력에서 진공 승화 장치에서 증착에 의해 적용된다. 그러나, 여기서 또한 초기 압력이, 예를 들어 10^{-7} mbar 미만으로 훨씬 더 낮을 수 있다.

[0258] 마찬가지로, OVPD (유기 기상 침착) 방법 또는 담체-기체 승화에 의해 하나 이상의 층이 코팅되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 소자가 바람직한데, 여기서 물질은 10^{-5} mbar 내지 1 bar 의 압력에서 적용된다. 이러한 방법의 특별한 경우는 OVJP (유기 증기 제트 인쇄) 방법인데, 여기서 물질은 노즐을 통해 직접 적용됨으로써 구조화된다 (예를 들어, M. S. Arnold *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **2008**, *92*, 053301).

[0259] 또한, 예를 들어 스핀 코팅에 의해, 또는 임의의 목적하는 인쇄 방법, 예를 들어 스크린 인쇄, 플렉소그래픽 (flexographic) 인쇄, 노즐 인쇄 또는 오프셋 (offset) 인쇄, 그러나 특히 바람직하게는 LITI (광 유도 열 이미징, 열 전사 인쇄) 또는 잉크젯 인쇄에 의해 용액으로부터 하나 이상의 층이 제조되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 식 (1) 의 가용성 화합물이 이러한 목적에 필요하다. 상기 화합물의 적합한 치환을 통해 높은 용해도가 달성될 수 있다.

[0260] 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자의 제조를 위해, 하나 이상의 층을 용액으로부터 및 하나 이상의 층을 승화 방법에 의해 적용하는 것이 또한 바람직하다.

[0261] 본 발명에 따른 하나 이상의 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자는 디스플레이에, 조명 적용물에서의 광원으로서, 및 의료 및/또는 미용 적용물에서의 광원으로서 (예를 들어, 광 치료요법) 활용될 수 있다.

[0262] 일반식 (1) 의 화합물을 포함하는 소자는 매우 다양한 방식으로 사용될 수 있다. 따라서, 예를 들어 하나 이상의 일반식 (1) 의 화합물을 포함하는 전계발광 소자는 텔레비젼, 핸드폰, 컴퓨터 및 카메라용의 디스플레이에서 사용될 수 있다. 그러나, 소자는 또한 광 적용에 사용될 수 있다. 또한, 전계발광 소자, 예를 들어 하나 이상의 일반식 (1) 의 화합물을 포함하는 OLED 또는 OLEC 에서 의약 또는 미용 분야에서 광선요법에 사용될 수 있다. 따라서, 많은 질병 (건선, 아토피 피부염, 염증, 여드름, 피부암, 등) 이 치료될 수 있거나, 피부 주름, 피부 적색화 및 피부 노화가 예방되거나 감소될 수 있다. 또한, 광-방출 소자는 음료, 음식물 또는 식품을 신선하게 유지하기 위해 또는 장비 (예를 들어 의료용 장비) 를 살균하기 위해 이용될 수 있다.

[0263] 본 발명에 따른 화합물 및 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자는 종래 기술에 비해 하기의 놀라운 이점으로 인해 구분된다:

[0264] 1. 본 발명에 따른 화합물은 특히 이의 고 정공 이동성으로 인해 전자 소자, 예컨대, 예를 들어, 유기 전계발광 소자에서 정공-수송 층 또는 정공-주입 층에 사용되는데 매우 적합하다.

[0265] 2. 본 발명에 따른 화합물은 상대적으로 낮은 승화 온도, 높은 온도 안정성 및 높은 산화 안정도 및 높은 유리 전이 온도를 가지며, 이는 용액 또는 기체 상으로부터의 가공성을 위해 유리한 것이고 또는 전자 소자에서 사용되는데 유리한 것이다.

[0266] 3. 본 발명에 따른 화합물은, 전자 소자에서의 사용시, 특히 정공 수송 또는 정공 주입 재료로서 사용시, 높은 효율, 낮은 작동 전압 및 장기간의 수명을 생성시킨다.

[0267] 본 발명에 기술되는 구현예의 변화가 본 발명의 범주 이내에 속하는 점을 명심한다. 본 발명에서 논의되는 각각의 특징은 달리 배제되지 않는 한 동일하고 등가의 또는 유사한 목적을 제공하는 대안적인 특징에 의해 대체될 수 있다. 따라서, 본 발명에서 개시된 각각의 특징은 달리 지시되지 않는 한, 등가의 또는 유사한 특징으로서 일반적인 시리즈의 예로서 간주된다.

[0268] 본 발명의 모든 특징은, 특정 특징 및/또는 단계가 상호간에 배제되지 않는 한 서로 임의의 방식으로 조합될 수

있다. 마찬가지로, 비-필수적인 조합의 특징은 별도로 사용될 수 있다 (조합이 아님).

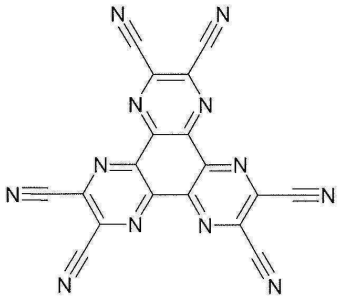
[0269] 많은 특징, 및 본 발명의 바람직한 구현예는 본 발명 그 자체이고 본 발명의 구현예의 일부로서만 단지 간주됨을 명심한다. 이들 특징에 대해서, 청구되는 발명에 대해 대안적으로서 또는 이에 대한 부가적인 것으로서 독립적 보호가 이루어진다.

[0270] 본 발명에 개시된 기술적 작용에 대한 교시는 예와 조합되어 요약될 수 있다.

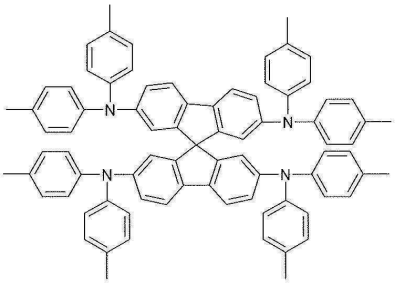
[0271] 본 발명은 하기 사용예에 의해 더 상세히 설명되며, 이때 본 발명은 실시예 범위로 제한되지는 않는다

[0272] **실시예**

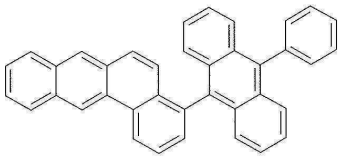
[0273] **재료**



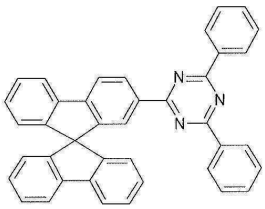
HIL1



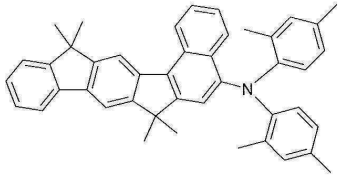
HIL2



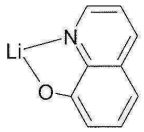
H1



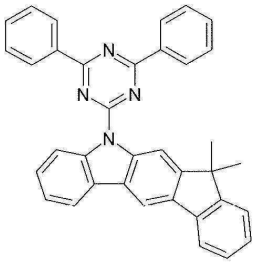
ETM1



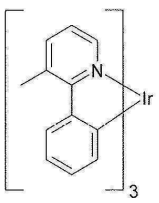
SEB1



LiQ

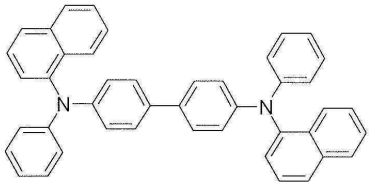


H2

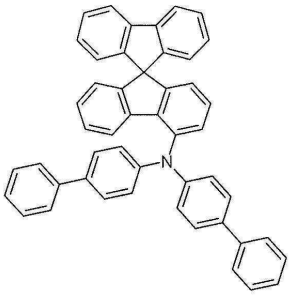


Irpy

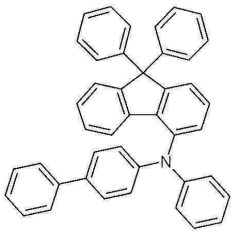
[0274]



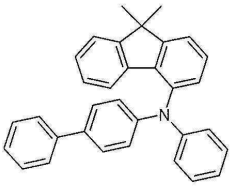
NPB



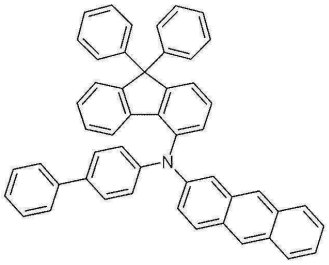
HTMV1



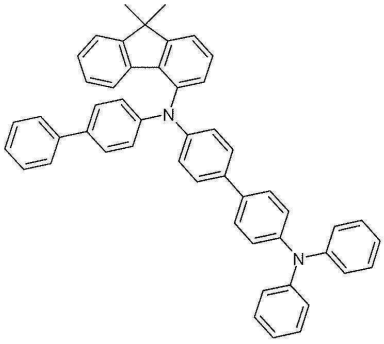
HTMV2



HTMV3

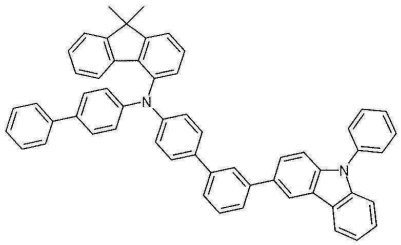


HTMV4

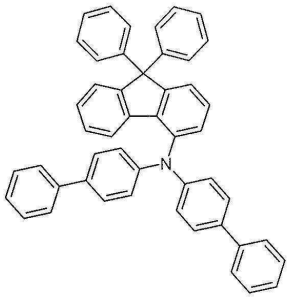


HTMV5

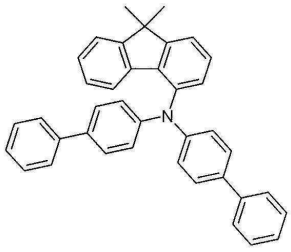
[0275]



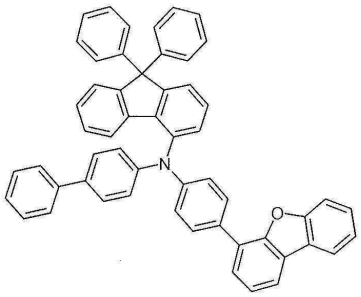
HTMV6



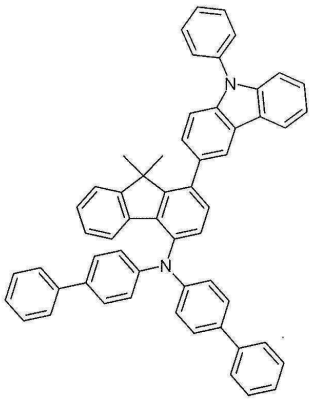
(**1-1**)



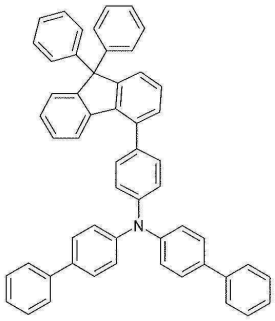
(**1-4**)



(**1-7**)

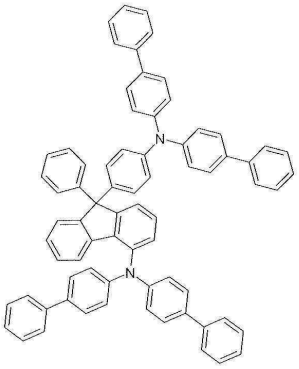


(**5-1**)

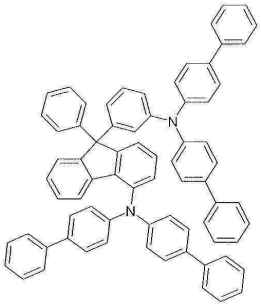


(**4-1**)

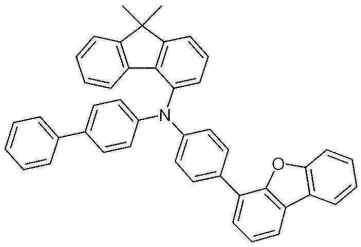
[0276]



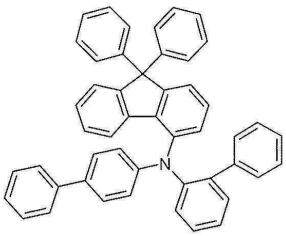
(1-12)



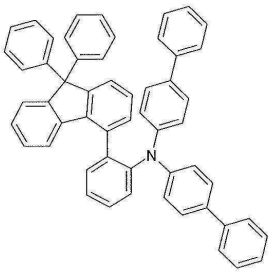
(1-13)



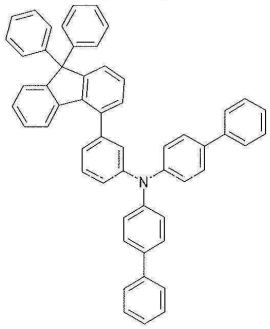
(1-14)



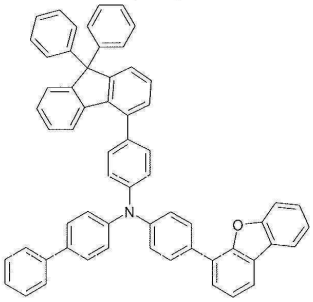
(1-15)



(6-3)

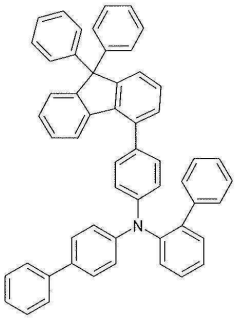


(6-2)

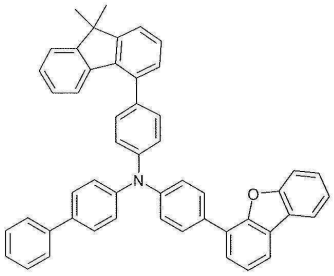


(6-1)

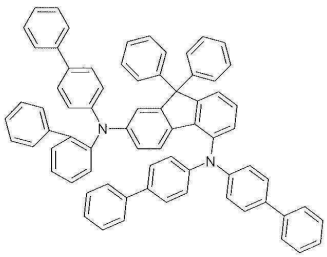
[0277]



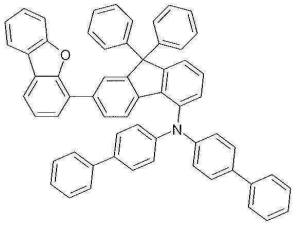
(6-4)



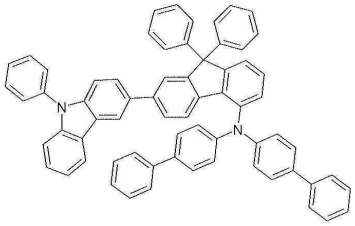
(6-5)



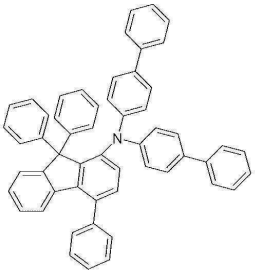
(8-1)



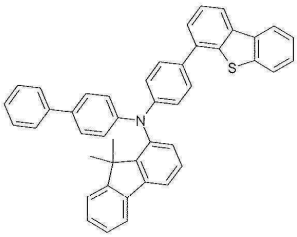
(7-1)



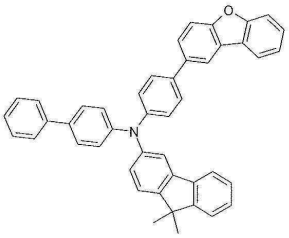
(7-2)



(9-2)

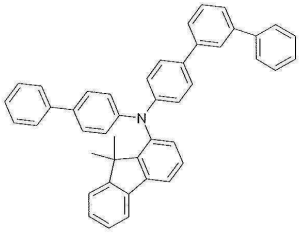


(2-7)

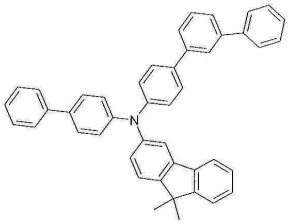


(2-8)

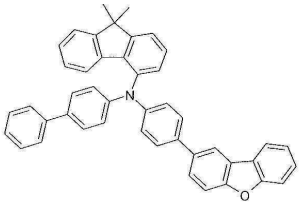
[0278]



(2-10)



(2-9)



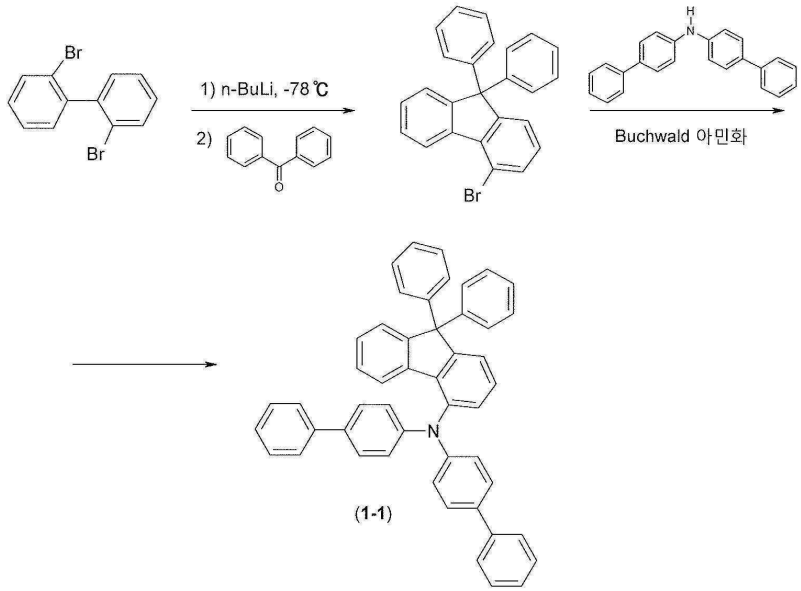
(1-17)

[0279]

[0280] 재료 HIL1, HIL2 (EP 0676461), H1 (WO 2008/145239), H2 (WO 2010/136109), ETM1 (WO 2005/053055), SEB1 (WO 2008/006449), LiQ, Irpy 및 NPB 는 당업자에게 익히 공지되어 있는 것이다. 화합물 HTMV1 내지 HTMV6 은 비교 화합물이며, 이는 실시예 1 에 기술된 방법과 유사하게 제조될 수 있다. 화합물 (1-1), (1-4), (1-7) (5-1), (4-1), (1-12), (1-13), (1-14), (1-15), (6-3), (6-2), (6-1), (6-4), (6-5), (8-1), (7-2), (7-1), (9-2), (2-7), (2-8) 및 (1-17) 은 본 발명에 따른 것이다.

[0281] 실시예 1

[0282] **화합물 비스바이페닐-4-일-(9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)-아민 (1-1) 및 화합물 (1-2) 내지 (1-12) 의 합성**



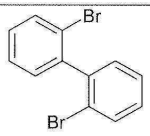
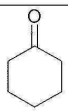
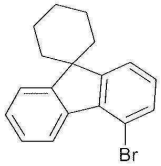
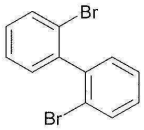
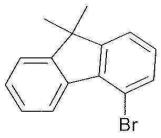
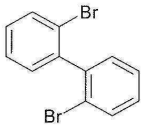
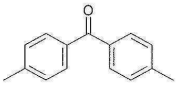
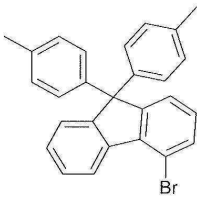
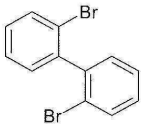
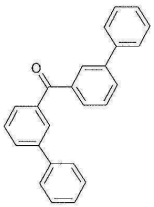
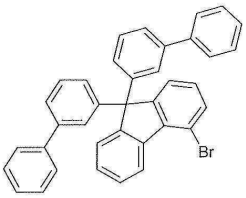
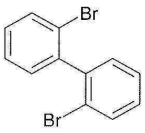
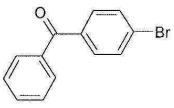
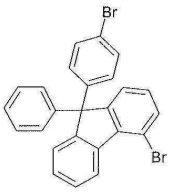
[0283]

[0284] **4-브로모-9,9-디페닐-9H-플루오렌**

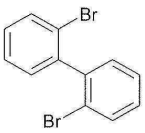
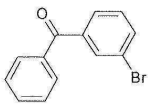
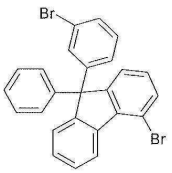
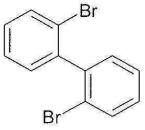
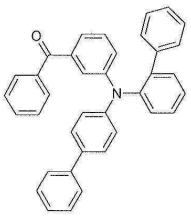
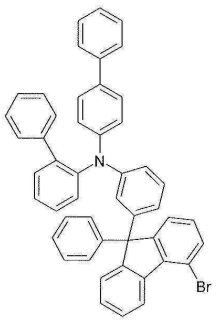
[0285] 37 g (152 mmol) 의 2,2'-디브로모바이페닐을 가열에 의해 건조된 플라스크에서 300 ml 의 건조된 THF 에 용해시켰다. 반응 혼합물을 -78℃ 로 냉각시켰다. 헥산 (119 mmol) 중 75 ml 의 n-BuLi 15% 용액을 이러한 온도에서 천천히 적가하였다 (기간: 약 1 시간). 배치를 -70℃ 에서 추가 1 시간 동안 교반하였다. 21.8 g 의 벤조페논 (119 mmol) 을 100 ml 의 THF 에 이어서 용해시키고 -70℃ 에서 적가하였다. 첨가가 완료되었을 때, 반응 혼합물이 실온으로 천천히 가온되며, NH_4Cl 을 이용하여 켄칭시키고 회전 증발기에서 후속 증발시켰다. 510 ml 의 아세트산을 증발된 용액에 조심스럽게 첨가하고, 100 ml 의 훈연 HCl 을 이어서 첨가하였다. 배치를 75℃ 로 가열시키고 이러한 온도에서 4 시간 동안 유지하였다. 백색 고체를 이 기간 동안 침전시켰다. 이어서 배치를 실온으로 냉각시키고, 침전된 고체를 흡인 여과하고 메탄올로 세정하였

다. 잔사를 진공 하에 40℃ 에서 건조시켰다. 수율: 33.2 g (83 mmol) (이론치의 70%).

[0286] 하기 브롬화된 화합물을 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			78%
			70%
			82%
			85%
			80%

[0287]

			85%
			77%

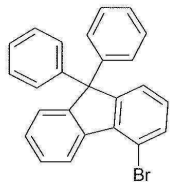
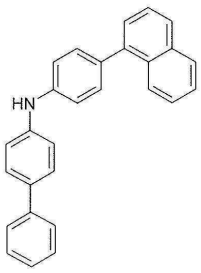
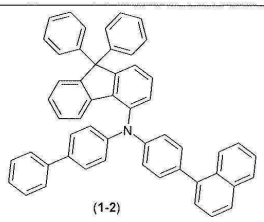
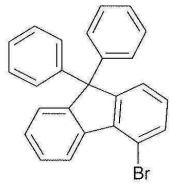
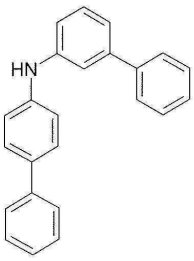
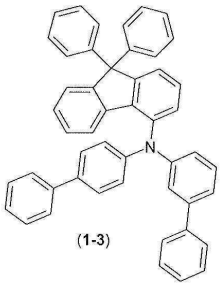
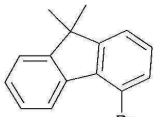
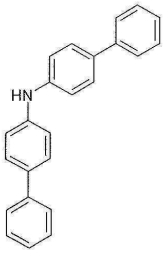
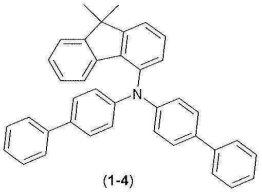
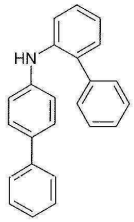
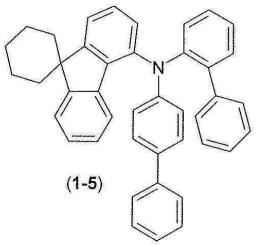
[0288]

[0289] **비스바이페닐-4-일-(9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)-아민 (1-1)**

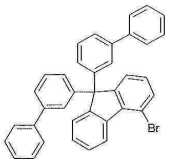
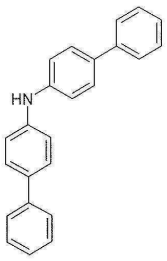
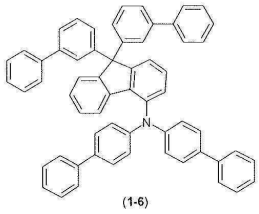
[0290] 17 g 의 비스바이페닐-4-일아민 (53 mmol) 및 23.1 g 의 4-브로모-9,9-디페닐-9H-플루오렌 (58 mmol) 을

500 ml 의 톨루엔에 용해시키고: 용액을 탈기시키고 N_2 로 포화시켰다. 5.3 ml (5.3 mmol) 의 1 M 트리-tert-부틸포스핀 용액 및 0.6 g (2.65 mmol) 의 팔라듐(II)-아세테이트를 이어서 첨가하였다. 12.7 g 의 나트륨 tert-부톡시드 (132.23 mmol) 를 이어서 첨가하였다. 반응 혼합물을 보호성 분위기 하에서 3 시간 동안 비등 가열시켰다. 이어서 혼합물을 톨루엔과 물 사이에서 구획화하고, 유기 상을 물로 3회 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고 회전 증발기에서 증발시켰다. 톨루엔을 이용하여 실리카 겔을 통해 미정제 생성물의 여과 후, 남아 있는 잔사를 헵탄/톨루엔으로부터 재결정화시키고 최종적으로 고 진공 하에서 승화시켰다. 순도: 99.9%. 수율: 29 g (이론치의 87%).

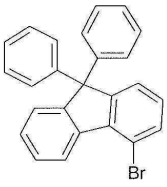
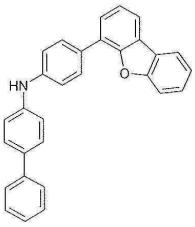
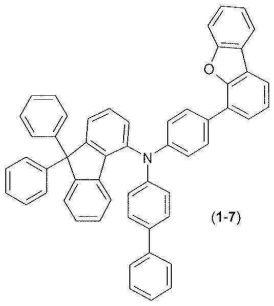
[0291] 하기 화합물 (1-2) 내지 (1-17) 을 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
		 (1-2)	78%
		 (1-3)	83%
		 (1-4)	92%
		 (1-5)	88%

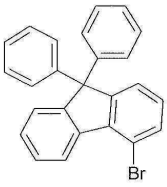
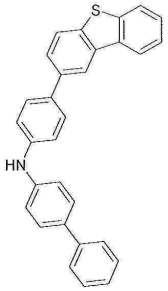
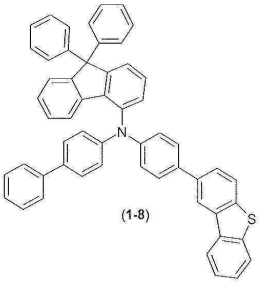
[0292]




(1-6)

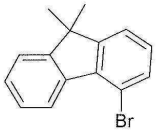
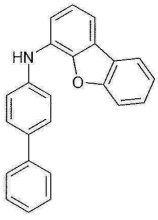
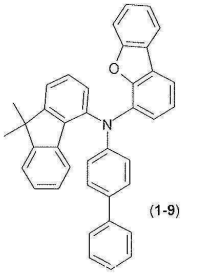
77%




(1-7)

75%

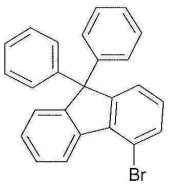
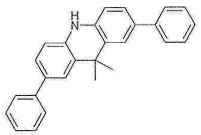
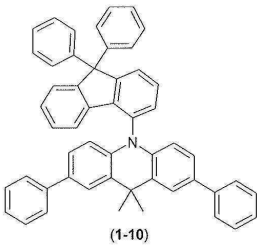



(1-8)

80%

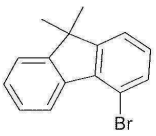
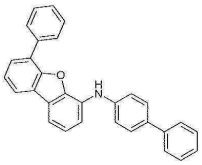
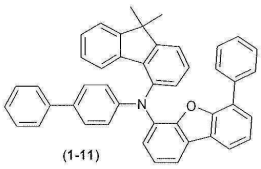



(1-9)

77%

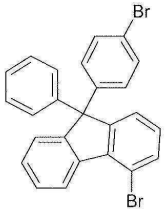
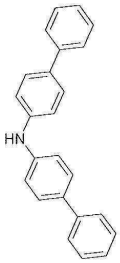
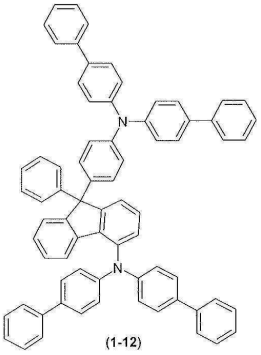
[0293]




(1-10)

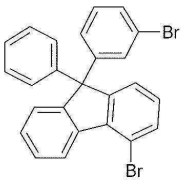
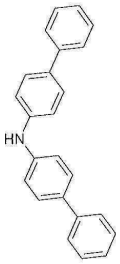
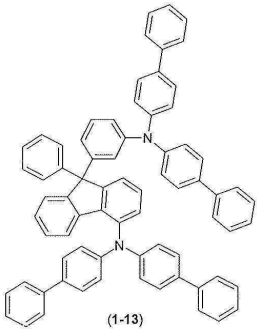
71%




(1-11)

70%

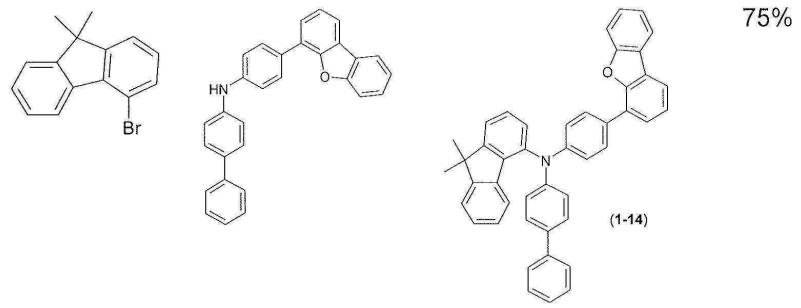


2 equiv.

(1-12)

75%

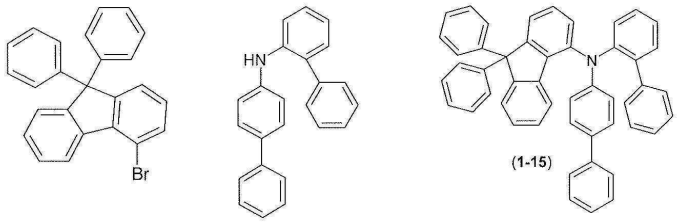


2 equiv.

(1-13)

77%

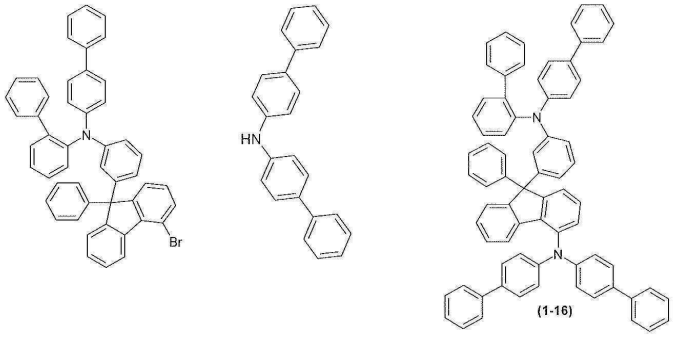
[0294]



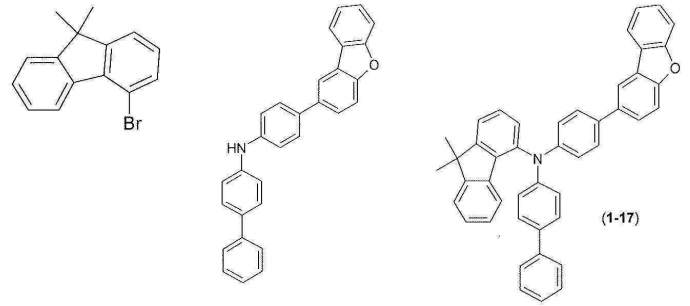
75%



85%



79%

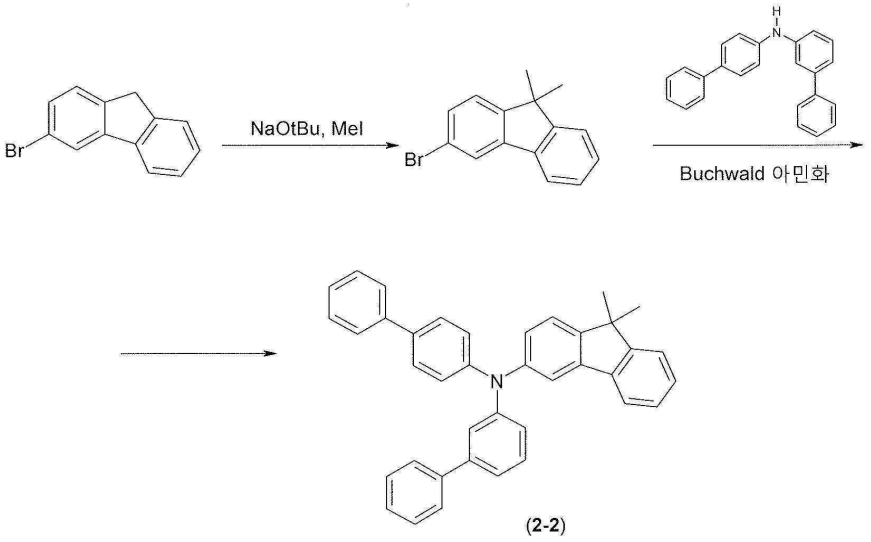


72%

[0295]

[0296] 실시예 2

[0297] 화합물 바이페닐-3-일바이페닐-4-일-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-3-일)-아민 (2-1) 및 화합물 (2-2) 내지 (2-10)의 합성

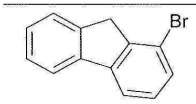
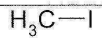
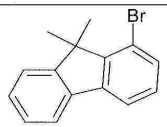
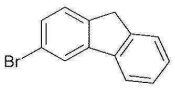
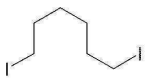
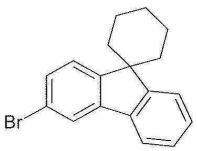


[0298]

[0299] **3-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌**

[0300] 29.5 g (120 mmol) 의 3-브로모-9H-플루오렌 (Tetrahedron Letters, 51, 37, 4894-4897; 2010) 가열에 의해 건조된 플라스크에서 220 ml 의 건조된 DMSO 에 용해시켰다. 34.7 g (361 mmol) 의 NaO^tBu 를 실온에서 첨가하였다. 현탁액을 65℃ 의 내부 온도로 만들었다. DMSO (50 ml) 중 22.5 ml (361 mmol) 의 요오도메탄 용액을, 내부 온도가 65℃ 를 초과하지 않도록 (기간: 약 30 분) 하는 속도로 이러한 온도에서 적가하였다. 배치를 추가 30 분 동안 65℃ 의 내부 온도에서 유지하고, 이어서 400 ml 의 빙냉 수성 NH_4OH 용액 (1/1, v/v) 에 붓고 약 20 분 동안 교반하였다. 침전된 고체를 흡인 여과시키고 약 200 ml 의 H_2O 및 메탄올로 연속 세척하였다. 수율: 31 g (114 mmol) (이론치의 95%).

[0301] 하기 브롬화된 화합물을 유사하게 제조하였다:

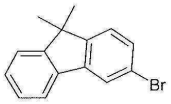
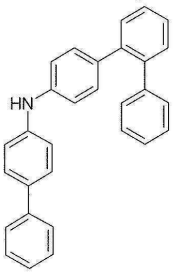
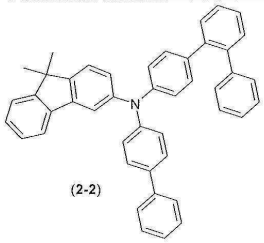
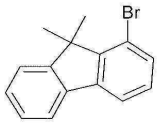
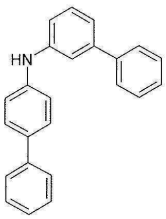
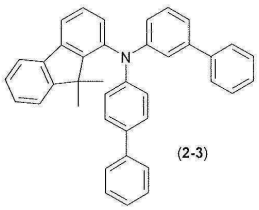
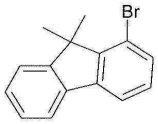
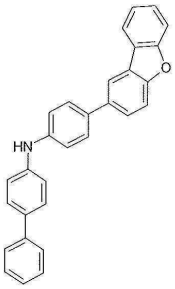
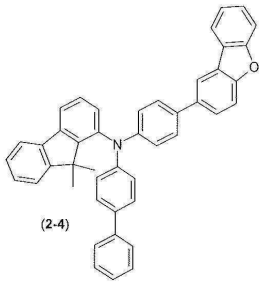
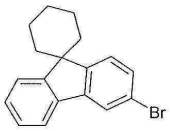
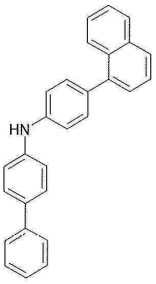
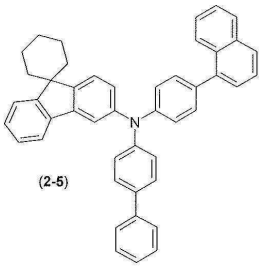
출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			78%
			85%

[0302]

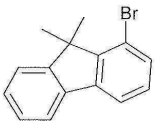
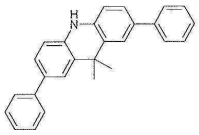
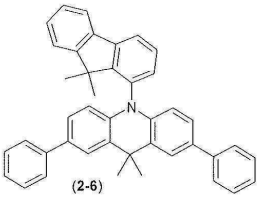
[0303] **바이페닐-3-일바이페닐-4-일-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-3-일)-아민 (2-1)**

[0304] 30 g 의 바이페닐-3-일바이페닐-4-일아민 (93.4 mmol) 및 25.5 g 의 3-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌 (93.4 mmol) 을 600 ml 의 톨루엔에 용해시키고; 용액을 탈기시키고 N_2 로 포화시켰다. 3.2 g (3.73 mmol) 의 트리-tert-부틸포스핀 및 0.42 g (1.87 mmol) 의 팔라듐(II) 아세테이트를 이어서 첨가하였다. 13.9 g 의 나트륨 tert-부톡시드 (140 mmol) 를 이어서 첨가하였다. 반응 혼합물을 보호성 분위기 하에서 5 시간 동안 비등 가열시켰다. 이어서, 혼합물을 톨루엔과 물 사이에서 구획화하고, 유기 상을 물로 3회 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고 회전 증발기에서 증발시켰다. 톨루엔을 이용하여 실리카 겔을 통해 미정제 생성물의 여과 후, 남아 있는 잔사를 헵탄/톨루엔으로부터 재결정화시키고 최종적으로 고 진공 하에서 승화시켰다. 순도: 99.9%. 수율: 37.8 g (이론치의 79%).

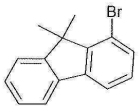
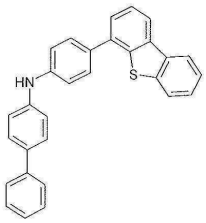
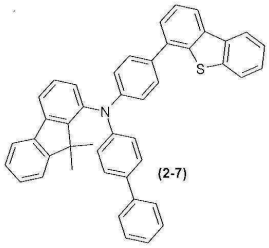
[0305] 하기 화합물 (2-2) 내지 (2-10) 을 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
		 (2-2)	78%
		 (2-3)	82%
		 (2-4)	80%
		 (2-5)	92%

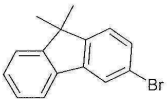
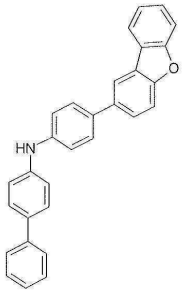
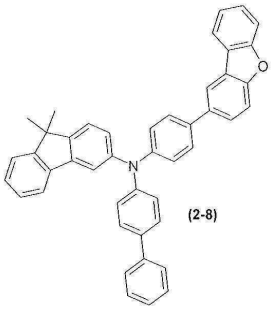
[0306]

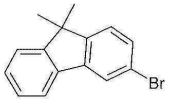
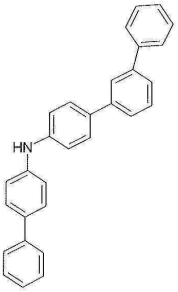
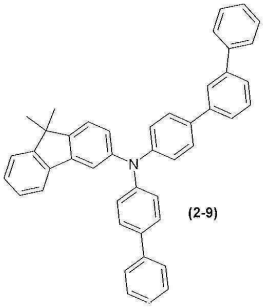
75%

67%

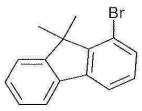
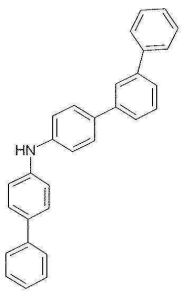
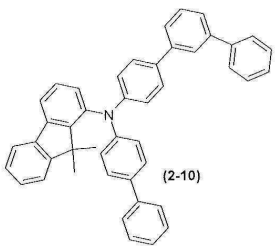




73%

70%

[0307]

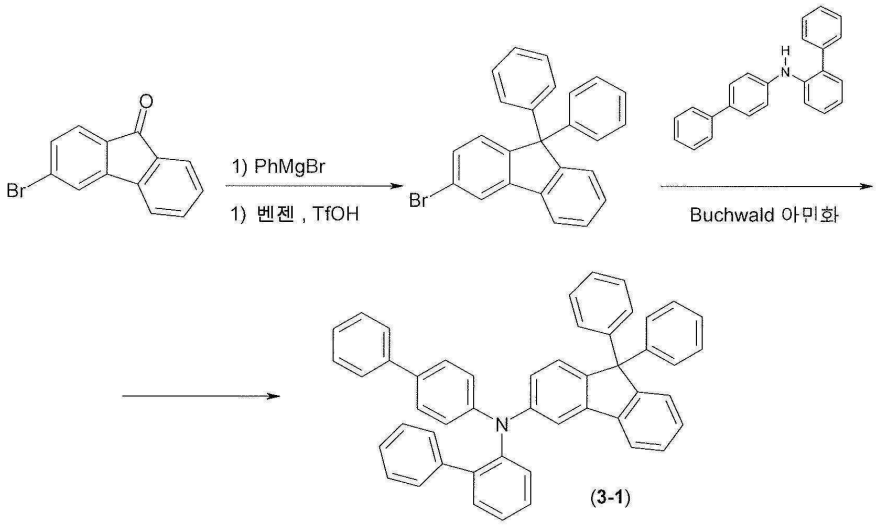




66%

[0308]

[0309] 실시예 3

[0310] 화합물 바이페닐-2-일바이페닐-4-일-(9,9-디페닐-9H-플루오렌-3-일)-아민 (3-1) 및 화합물 (3-2) 내지 (3-5) 의 합성

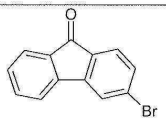
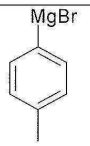
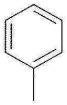
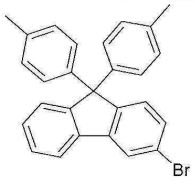
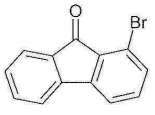
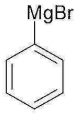
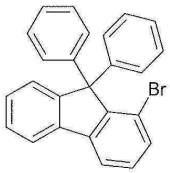


[0311]

[0312] **3-브로모-9,9-디페닐-9H-플루오렌**

[0313] 50 g (193 mmol) 의 3-브로모-9H-플루오레논 (Tetrahedron, 51, 7, 2039-54; 1995) 을 가열에 의해 건조된 플라스크에서 500 ml 의 건조된 THF 에 용해시켰다. 투명한 용액을 -10℃ 로 냉각시키고, 및 70.7 ml (212 mmol) 의 3 M 페닐마그네슘브로마이드 용액를 이어서 첨가하였다. 반응 혼합물을 천천히 실온으로 가온시키고 NH_4Cl (500 ml) 를 이용하여 켄칭하였다. 이어서 혼합물을 에틸 아세테이트와 물 사이에서 구획화하고, 유기 상을 물로 3회 세척하고, Na_2SO_4 및 상에서 건조시키고, 회전 증발기에서 증발시켰다. 미정제 생성물을 헵탄/톨루엔으로부터 재결정화하였다. 400 ml 의 벤젠을 잔사에 첨가하였다. 배치를 50℃ 로 가열시키고, 18.6 ml 의 트리플루오로-메탄술폰산을 이어서 적가하였다. 30분 후, 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고 1 ℓ 의 물에 부었다. 혼합물을 톨루엔과 물 사이에서 구획화하고, 유기 상을 물로 3회 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고 회전 증발기에서 증발시켰다. 헵탄/에틸 아세테이트 1:1 을 이용하여 실리카겔을 통해 미정제 생성물을 여과하여 55.6 g (135 mmol) (이론치의 70%) 을 수득하였다.

[0314] 하기 브롬화된 화합물을 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	출발 물질 3	생성물	수율
				75%
				65%

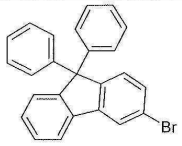
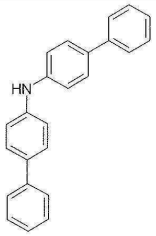
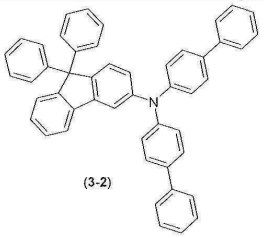
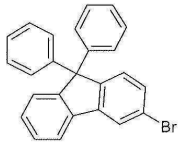
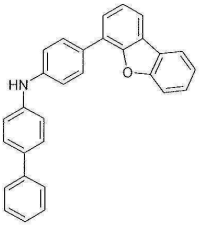
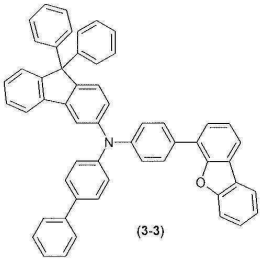
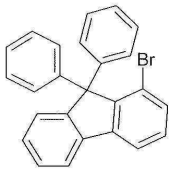
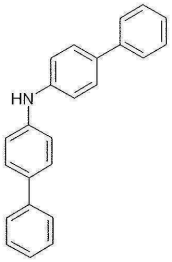
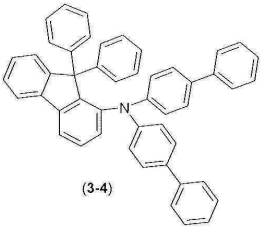
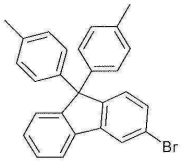
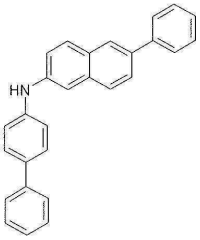
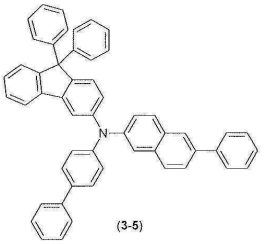
[0315]

[0316] **바이페닐-2-일바이페닐-4-일-(9,9-디페닐-9H-플루오렌-3-일)-아민 (3-1)**

[0317] 12 g 의 바이페닐-2-일바이페닐-4-일아민 (37 mmol), 16.3 g 의 3-브로모-9,9-디페닐-9H-플루오렌 (41 mmol) 을 360 ml 의 톨루엔에 용해시키고; 용액을 탈기시키고 N_2 로 포화시켰다. 3.7 ml (3.7 mmol) 의 1 M 용액 트리-tert-부틸포스핀 및 0.42 g (1.87 mmol) 의 팔라듐(II) 아세테이트를 이어서 첨가하였다. 9.0 g 의 나트륨 tert-부톡시드 (93.3 mmol) 를 이어서 첨가하였다. 반응 혼합물을 보호성 분위기 하에서 3 시간 동안 비등 가열시켰다. 이어서 혼합물을 톨루엔과 물 사이에서 구획화하고, 유기 상을 물로 3회

세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고 회전 증발기에서 증발시켰다. 톨루엔을 이용하여 실리카 겔을 통해 미정제 생성물의 여과 후, 남아 있는 잔사를 헵탄/톨루엔으로부터 재결정화시키고 최종적으로 고 진공 하에서 승화시켰다. 순도: 99.9%. 수율: 20 g (이론치의 85%).

[0318] 하기 화합물 (3-2) 내지 (3-5) 을 유사하게 제조하였다:

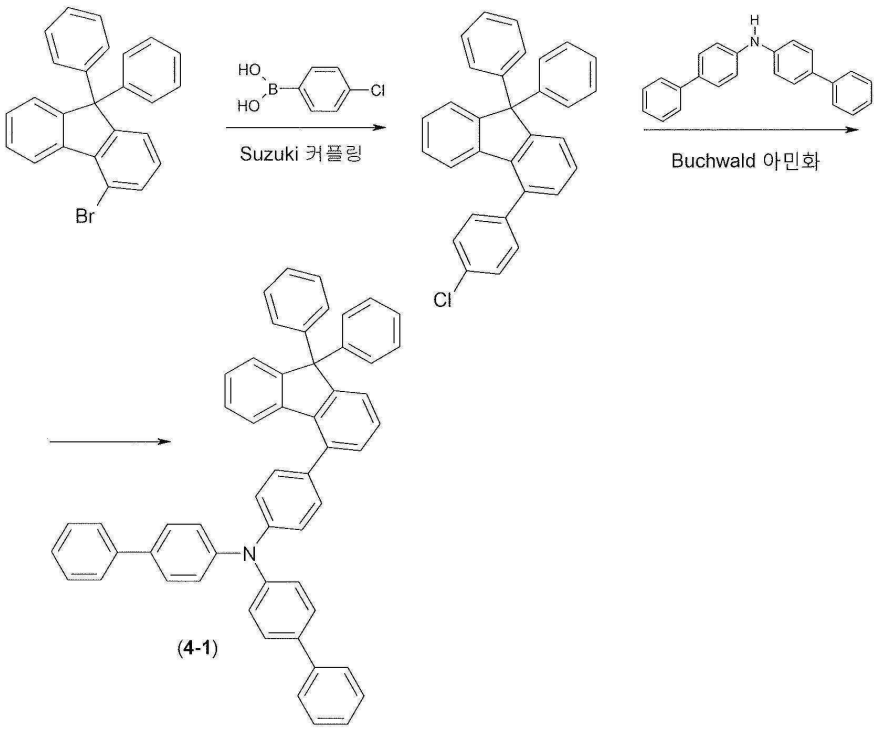
출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
		 (3-2)	78%
		 (3-3)	80%
		 (3-4)	85%
		 (3-5)	80%

[0319]

[0320]

[0321] <u>실시예 4</u>

[0322] **화합물 비스바이페닐-4-일-[4-(9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)-페닐]-아민 (4-1) 및 화합물 (4-2) 내지 (4-7)의 합성**

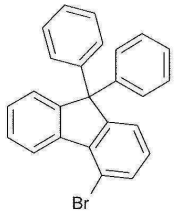
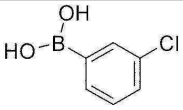
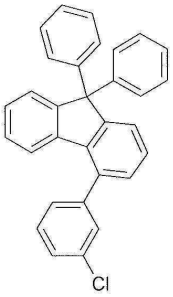
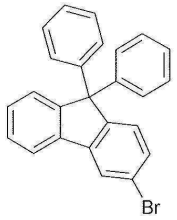
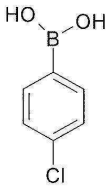
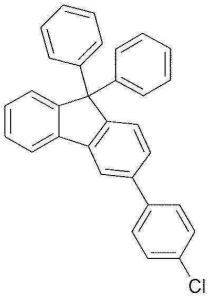
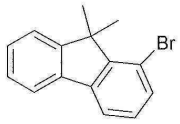
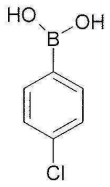
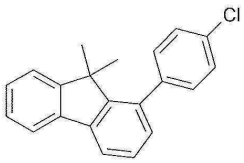


[0323]

[0324] **4-(4-클로로페닐)-9,9-디페닐-9H-플루오렌**

[0325] 7.9 g (50 mmol) 의 4-클로로벤젠보론산, 20 g (50 mmol) 의 4-브로모-9,9-디페닐-9H-플루오렌 및 55 ml 의 수성 2 M $NaHCO_3$ 용액 (111 mmol) 을 400 ml 의 디메톡시에탄에 현탁하였다. 1.45 g (1.26 mmol) 의 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) 을 이러한 현탁액에 첨가하였다. 반응 혼합물을 환류 하에 16 시간 동안 가열시켰다. 냉각 후, 유기 상을 분리시키고, 실리카 겔을 통해 여과시키고, 300 ml 의 물로 3회 세척하고, 이어서 건조증발시켰다. 헵탄/에틸 아세테이트 (20:1) 를 이용하여 실리카 겔을 통해 미정제 생성물을 여과시켜 18.4 g (85%) 의 4-(4-클로로페닐)-9,9-디페닐-9H-플루오렌을 수득하였다.

[0326] 하기 염소화된 화합물을 유사하게 제조하였다:

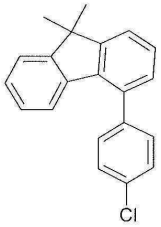
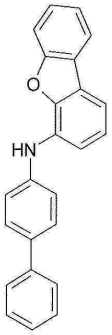
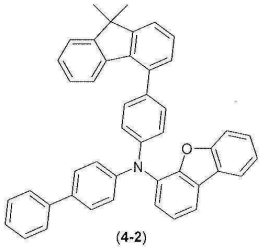
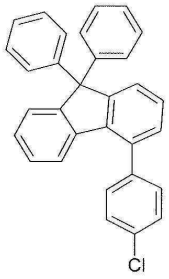
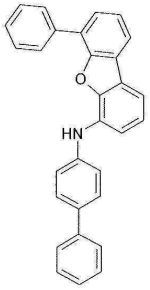
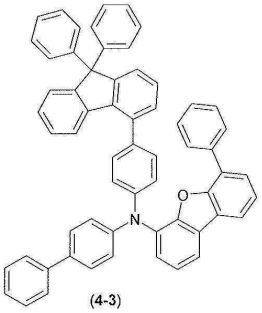
출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			79%
			70%
			72%

[0327]

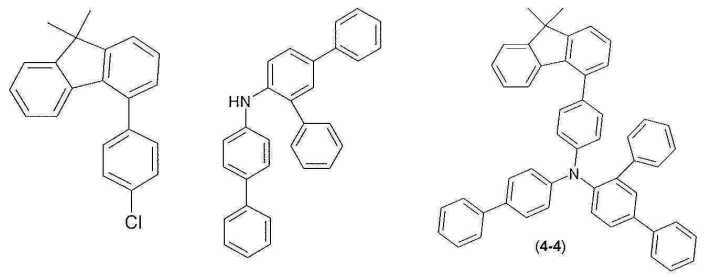
[0328] **비스바이페닐-4-일-[4-(9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)-페닐]-아민 (4-1)**

[0329] 13.60 g 의 비스바이페닐-4-일아민 (43 mmol) 및 18.2 g 의 4-클로로-9,9-디페닐-9H-플루오렌 (43 mmol) 을 400 ml 의 톨루엔에 용해시키고; 용액을 탈기시키고 N_2 로 포화시켰다. 1.04 g (2.55 mmol) 의 S-Phos 및 1.94 g (2.1307 mmol) 의 팔라듐(II) dba를 이어서 첨가하였다. 10 g 의 나트륨 tert-부톡시드 (106 mmol) 를 이어서 첨가하였다. 반응 혼합물을 보호성 분위기 하에서 3 시간 동안 비등 가열시켰다. 이어서 혼합물을 톨루엔과 물 사이에서 구획화하고, 유기 상을 물로 3회 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고 회전 증발기에서 증발시켰다. 톨루엔을 이용하여 실리카 겔을 통해 미정제 생성물의 여과 후, 남아 있는 잔사를 헵탄/톨루엔으로부터 재결정화시키고 최종적으로 고 진공 하에서 승화시켰다. 순도: 99.9%. 수율: 23 g (이론치의 77%).

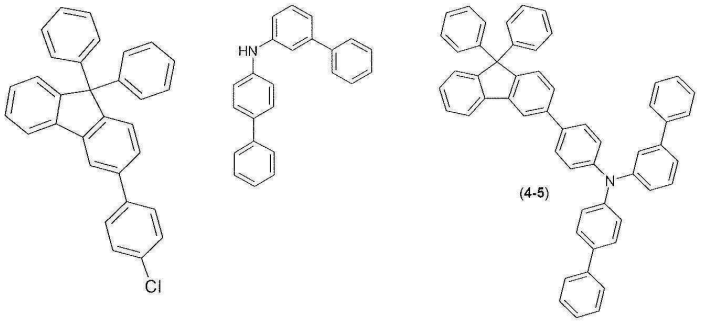
[0330] 하기 화합물을 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
		 (4-2)	78%
		 (4-3)	70%

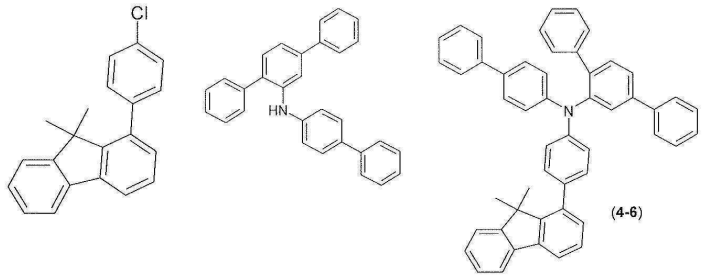
[0331]



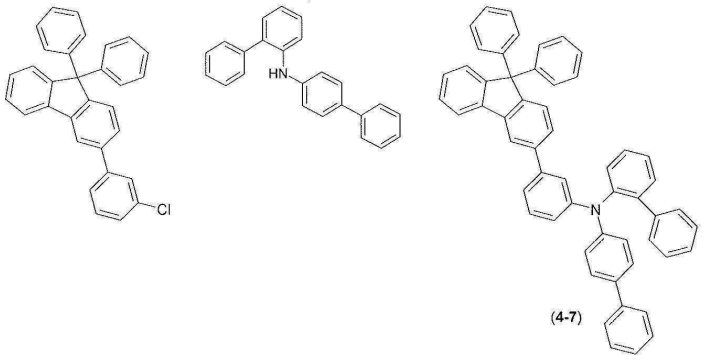
75%



88%



73%

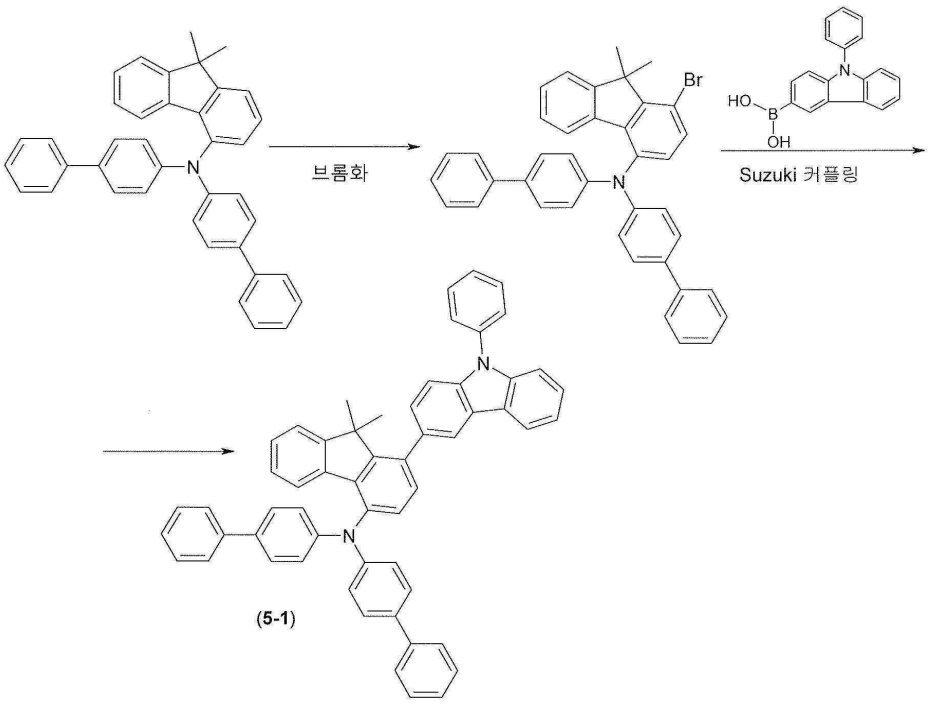


73%

[0332]

[0333] 실시예 5

[0334] 화합물 비스바이페닐-4-일-[9,9-디메틸-1-(9-페닐-9H-카르바졸-3-일)-9H-플루오렌-4-일]-아민 (5-1) 및 화합물 (5-2) 내지 (5-5) 의 합성



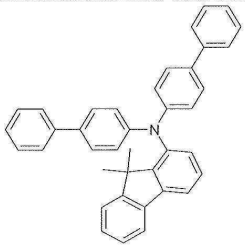
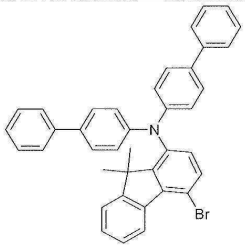
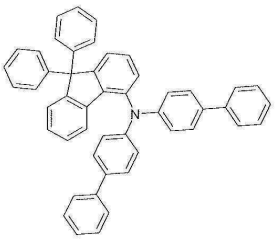
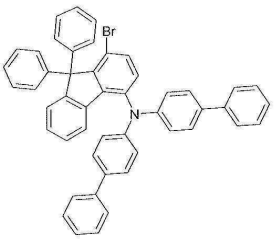
[0335]

[0336] **비스바이페닐-4-일-(1-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌-4-일)-아민**

[0337] 15.0 g (29 mmol) 의 비스바이페닐-4-일-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-4-일)-아민을 150 ml 의 아세토니트릴에 용해시키고, 5.2 g (29 mmol) 의 N-브로모-숙신이미드ff 실온에서 일부씩 첨가하였다. 반응이 완료되었을 때, 물 및 에틸 아세테이트를 첨가하고, 유기 상을 분리시키고, 건조시키고 증발시켰다. 고온 MeOH/헵탄 (1:1) 을 이용하여 수회 교반함으로써 미정제 생성물을 후속 세척하였다.

[0338] 수율: 생성물의 13.5 g (80%).

[0339] 하기 브롬화된 화합물을 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	생성물	수율
		85%
		81%

[0340]

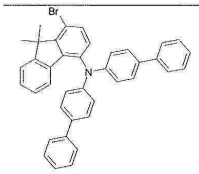
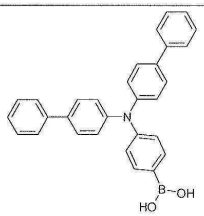
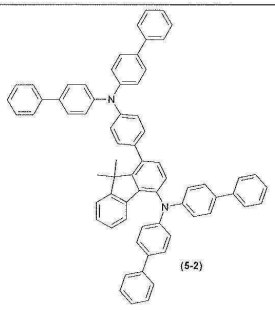
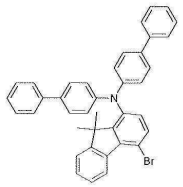
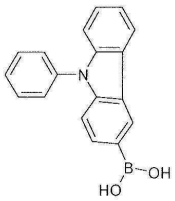
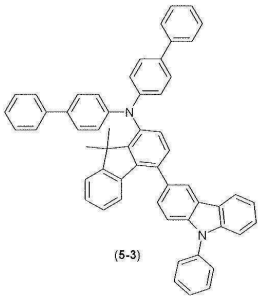
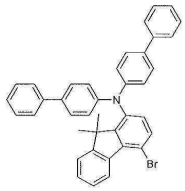
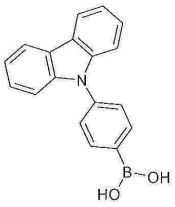
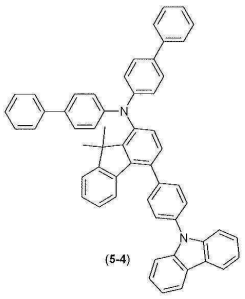
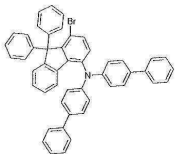
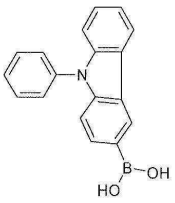
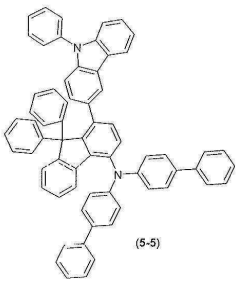
[0341] **비스바이페닐-4-일-[9,9-디메틸-1-(9-페닐-9H-카르바졸-3-일)-9H-플루오렌-4-일]-아민 (5-1)**

[0342] 6.3 g (22 mmol) 의 N-페닐카르바졸-3-일보론산 및 13 g (22 mmol) 의 비스바이페닐-4-일-(1-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌-4-일)-아민을 200 ml 의 디메톡시에탄 및 30 ml 의 2 M Na_2CO_3 용액에 현탁하였다.

0.6 g (2.0 mmol) 의 테트라키스-(트리페닐-포스핀)팔라듐를 이러한 현탁액에 첨가하였다. 반응 혼합물을 환류 하에 16 시간 동안 가열시켰다. 냉각 후, 반응 혼합물을 에틸 아세테이트로 희석시키고, 유기 상을 분리시키고, 100 ml 의 물로 3회 세척하고, 이어서 건조 증발시켰다. 헵탄/에틸 아세테이트 (20:1) 를

이용하여 실리카 겔을 통해 미정제 생성물을 여과시켜 15 g (90%) 의 비스바이페닐-4-일-[9,9-디메틸-1-(9-페닐-9H-카르바졸-3-일)-9H-플루오렌-4-일]-아민 (5-1) 을 수득하였다.

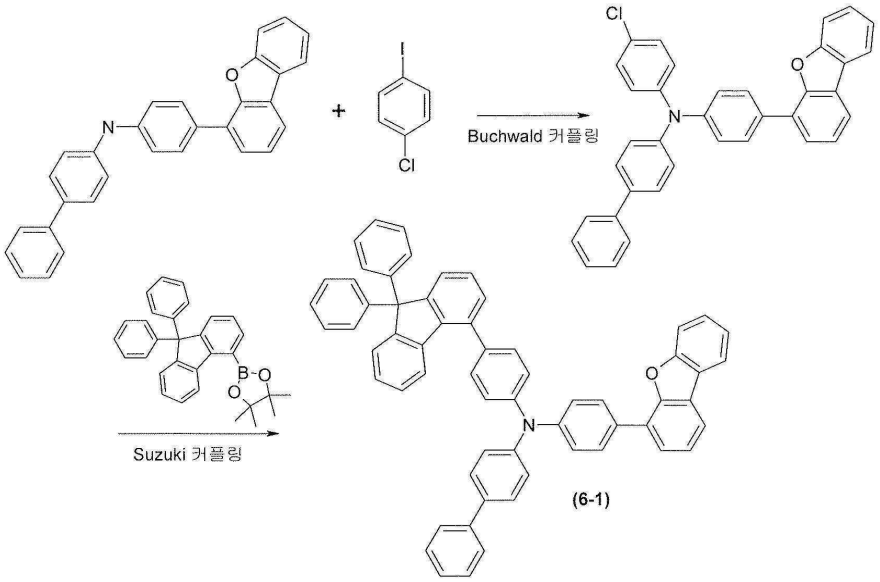
[0343] 화합물 (5-2) 내지 (5-5) 을 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
		 (5-2)	85%
		 (5-3)	81%
		 (5-4)	88%
		 (5-5)	85%

[0344]

[0345] 실시예 6

[0346] **화합물 바이페닐-4-일-(4-디벤조푸란-4-일-페닐)-[4-(9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)-페닐]-아민 (6-1) 및 화합물 (6-2) 내지 (6-5) 의 합성**

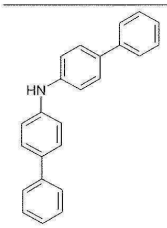
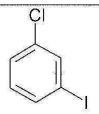
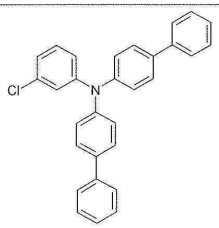
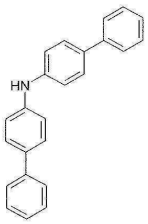
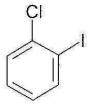
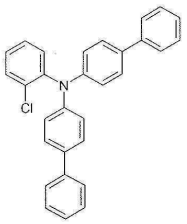
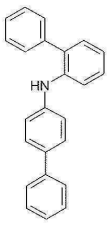
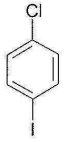
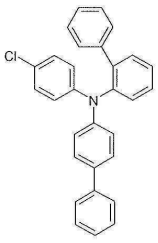


[0347]

[0348] **바이페닐-4-일-(4-클로로페닐)-(4-디벤조푸란-4-일페닐)-아민**

[0349] 30.0 g 의 바이페닐-4-일-(4-디벤조푸란-4-일페닐)-아민 (CAS: 955959-89-4) (73 mmol) 및 17.4 g 의 1-클로로-2-요오도벤젠 (73 mmol) 을 460 ml 의 톨루엔에 용해시키고: 용액을 탈기시키고 N_2 로 포화시켰다. 2.9 ml (2.9 mmol) 의 1 M 트리-tert-부틸포스핀 용액 및 0.33 g (1.46 mmol) 의 팔라듐(II) 아세테이트를 이어서 첨가하였다. 10.5 g 의 나트륨 tert-부톡시드 (109 mmol) 를 이어서 첨가하였다. 반응 혼합물을 보호성 분위기 하에서 3 시간 동안 비등 가열시켰다. 이어서 혼합물을 톨루엔과 물 사이에서 구획화하고, 유기 상을 물로 3회 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 회전 증발기에서 증발시켰다. 톨루엔을 이용하여 실리카 겔을 통해 미정제 생성물의 여과 후, 남아 있는 잔사를 헵탄/톨루엔으로부터 재결정화시키고 최종적으로 고 진공 하에서 승화시켰다. 순도: 99.9%. 수율: 30 g (이론치의 80%).

[0350] 하기 화합물을 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			83%
			80%
			79%

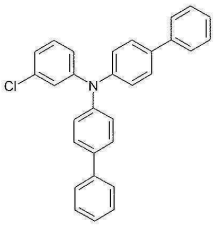
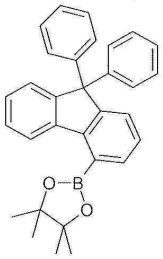
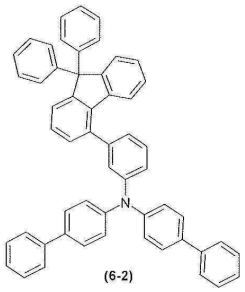
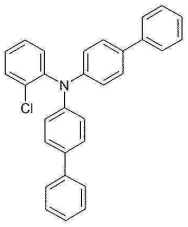
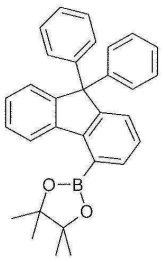
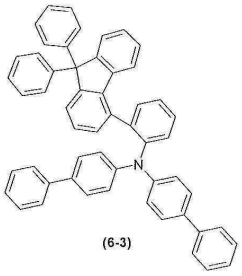
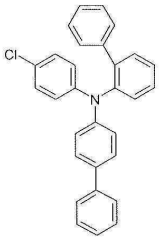
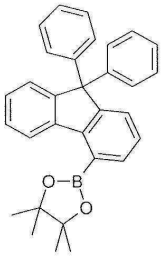
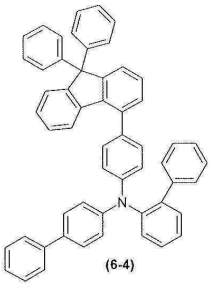
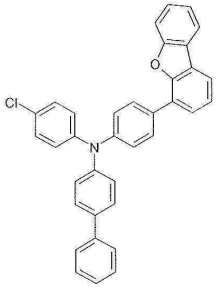
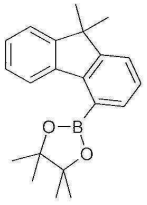
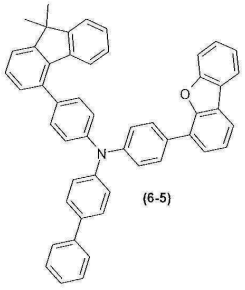
[0351]

[0352] **바이페닐-4-일-(4-디벤조푸란-4-일페닐)-[4-(9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)-페닐]-아민 (6-1)**

[0353] 20.0 g (45 mmol) 의 피나콜릴 (9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)-보로네이트, 23.5 g (45 mmol) 의 바이페닐-4-일-(4-클로로페닐)-(4-디벤조푸란-4-일-페닐)-아민을 400 ml 의 디옥산 및 13.7 g 의 세슘 플루오라이드 (90 mmol) 에 현탁하였다. 4.0 g (5.4 mmol) 의 비스(트리시클로헥실포스핀)-팔라듐 디클로라이드를 이러한 현탁액에 첨가하고, 반응 혼합물을 환류 하에 18 시간 동안 가열시켰다. 냉각 후, 유기 상을 분리시키고, 실리카 겔을 통해 여과시키고, 80 ml 의 물을 3회 세척하고, 이어서 건조증발시켰다. 톨루엔을 이용하여 실리카 겔을 통해 미정제 생성물의 여과 후, 남아 있는 잔사를 헵탄/톨루엔으로부터 재결정화시키고 최종적으로 고 진공 하에서 승화시켰다. 순도: 99.9%. 수율: 25 g (이론치의 80%).

[0354] 하기 화합물 (6-2) 내지 (6-5) 을 유사하게 제조하였다:

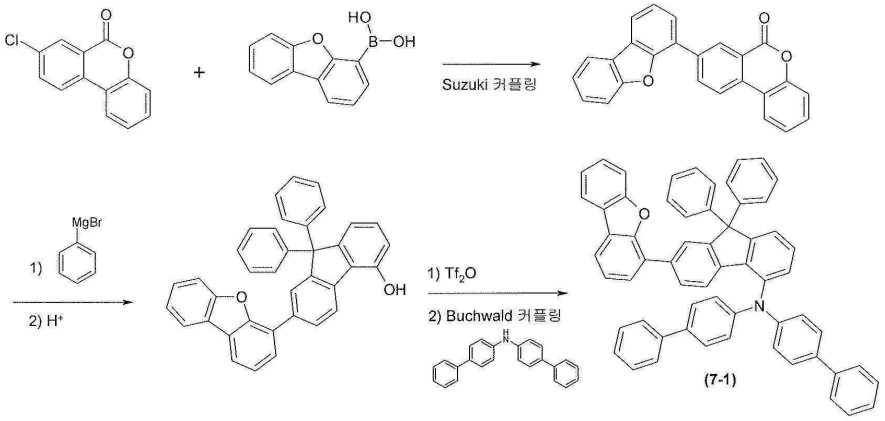
[0355]

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
		 (6-2)	65%
		 (6-3)	69%
		 (6-4)	75%
		 (6-5)	65%

[0356]

[0357] **실시예 7**

[0358] **화합물 비스바이페닐-4-일-(7-디벤조푸란-4-일-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)-아민 (7-1) 및 화합물 (7-2) 내지 (7-5) 의 합성**

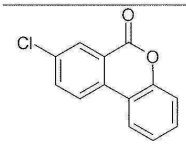
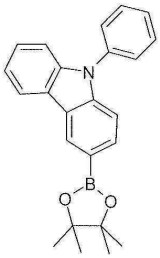
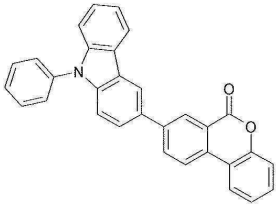
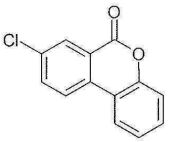
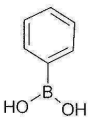
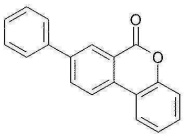
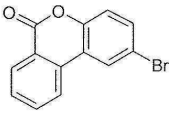
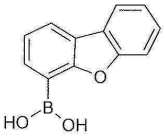
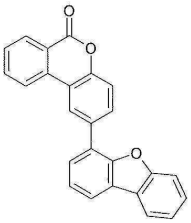
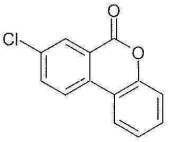
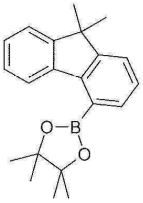
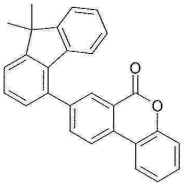


[0359]

[0360] **8-디벤조푸란-4-일벤조[c]크로멘-6-온**

[0361] 30.0 g (142 mmol) 의 디벤조푸란-4-보론산, 32 g (142 mmol) 의 8-클로로벤조[c]크로멘-6-온 (CAS: 742058-81-7) 및 43 g 의 세슘 플루오라이드 (283 mmol) 를 800 ml 의 디옥산에 현탁하였다. 12.5 g (17 mmol) 의 비스(트리시클로헥실포스핀)팔라듐 디클로라이드를 이러한 현탁액에 첨가하고, 반응 혼합물을 환류 하에 18 시간 동안 가열시켰다. 냉각 후, 유기 상을 분리시키고, 실리카 겔을 통해 여과시키고, 100 ml 의 물로 3회 세척하고 이어서 건조증발시켰다. 톨루엔을 이용하여 실리카 겔을 통해 미정제 생성물의 여과 후, 남아 있는 잔사를 헵탄/톨루엔으로부터 재결정화하였다. 수율: 45 g (이론치의 88%).

[0362] 하기 화합물을 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			84%
			90%
 CAS:82466-16-8			85%
			76%

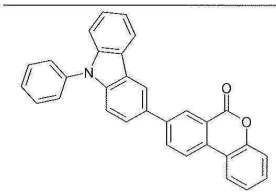
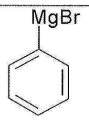
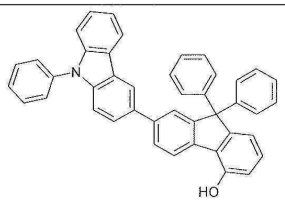
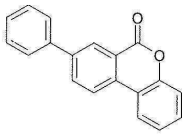
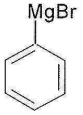
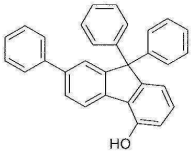
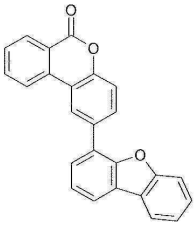
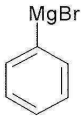
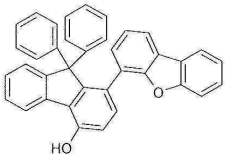
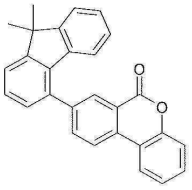
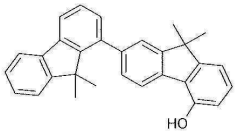
[0363]

[0364] **7-디벤조푸란-4-일-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-올**

[0365] 25.4 g (70 mmol) 의 8-디벤조푸란-4-일벤조[c]크로멘-6-온을 가열에 의해 건조된 플라스크에서 340 ml 의 건조된 THF 에 용해시켰다. 용액을 N_2 로 포화시켰다. 투명한 용액을 -10℃ 로 냉각시키고, 70 ml (210 mmol) 의 3 M 페닐마그네슘브로마이드 용액를 이어서 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온으로 천천히 가온시

키고 아세틱 무수물 (70 mmol) 을 사용하여 켄칭하였다. 혼합물을 아텔 아세테이트와 물 사이에서 구획화하고 유기 상을 물로 3회 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고 회전 증발기에서 증발시켰다. 310 ml 의 아세트산을 증발된 용액에 조심스럽게 첨가하고, 70 ml 의 훈연 HCl 를 이어서 첨가하였다. 배치를 75℃ 로 가열시키고, 이러한 온도에서 4 시간 동안 유지시켰다. 백색 고체를 이 기간 동안 침전시켰다. 배치를 실온으로 냉각시키고, 침전된 고체를 흡인 여과시키고 메탄올로 세정하였다. 잔사를 진공 하에 40℃ 에서 건조시켰다. 헵탄/에틸 아세테이트 1:1 을 이용하여 실리카 겔을 통해 미정제 생성물을 여과하여 26 g (이론치의 75%) 을 수득하였다.

[0366] 하기 브롬화된 화합물을 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			72%
			80%
			77%
	CH_3MgBr		72%

[0367]

[0368]

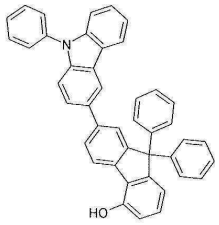
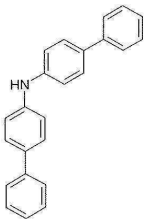
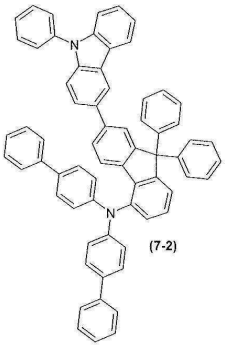
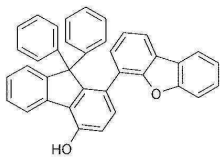
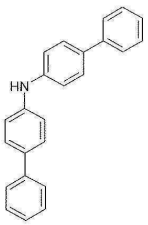
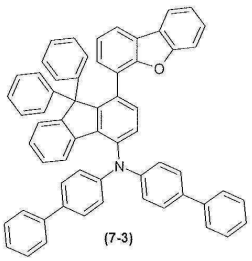
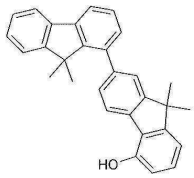
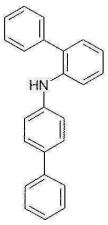
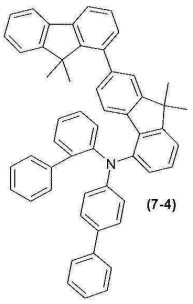
[0369] **비스바이페닐-4-일-(7-디벤조푸란-4-일-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)-아민 (7-1)**

[0370] 25 g (50 mmol) 의 7-디벤조푸란-4-일-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-올을 가열에 의해 건조된 플라스크에서 300 ml 의 건조된 THF 에 용해시켰다. 용액을 N_2 로 포화시켰다. 투명한 용액을 5℃ 로 냉각시키고, 20 ml (150 mmol) 의 트리에틸아민, 122 mg 의 4-디메틸아미노-피리딘 및 8.65 ml 의 트리플루오로메탄술폰무수물을 이어서 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온으로 천천히 가온시켰다. 반응 혼합물을 이어서 헵탄으로 희석시키고, 회전 증발기에서 증발시키고 물로 구획화하고, 유기 상을 물로 3회 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고 회전 증발기에서 증발시켰다. 헵탄/ 에틸 아세테이트 1:1 를 이용하여 실리카 겔을 통해 미정제 생성물을 여과시켜 30 g (이론치의 98%) 을 수득하였다.

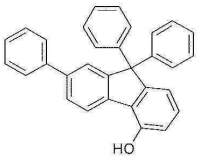
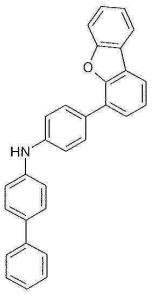
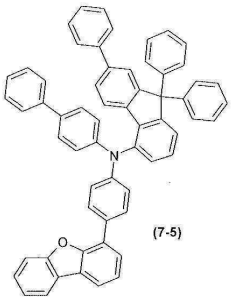
[0371] 18.9 g 의 트리플레이트 (30 mmol) 및 8.16 g 의 비스-4-바이페닐아민 (25 mmol) 을 240 ml 의 톨루엔에 용해시키고; 용액을 탈기시키고 N_2 로 포화시켰다. 0.74 g (1.79 mmol) 의 S-Phos 및 1.36 g 의 팔라듐 dba (1.49 mmol) 를 이어서 첨가하였다. 5.7 g 의 나트륨 tert-부톡시드 (59.7 mmol) 를 이어서 첨가하였다. 반응 혼합물을 보호성 분위기 하에서 3 시간 동안 85℃ 에서 가열시켰다. 이어서 혼합물을 톨루엔과 물 사이에서 구획화하고, 유기 상을 물로 3회 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고 회전 증발기에서 증발시켰다. 톨루엔을 이용하여 실리카 겔을 통해 미정제 생성물의 여과 후, 남아 있는 잔사를 헵탄/톨루엔으로부터

재결정화하였다. 순도: 99.9%. 수율: 15 g (이론치의 65%).

[0372] 하기 화합물을 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			73%
			80%
			69%

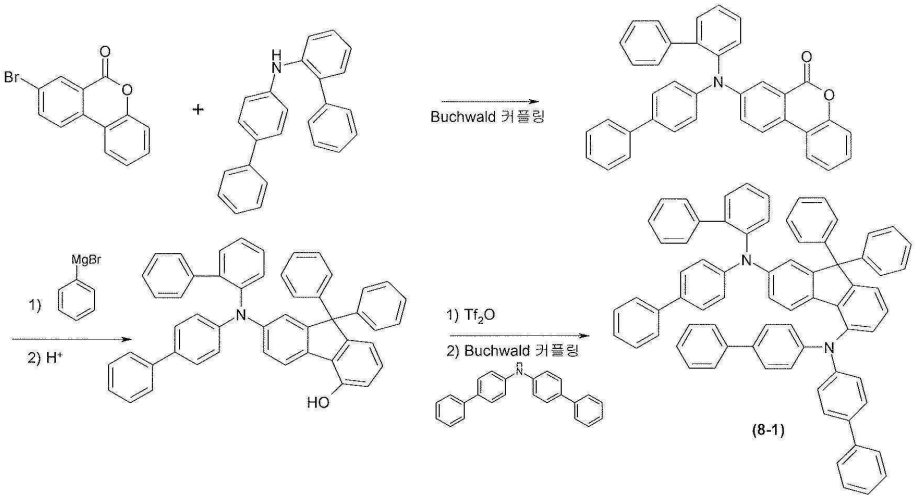
[0373]

			75%

[0374]

[0375] 실시예 8

[0376] **화합물 N*2*,N*5*,N*5*-트리스바이페닐-4-일-N*2*-바이페닐-2-일-9,9-디페닐-9H-플루오렌-2,5-디아민 (8-1) 의 합성**

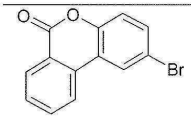
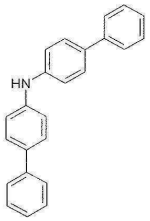
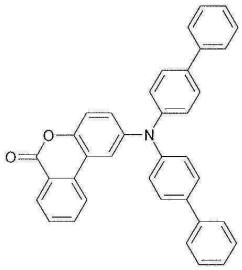
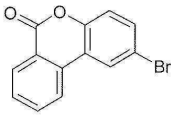
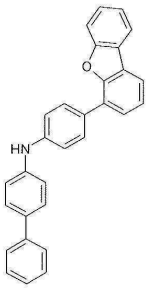
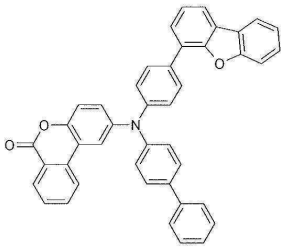


[0377]

[0378] **8-(바이페닐-4-일바이페닐-2-일아미노)-벤조[c]크로멘-6-온**

[0379] 19.0 g 의 바이페닐-2-일바이페닐-4-일아민 (59 mmol) 및 16.3 g 의 8-브로모벤조[c]크로멘-6-온 (59 mmol) 을 400 ml 의 톨루엔에 용해시키고; 용액을 탈기시키고 N_2 로 포화시켰다. 2.36 ml (2.36 mmol) 의 a 1 M 트리-tert-부틸포스핀 용액 및 0.27 g (1.18 mmol) 의 팔라듐(II) 아세테이트를 이어서 첨가하였다. 11.6 g 의 나트륨 tert-부톡시드 (109 mmol) 를 이어서 첨가하였다. 반응 혼합물을 보호성 분위기 하에서 3 시간 동안 비등 가열시켰다. 이어서 혼합물을 톨루엔과 물 사이에서 구획화하고, 유기상을 물로 3회 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 회전 증발기에서 증발시켰다. 톨루엔을 이용하여 실리카 겔을 통해 미정제 생성물의 여과 후, 남아 있는 잔사를 헵탄/톨루엔으로부터 재결정화하였다. 수율: 27 g (이론치의 90%).

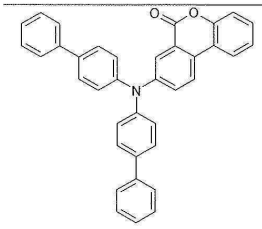
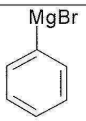
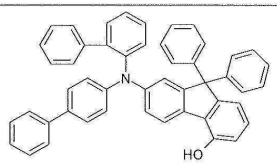
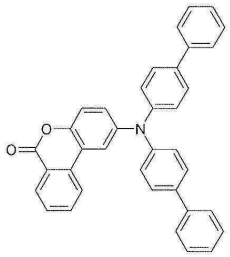
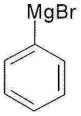
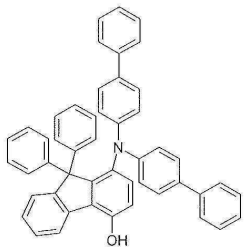
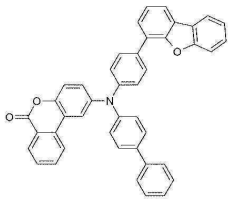
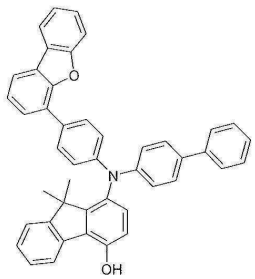
[0380] 하기 화합물을 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			85%
			75%

[0381]

[0382] **7-(바이페닐-4-일바이페닐-2-일아미노)-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-올**

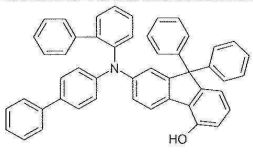
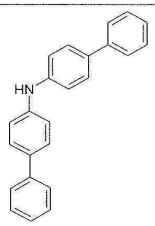
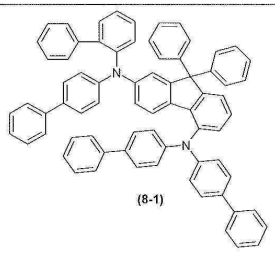
[0383] 하기 화합물을 7-디벤조푸란-4-일-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-올과 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			88%
			73%
	CH_3MgBr		76%

[0384]

[0385] **N*2*,N*5*,N*5*-트리스바이페닐-4-일-N*2*-바이페닐-2-일-9,9-디페닐-9H-플루오렌-2,5-디아민 (8-1)**

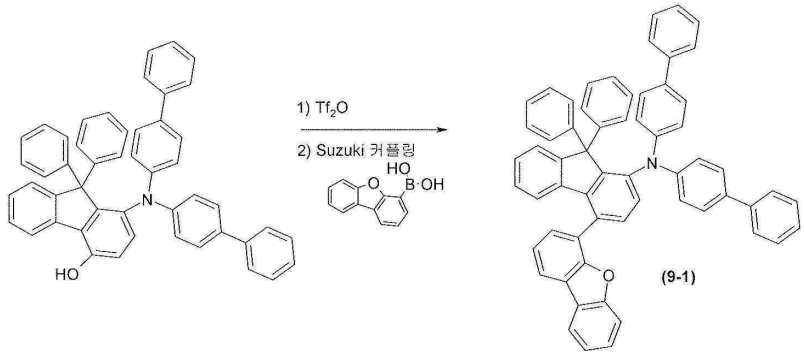
[0386] 화합물 (8-1) 을 비스바이페닐-4-일-(7-디벤조-푸란-4-일-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)-아민 (화합물 (7-1)) 과 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			74%

[0387]

[0388] <u>실시예 9</u>

[0389] **화합물 비스바이페닐-4-일-(4-디벤조푸란-4-일-9,9-디페닐-9H-플루오렌-1-일)-아민 (9-1) 및 화합물 (9-2) 및 (9-3) 의 합성**

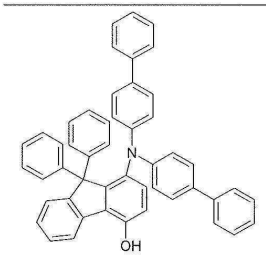
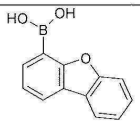
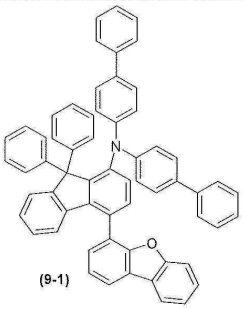
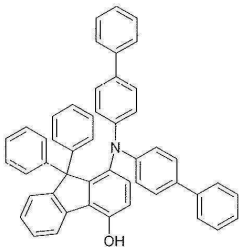
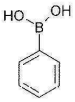
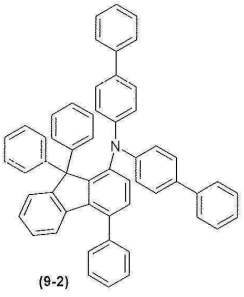


[0390]

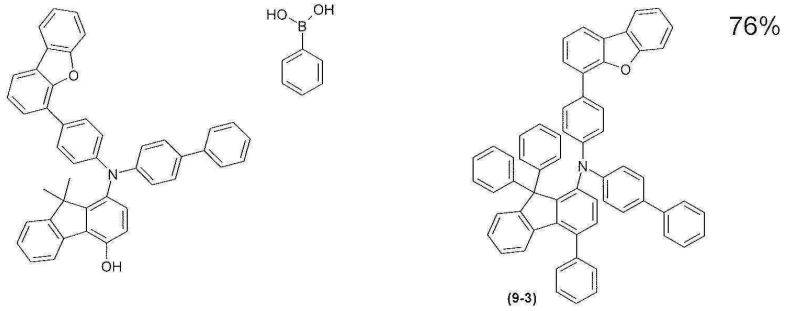
[0391] 24.4 g (37 mmol) 의 1-(비스바이페닐-4-일아미노)-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-올을 가열에 의해 건조된 플라스크에서 210 ml 의 건조된 THF 에 용해시켰다. 용액을 N_2 로 포화시켰다. 투명한 용액을 5℃ 로 냉각시키고, 15.5 ml (112 mmol) 의 트리에틸아민, 100 mg 의 4-디메틸아미노-피리딘 및 6.45 ml 의 트리플루오로메탄술폰무수물를 이어서 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온으로 천천히 가온시켰다. 반응 혼합물을 이어서 헵탄으로 희석시키고, 회전 증발기에서 증발시키고 물로 구획화하고, 유기 상을 물로 3회 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 회전 증발기에서 증발시켰다. 헵탄/에틸 아세테이트 1:1 을 이용하여 실리카 겔을 통해 미정제 생성물을 여과하여 26.7 g (이론치의 91%) 을 수득하였다.

[0392] 17.2 g (22 mmol) 의 1-(비스바이페닐-4-일아미노)-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-올, 6.9 g (33 mmol) 의 4-바이벤조푸란보론산, 9.0 g 의 나트륨 메타보레이트 옥타히드레이트 (32.9 mmol) 및 0.03 ml 의 히드라지늄 히드록시드 (0.657 mmol) 를 200 ml 의 THF 에 현탁하였다. 0.3 g (0.44 mmol) 의 비스-(트리페닐-포스핀)팔라듐 디클로라이드를 이러한 현탁액에 첨가하고, 반응 혼합물을 18 시간 동안 70℃ 에서 가열시켰다. 냉각 후, 혼합물을 에틸 아세테이트와 물 사이에서 구획화하고, 및 유기 상을 물로 3회 세척하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고 이어서 건조 증발시켰다. 톨루엔을 이용하여 실리카 겔을 통해 미정제 생성물의 여과 후, 남아 있는 잔사를 헵탄/톨루엔으로부터 재결정화하고 이어서 승화시켰다. 수율: 12 g (이론치의 70%).

[0393] 하기 화합물을 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			74%
			73%

[0394]



[0395]

[0396] 실시예 10

[0397] **화합물의 특성**

[0398] 본 발명에 따른 OLED 및 선행기술에 따른 OLED 를 본원에 기재된 환경 (층-두께 변화, 물질) 에 맞게 조절하여 WO 2004/058911 에 따른 일반적 방법에 의해 제조한다.

[0399] 다양한 OLED 에 대한 데이터가 하기 실시예 V1 내지 V13 및 E1 내지 E43 에 제시되어 있다 (표 1, 3 및 2, 4 참조). 사용된 기판은 두께가 50 nm 인 구조화 ITO (인듐 주석 산화물) 로 코팅된 유리 플레이트이다. OLED 는 기본적으로 하기의 층 구조를 갖는다: 기판 / 임의적인 정공-주입 층 (HIL1) / 정공-수송- 층 (HTL) / 정공-주입 층 (HIL2) / 전자-차단 층 (EBL) / 방사 층 (EML) / 전자-수송 층 (ETL) / 임의적인 전자-주입 층 (EIL) 및 최종적으로 캐소드. 캐소드는 100 nm 두께를 갖는 알루미늄 층에 의해 형성된다. OLED 의 정확한 구조가 하기 표 1 및 3 에 나타나 있다. OLED 의 제조에 필요한 물질이 상기 개시되어 있다.

[0400] 모든 물질을 진공실에서 열 증착에 의해 적용한다. 여기서 방사층은 항상 하나 이상의 매트릭스 물질 (호스트 물질) 및 방사 도펀트 (이미터) 로 이루어지는데, 이는 특정 부피비로 공-증발에 의해 매트릭스 물질 또는 매트릭스 물질들과 부가혼합된다. 여기서 H1:SEB1 (95%:5%) 와 같은 표현은, 물질 H1 이 95% 의 부피비로 층에 존재하고, SEB1 이 5% 의 비로 층에 존재하는 것을 의미한다. 유사하게, 전자-수송층이 또한 2 개의 물질의 혼합물로 이루어질 수 있다.

[0401] OLED 는 표준 방법에 의해 특성화된다. 상기 목적을 위해, 람베르트 (Lambert) 방사 특성을 추정하는 전류/전압/발광 밀도 특성선 (IUL 특성선) 으로부터 산출되는, 발광 밀도의 함수로서 전계발광 스펙트럼, 전류 효율 (cd/A 로 측정), 전력 효율 (lm/W 로 측정) 및 외부 양자 효율 (EQE, % 로 측정), 및 수명을 측정한다. 전계발광 스펙트럼은 1000 cd/㎡ 의 발광 밀도에서 측정되고, CIE 1931 x 및 y 색채 좌표가 그로부터 산출된다.

표현 EQE @ 1000 cd/㎡ 은 1000 cd/㎡ 의 작동 발광 밀도에서의 외부 양자 효율을 나타낸다. LT80 @ 6000 cd/㎡ 은 OLED 가 6000 cd/㎡ 의 휘도에서 초기 강도의 80% 로, 즉 4800 cd/㎡ 로 하락할 때까지의 수명 시간이다. 다양한 OLED 의 데이터가 표 2 및 4 에 요약되어 있다.

[0402] **OLED 에서 정공-수송 재료로서 본 발명에 따른 화합물의 용도**

[0403] 특히, 본 발명에 따른 화합물은 OLED 에서 HIL, HTL 또는 EBL 로서 적합하다. 이들은 단일 층으로서 적합하며, 또한 HIL, HTL, EBL 으로서 또는 EML 내에서 혼합 성분으로서 적합하다.

[0404] NPB 참조 성분 (V1, V8) 과 비교시, 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 샘플은 더욱 높은 효율을 나타내고 또한 현저히 개선된 수명을 나타낸다 (일중항 청색 및 삼중항 녹색 둘 다에서).

[0405] 참조 재료 HTMV1 (V2, V9) 와 비교하여, 본 발명에 따른 화합물 (1-1) (E1, E7) 은 청색 및 녹색에서 현저하게 양호한 수명을 갖는다.

[0406] 참조 재료 HTMV2 - HTMV6 (V3 - V7 및 V9 - V13) 와 비교하여, 본 발명에 따른 재료 (1-1), (1-4), (1-7), (5-1), (4-1), (1-12), (1-13), (1-14), (1-15), (1-3), (6-3), (6-2), (6-1), (6-4), (6-5), (8-1), (7-1), (7-2), (9-2), (2-7), (2-8), (2-9), (2-10) 및 (1-17) 은 청색 및/또는 녹색에서 더욱 양호한 수명을 나타낸다.

[0407] **형광 및 인광 OLED 에서 정공-수송 재료로서 본 발명에 따른 화합물의 용도**

[0408] 특히, 본 발명에 따른 화합물은 OLED 에서 HIL, HTL 또는 EBL 로서 적합하다. 이들은 단일층으로서 적합하나, 또한 HIL, HTL, EBL 으로서 또는 EML 내에서 혼합 성분으로서도 적합하다.

[0409] NPB 참조 성분 (V1) 과 비교하여, 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 모든 샘플은 더욱 높은 효율을 나타내면서

일중항 청색 및 삼중항 녹색에서 현저히 개선된 수명을 둘 다 나타낸다.

표 1: OLED 의 구조

(층 구조:기판/HIL1/HTL/HIL2/EBL/EML/ETL/EIL(1 nm LiQ)/캐소드)

[0410]

Ex.	HIL1	HTL	HIL2	EBL	EML	ETL
	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm
V1	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	NPB 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
V2	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	HTMV1 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
V3	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	HTMV2 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
V4	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	HTMV3 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
V5	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	HTMV4 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
V6	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	HTMV5 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
V7	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	HTMV6 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E1	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(1-1) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E2	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(1-4) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm

[0411]

E3	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(1-7) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E4	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(5-1) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E5	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(4-1) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E6	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(1-12) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E7	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(1-13) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E8	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(1-14) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E9	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(1-15) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E10	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(6-3) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E11	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(6-2) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E12	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(6-1) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E13	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(6-4) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E14	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(6-5) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E15	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(8-1) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E16	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(7-1) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E17	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(7-2) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E18	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(9-2) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E19	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(2-7) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E20	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(2-8) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E21	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(2-10) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E22	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(2-9) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E23	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(1-17) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm

[0412]

표 2: OLED 에 대한 데이터				
Ex.	EQE @ 1000 cd/m²	LT80 @ 6000 cd/m²	CIE	
	%	[h]	X	y
V1	4.8	70	0.14	0.17
V2	6.8	160	0.14	0.14
V3	6.9	115	0.14	0.14
V4	6.8	115	0.14	0.14
V5	6.5	130	0.14	0.15
V6	6.6	100	0.14	0.14
V7	6.9	135	0.13	0.14
E1	7.0	180	0.14	0.15
E2	6.9	175	0.13	0.15
E3	7.0	165	0.13	0.15
E4	6.7	150	0.14	0.15
E5	6.9	170	0.14	0.13
E6	7.0	145	0.14	0.14
E7	7.0	155	0.14	0.14
E8	7.8	120	0.14	0.14
E9	6.9	135	0.13	0.14
E10	6.9	150	0.14	0.14
E11	7.0	135	0.14	0.13
E12	7.0	180	0.14	0.15
E13	7.0	150	0.14	0.14
E14	7.2	170	0.14	0.14
E15	7.0	150	0.14	0.14
E16	6.9	160	0.14	0.14
E17	6.9	155	0.14	0.15
E18	6.9	170	0.14	0.14
E19	6.9	135	0.14	0.14
E20	7.0	115	0.14	0.14
E21	7.0	150	0.14	0.14
E22	7.0	135	0.14	0.14
E23	7.0	140	0.14	0.14

[0413]

표 3: OLED 의 구조

(층 구조:기판/HTL/HIL2/EBL/EML/ETL/캐소드)

Ex.	HTL	HIL2	EBL	EML	ETL
	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm
V8	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	NPB 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
V9	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	HTMV1 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
V10	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	HTMV2 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
V11	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	HTMV3 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
V12	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	HTMV5 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
V13	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	HTMV6 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E24	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(1-1)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E25	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(1-4)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E26	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(1-7)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E27	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(5-1)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E28	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(4-1)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E29	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(1-12)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E30	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(1-13)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E31	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(1-14)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E32	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(1-3)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E33	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(1-15)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E34	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(6-2)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E35	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(6-1)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E36	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(6-4)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E37	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(7-2)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E38	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(9-2)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E39	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(2-7)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E40	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(2-8)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E41	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(2-10)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E42	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(2-9)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E43	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	**(1-17)** 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm

[0414]

[0415]

표 4: OLED 에 대한 데이터				
Ex.	효율 @ 1000 cd/m²	LT80 @ 8000 cd/m²	CIE	
	%	[h]	x	Y
V8	13.4	85	0.36	0.61
V9	16.3	140	0.35	0.62
V10	16.0	130	0.36	0.61
V11	16.7	155	0.36	0.61
V12	16.4	150	0.37	0.60
V13	17.0	170	0.35	0.62
E24	17.2	210	0.35	0.61
E25	17.2	200	0.36	0.61
E26	17.5	190	0.36	0.61
E27	16.7	190	0.37	0.60
E28	17.4	200	0.35	0.61
E29	17.0	180	0.37	0.61
E30	17.0	180	0.37	0.61
E31	17.5	220	0.37	0.61
E32	17.3	170	0.37	0.61
E33	17.2	200	0.37	0.61
E34	17.3	210	0.37	0.61
E35	17.2	220	0.37	0.61
E36	17.2	190	0.37	0.61
E37	17.2	200	0.37	0.61
E38	16.9	220	0.37	0.61
E39	16.9	160	0.37	0.61
E40	170	170	0.37	0.61
E41	17.0	195	0.37	0.61
E42	17.0	180	0.37	0.61
E43	17.1	190	0.37	0.61