(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2022-0152289
(43) 공개일자 2022년11월15일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01L 51/00 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
(52) CPC특허분류
H01L 51/0052 (2013.01)
H01L 51/0054 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2022-7034949
(22) 출원일자(국제) 2021년03월12일
심사청구일자 없음
(85) 번역문제출일자 2022년10월06일
(86) 국제출원번호 PCT/EP2021/056390
(87) 국제공개번호 WO 2021/180950
국제공개일자 2021년09월16일
(30) 우선권주장
20163090.2 2020년03월13일
유럽특허청(EPO)(EP)

(71) 출원인
메르크 파텐트 게엠베하
독일 64293 다름스타트 프랑크푸르터 스트라세 250
(72) 발명자
링게 루펜
독일 64293 다름슈타트 프랑크푸르터 슈트라쎄 250 메르크 카게아아 씨/오
엥겔 미리암
독일 64293 다름슈타트 프랑크푸르터 슈트라쎄 250 메르크 카게아아 씨/오
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인코리아나

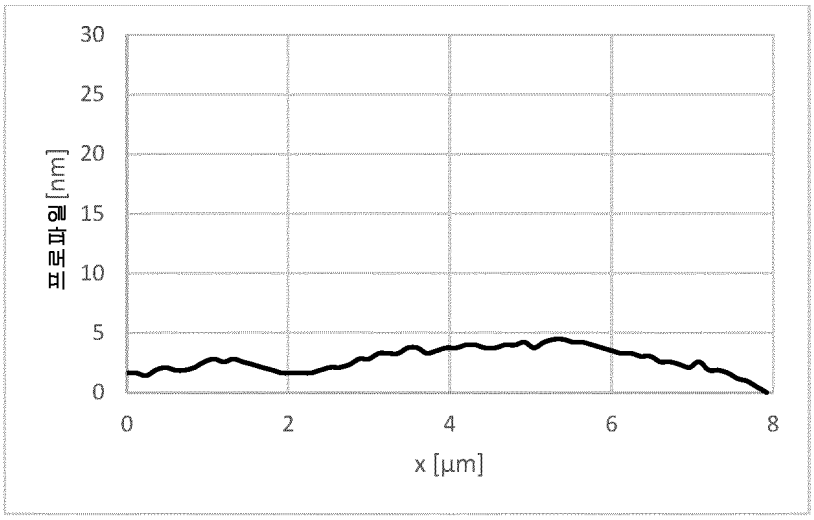
전체 청구항 수 : 총 22 항

(54) 발명의 명칭 **유기 전계 발광 디바이스용 재료**

(57) 요 약

본 발명은 식 (H1) 의 화합물 및 식 (H2) 의 화합물을 포함하는 조성물에 관한 것이다. 본 발명은 또한, 식 (H1) 의 화합물 및 식 (H2) 의 화합물을 포함하는 조성물 및 용매를 포함하는 포뮬레이션에 관한 것이다. 마지막으로, 본 발명은 이러한 조성물을 포함하는 전자 디바이스에 관한 것이다.

대 표 도 - 도1



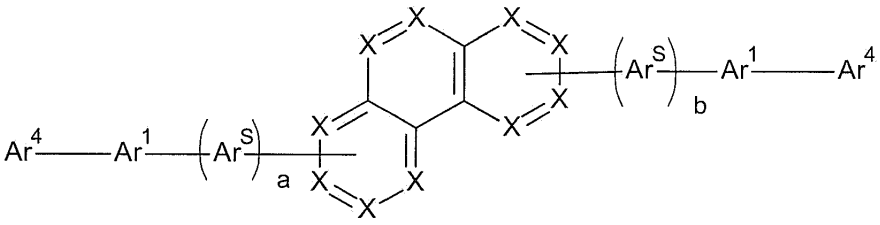
(52) CPC특허분류
H01L 51/0073 (2013.01)
H01L 51/5012 (2013.01)
(72) 발명자
슈톨츠 세바슈티안
독일 64293 다름슈타트 프랑크푸르터 슈트라쎄 250 메르크 카게아아 씨/오
마이어 세바슈티안
독일 64293 다름슈타트 프랑크푸르터 슈트라쎄 250 메르크 카게아아 씨/오

명 세 서

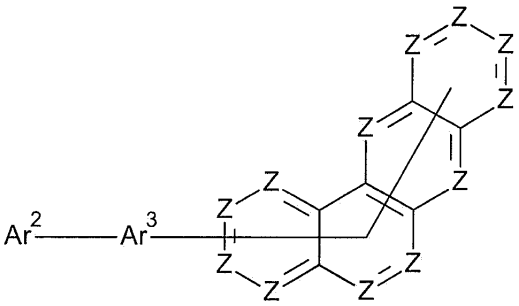
청구범위

청구항 1

하기 식 (H1) 의 화합물 및 하기 식 (H2) 의 화합물을 포함하는 조성물.



식 (H1)



식 (H2)

식 중 사용된 기호 및 인덱스들에 이하가 적용된다:

X 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, CR^X 또는 N 을 나타내거나; 또는 X 가 기 Ar^1 또는 Ar^S 에 결합되는 경우 X 는 C 이다;

Z 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, CR^Z 또는 N 을 나타내거나; 또는 Z 가 기 Ar^3 에 결합되는 경우 Z 는 C 이다;

Ar^1 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 각 경우에 또한 하나 이상의 라디칼 R^V 에 의해 치환될 수도 있는, 10 내지 60개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴 기이다;

Ar^3 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 각 경우에 또한 하나 이상의 라디칼 R^Y 에 의해 치환될 수도 있는, 10 내지 60개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴 기이다;

Ar^2, Ar^4, Ar^S 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 각 경우에 또한 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이다;

R^V, R^X, R^Y, R^Z 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CHO, CN, C(=O)Ar, P(=O)$(Ar)_2$, S(=O)Ar, S(=O)$_2$Ar, N$(R)_2$, N$(Ar)_2$, NO_2, Si$(R)_3$, B$(OR)_2$, OSO_2R, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있고, 여기서 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 RC=CR, C≡C, Si$(R)_2$, Ge$(R)_2$, Sn$(R)_2$, C=O, C=S, C=Se, P(=O)(R), SO, SO_2, O, S 또는 CONR 로 대체될 수도 있

으며, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 로 대체될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 또는 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기를 나타낸다;

여기서 두 개의 인접한 라디칼 R^V, 두 개의 인접한 라디칼 R^X, 두 개의 인접한 라디칼 R^Y, 두 개의 인접한 라디칼 R^Z 는 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수도 있는 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 함께 형성할 수도 있다;

R 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CHO, CN, C(=O)Ar, $P(=O)(Ar)_2$, S(=O)Ar, $S(=O)_2Ar$, $N(R')_2$, $N(Ar)_2$, NO_2, $Si(R')_3$, $B(OR')_2$, OSO_2R', 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R′ 에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 R′C=CR′, C≡C, $Si(R')_2$, $Ge(R')_2$, $Sn(R')_2$, C=O, C=S, C=Se, P(=O)(R′), SO, SO_2, O, S 또는 CONR′ 에 의해 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R′ 에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 또는 하나 이상의 라디칼 R′ 에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기를 나타내고; 여기서 2 개의 인접한 치환기 R 은 하나 이상의 라디칼 R′ 에 의해 치환될 수도 있는, 지방족 또는 방향족 고리 시스템을 함께 형성할 수도 있다;

Ar 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R′ 에 의해 또한 치환될 수도 있는 5 내지 60개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이다;

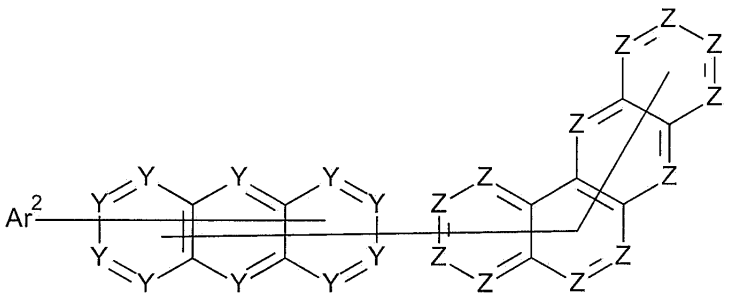
R′ 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (여기서 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 SO, SO_2, O, S 로 대체될 수도 있고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br 또는 I 로 대체될 수도 있음), 또는 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타낸다; 그리고

a, b는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 0 또는 1이고; 여기서 a 또는 b가 0일 때, 대응하는 Ar^S 는 부재하고 기 Ar^1 은 기 X에 직접 결합된다.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기 식 (H2) 의 화합물은 하기 식 (H2-1) 의 화합물로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 조성물.



식 (H2-1)

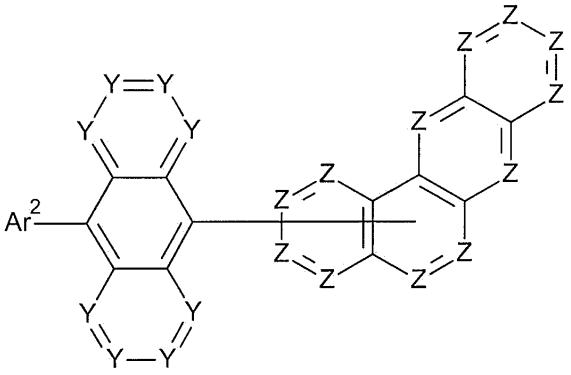
식 중 기호 Ar^2 및 Z 는 제 1 항에서와 동일한 의미를 갖고;

Y 는 CR^Y 또는 N이거나; 또는 Y 는 Ar^2 또는 기 Z 에 결합되는 경우 C이고; 여기서 R^Y 는 제 1 항에서와 동일한 의미를 갖는다.

청구항 3

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서,

상기 식 (H2) 의 화합물은 하기 식 (H2-2) 의 화합물로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 조성물.



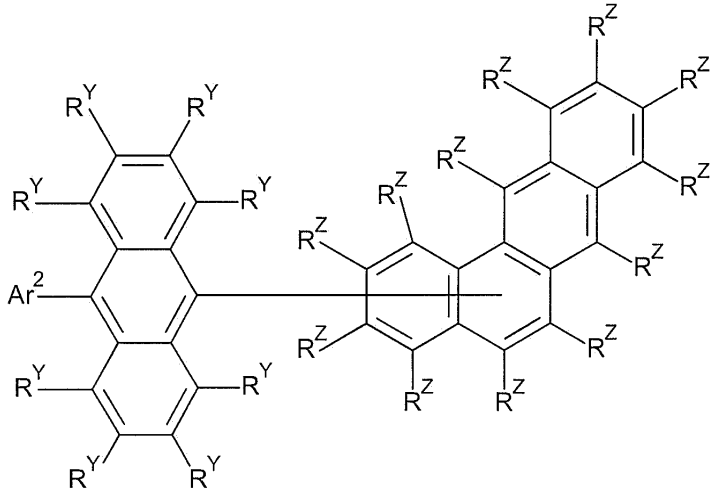
식 (H2-2)

식 중 Ar^2 및 Z 는 제 1 항에서와 동일한 의미를 갖고 Y 는 제 2 항에서와 동일한 의미를 갖는다.

청구항 4

제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 (H2) 의 화합물은 하기 식 (H2-3) 의 화합물로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 조성물.



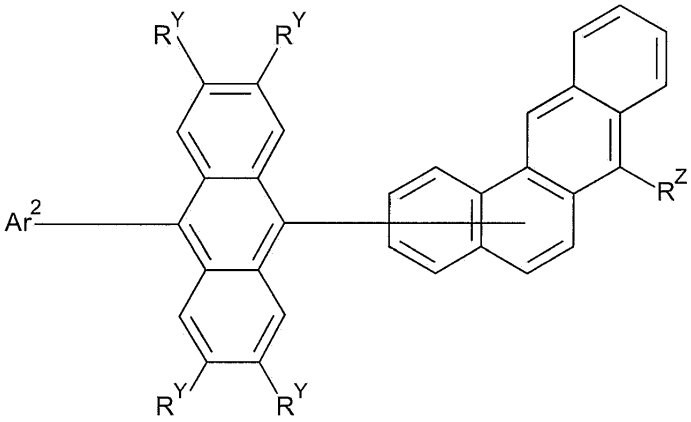
식 (H2-3)

식 중 기호는 제 1 항에서와 동일한 의미를 가지며, 단, 기 CR^Z 는 인접한 안트라센의 결합 위치에서 기 C에 대응한다.

청구항 5

제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 (H2) 의 화합물은 하기 식 (H2-4) 의 화합물로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 조성물.



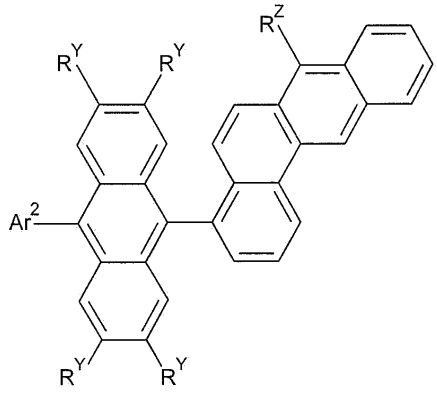
식 (H2-4)

식 중, 기호는 제 1 항에서와 동일한 의미를 가진다.

청구항 6

제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 (H2) 의 화합물은 하기 식 (H2-5) 의 화합물로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 조성물.



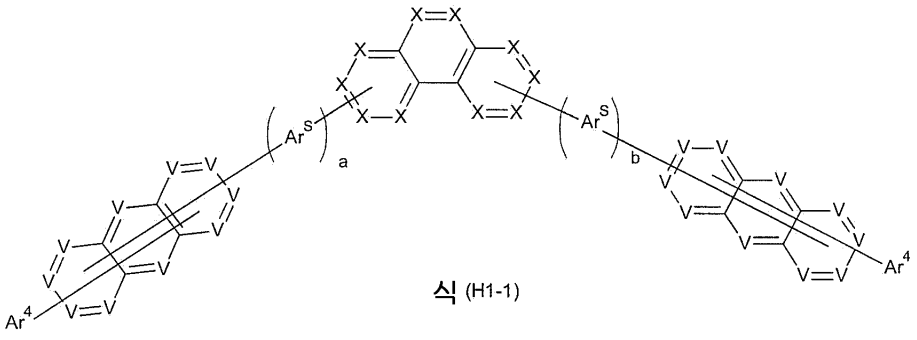
식 (H2-5)

식 중, 기호는 제 1 항에서와 동일한 의미를 가진다.

청구항 7

제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 (H1) 의 화합물은 하기 식 (H1-1) 의 화합물로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 조성물.



식 (H1-1)

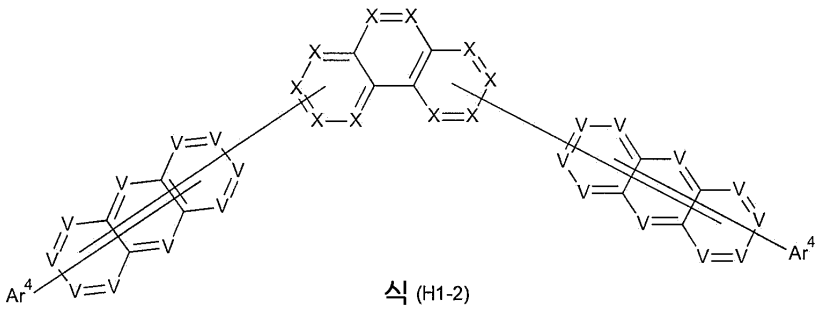
식 중 X, Ar^S, Ar^4 및 인덱스 a 및 b 는 제 1 항에서와 동일한 의미를 갖는다; 그리고

V 는 CR^V 또는 N이거나; 또는 V 는 Ar^4, Ar^S 또는 기 X 에 결합되는 경우 C이고; 여기서 R^V 는 제 1 항에서와 동일한 의미를 갖는다.

청구항 8

제 1 항 내지 제 7 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 (H1) 의 화합물은 하기 식 (H1-2) 의 화합물로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 조성물.



식 (H1-2)

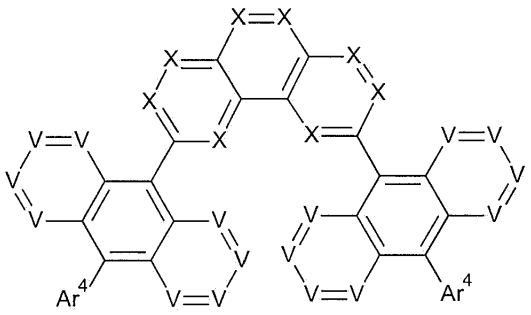
식 중 X 및 Ar^4 는 제 1 항에서와 동일한 의미를 갖고;

V 는 제 7 항에서와 동일한 의미를 갖는다.

청구항 9

제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 (H1) 의 화합물은 하기 식 (H1-3) 의 화합물로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 조성물.



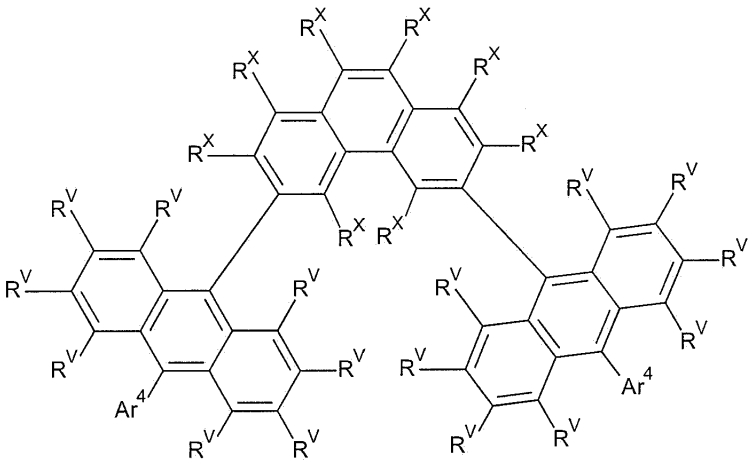
식 (H1-3)

식 중, 기호는 제 1 항 및 제 7 항에서와 동일한 의미를 가진다.

청구항 10

제 1 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 (H1) 의 화합물은 하기 식 (H1-4) 의 화합물로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 조성물.



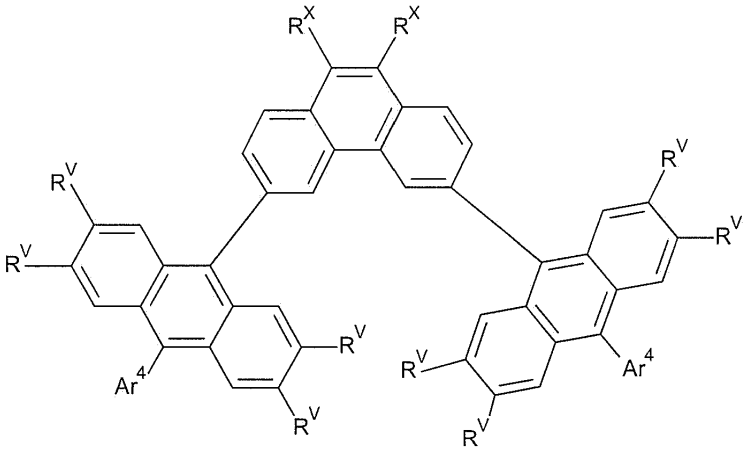
식 (H1-4)

식 중, 기호는 제 1 항에서와 동일한 의미를 가진다.

청구항 11

제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 (H1) 의 화합물은 하기 식 (H1-5) 의 화합물로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 조성물.



식 (H1-5)

식 중, 기호는 제 1 항에서와 동일한 의미를 가진다.

청구항 12

제 1 항 내지 제 11 항 중 어느 한 항에 있어서,

기 Ar^2, Ar^4 는 각각의 경우, 페닐, 바이페닐, 테르페닐, 쿼터페닐, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 트리페닐렌, 플루오란텐, 테트라센, 크리센, 벤즈안트라센, 벤조페난트라센, 피렌 또는 페릴렌, 디벤조푸란, 카르바졸 및 디벤조티오펜으로 이루어지고, 이들 각각은 임의의 자유 위치에서 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수도 있고; 여기서 Ar^2, Ar^4 는 또한 전술된 기 중 둘 이상의 조합일 수도 있는 것을 특징으로 하는 조성물.

청구항 13

제 1 항 내지 제 12 항 중 어느 한 항에 있어서,

형광 방출체를 더 포함하는 것을 특징으로 하는 조성물.

청구항 14

제 1 항 내지 제 13 항 중 어느 한 항에 있어서,

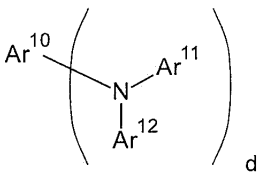
- 질소에 직접 결합된 3개의 치환 또는 비치환 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 함유하는 아릴아민;
- 적어도 14개의 방향족 고리 원자를 갖는 축합 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템;
- 인데노플루오렌, 인데노플루오렌아민 또는 인데노플루오렌디아민;
- 벤조인도노플루오렌, 벤조인데노플루오렌아민 또는 벤조인데노플루오렌디아민;
- 디벤조인데노플루오렌, 디벤조인데노플루오렌아민 또는 디벤조인데노플루오렌디아민;
- 적어도 10개의 방향족 고리 원자를 갖는 축합 아릴기를 함유하는 인데노플루오렌;
- 비스인데노인데노플루오렌;
- 인데노디벤조푸란, 인데노플루오렌아민 또는 인데노플루오렌디아민;
- 플루오렌 이량체;
- 페녹사진; 및
- 보론 유도체

로 이루어진 군으로부터 선택된 형광 방출체를 포함하는 것을 특징으로 하는 조성물.

청구항 15

제 1 항 내지 제 14 항 중 어느 한 항에 있어서,

V 는 하기 식 (E-1), (E-2) 또는 (E-3) 의 형광 방출체를 포함하는 것을 특징으로 하는 조성물.



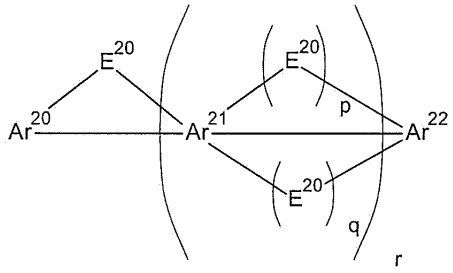
식 (E-1)

식 중

Ar^{10}, Ar^{11}, Ar^{12} 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 6 내지 60개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이며, 이는 각 경우에 또한 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수도 있고; 단, 적어도 하나의 기 Ar^{10}, Ar^{11}, Ar^{12} 는, 서로 축합된 2 내지 4개의 방향족 고리로 이루어지는 적어도 하나의 축합 아릴 또는 헤테로아릴 기를 함유하는 10 내지 40개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 여기서 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수도 있다;

R 는 제 1 항에서와 동일한 정의를 갖는다; 그리고

d 는 1, 2, 3 또는 4 이고; 보다 바람직하게, d 는 1이다;



식 (E-2)

식 중

Ar^{20}, Ar^{21}, Ar^{22} 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 각 경우에 또한 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있는, 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴 기이다;

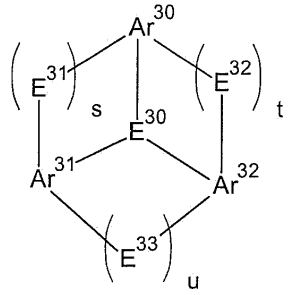
E^{20}는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, BR, $C(R^0)_2$, $Si(R^0)_2$, C=O, C=NR^0, C=$C(R^0)_2$, O, S, S=O, SO_2, NR^0, PR^0, P(=O)R^0 또는 P(=S)R^0 로부터 선택된 기이고; 여기서 Ar^{20}, Ar^{21} 및 E^{20} 는 함께 5원 고리 또는 6원 고리를 형성하고, Ar^{21}, Ar^{23} 및 E^{20} 는 함께 5원 고리 또는 6원 고리를 형성한다;

R^0 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, 1 내지 20 개, 바람직하게는 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 기 또는 3 내지 20 개, 바람직하게는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있고 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 O 또는 S 로 대체될 수도 있으며 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 로 대체될 수도 있음), 또는 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 5 내지 40 개, 바람직하게는 5 내지 30 개, 보다 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내고, 여기서 2 개의 인접한 라디칼 R^0 는 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는 지방족 또는 방향족 고리 시스템을 함께 형성할 수도 있고,

R 는 제 1 항에서와 동일한 정의를 갖는다;

p, q는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 0 또는 1 이며, 단, p + q = 1 이다;

r 은 1, 2 또는 3 이다;



식 (E-3)

식 중

Ar^{30}, Ar^{31}, Ar^{32} 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 5 내지 22개, 바람직하게는 5 내지 18개, 보다 바람직하게는 6 내지 14개의 방향족 고리 원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴 또는 헤테로아릴 기를 나타낸다;

E^{30} 는 B 또는 N 을 나타낸다;

E^{31}, E^{32}, E^{33} 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, O, S, $C(R^0)_2$, C=O, C=S, $C=NR^0$, $C=C(R^0)_2$, $Si(R^0)_2$, BR^0, NR^0, PR^0, SO_2, SeO_2 또는 화학 결합을 나타내고, 단, E^{30} 이 B이면, 기 E^{31}, E^{32}, E^{33} 중 적어도 하나는 NR^0 를 나타내고 E^{30} 가 N이면, 기 E^{31}, E^{32}, E^{33} 중 적어도 하나는 BR^0 를 나타낸다;

R^0 는 위와 동일한 정의를 갖는다;

s, t, u 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 0 또는 1 이며, 단, $s + t + u \geq 1$ 이다.

청구항 16

제 1 항 내지 제 15 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 (H1)의 화합물이 1 내지 60%의 비율로 상기 조성물에 존재하고 상기 식 (H2)의 화합물이 30 내지 99%의 비율로 상기 조성물에 존재하는 것을 특징으로 하는 조성물.

청구항 17

제 1 항 내지 제 16 항 중 어느 한 항에 기재된 적어도 하나의 조성물 및 적어도 하나의 용매를 포함하는 포뮬레이션.

청구항 18

제 1 항 내지 제 16 항 중 어느 한 항에 기재된 조성물을 포함하는 적어도 하나의 층을 포함하는 전자 디바이스의 제조 방법으로서,

a) 제 1 항 내지 제 16 항 중 어느 한 항에 기재된 적어도 하나의 조성물 및 적어도 하나의 용매를 포함하는 포뮬레이션을 제조하는 단계;

b) 층을 형성하기 위해 기판 상에 또는 다른 층 상에 단계 a) 에서 제조된 상기 포뮬레이션을 도포하는 단계;

c) 용매를 제거하기 위해 상기 층을 건조하는 단계

인, 전자 디바이스의 제조 방법.

청구항 19

제 18 항에 있어서,

상기 포뮬레이션은 코팅법 또는 인쇄법에 의해 도포되는 것을 특징으로 하는 전자 디바이스의 제조 방법.

청구항 20

제 18 항 또는 제 19 항에 있어서,

상기 포뮬레이션은 플러드(flood) 코팅, 딥 코팅, 스프레이 코팅, 스핀 코팅, 스크린 인쇄, 릴리프 인쇄, 그라비어 인쇄, 롤러 코팅, 잉크젯 인쇄, 회전 인쇄, 플렉소그래픽 인쇄, 오프셋 인쇄, 슬롯 다이 코팅 또는 노즐 인쇄에 의해 도포되는 것을 특징으로 하는 전자 디바이스의 제조 방법.

청구항 21

애노드, 캐소드, 및 적어도 하나의 방출 층을 포함하는 전자 디바이스로서,

상기 방출 층은 제 1 항 내지 제 16 항 중 어느 한 항에 따른 조성물을 포함하는, 전자 디바이스.

청구항 22

제 21 항에 있어서,

유기 전계 발광 디바이스, 유기 집적 회로, 유기 전계-효과 트랜지스터, 유기 박막 트랜지스터, 유기 발광 트랜지스터, 유기 태양 전지, 염료-감응형 유기 태양 전지, 유기 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 필드-켄치 디바이스, 발광 전기화학 전지, 유기 레이저 다이오드 및 유기 플라스몬 방출 디바이스로 이루어지는 군으로부터 선

택되는, 전자 디바이스.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본 발명은 식 (H1) 의 화합물 및 식 (H2) 의 화합물을 포함하는 조성물에 관한 것이다. 본 발명은 또한, 식 (H1) 의 화합물 및 식 (H2) 의 화합물을 포함하는 조성물 및 용매를 포함하는 포뮬레이션에 관한 것이다. 마지막으로, 본 발명은 이러한 조성물을 포함하는 전자 디바이스에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] 현재, 전자 디바이스에서 사용하기 위한 기능성 화합물의 개발은 집중적인 연구 대상이다. 그 목적은, 특히, 예를 들어 디바이스의 전력 효율 및 수명, 그리고 방출된 광의 색 좌표와 같은 하나 이상의 관련 점에서 전자 디바이스의 개선된 특성이 달성될 수 있는 화합물의 개발이다.

[0003] 본 발명에 따르면, 용어 전자 디바이스는 특히 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 디바이스(OFQD), 유기 발광 전기화학 전지 (OLEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 유기 전계 발광 디바이스(OLED) 를 의미한다.

[0004] OLED 로 지칭되는 마지막에 언급된 전자 디바이스에서 사용하기 위한 화합물을 제공하는 것이 특히 흥미롭다. OLED 의 일반적 구조 및 기능적 원리는 당업자에게 공지되어 있고, 예를 들어 US 4539507 에 기재되어 있다.

[0005] 특히, 광대한 상업적 용도 측면에서, 예를 들어 디스플레이 디바이스에서 또는 광원으로서 OLED 의 성능 데이터에 대한 추가의 개선이 여전히 요구된다. 이에 관해, 달성된 OLED 의 수명, 효율 및 작동 전압 그리고 색상 값이 특히 중요하다. 특히, 청색 방출 OLED 의 경우, 디바이스의 효율, 수명 및 동작 전압에 관한 개선 가능성이 있다.

[0006] 상기 개선을 달성하기 위한 중요한 출발점은 방출체 화합물 및 호스트 화합물의 선택이다. 실제로, 방출체 화합물은 일반적으로 매트릭스 화합물 또는 호스트 화합물의 역할을 하는 제 2 화합물과 조합하여 방출층에 사용된다. 여기서 방출체 화합물은 전자 디바이스의 작동 동안 광을 방출하는 화합물을 의미하는 것으로 여겨진다. 이 경우에 호스트 화합물은 방출체 화합물보다 더 많은 비율로 혼합물에 존재하는 화합물을 의미하는 것으로 여겨진다. 매트릭스 화합물이라는 용어와 호스트 화합물이라는 용어는 동의어로 사용될 수 있다. 호스트 화합물은 바람직하게는 광을 방출하지 않는다. 복수의 상이한 호스트 화합물이 방출층의 혼합물에 존재하더라도, 그들의 개별 비율은 전형적으로 방출체 화합물의 비율, 또는 복수의 방출체 화합물이 방출층의 혼합물에 존재하는 경우 개별 방출체 화합물의 비율보다 크다.

[0007] 이러한 실시형태는 예를 들어 US 4769292에서 형광 방출층에 대해 설명되어 있다.

[0008] 복수의 화합물의 혼합물이 방출층에 존재하는 경우, 방출체 화합물은 전형적으로 더 적은 양으로, 즉 방출층의 혼합물에 존재하는 다른 화합물보다 더 적은 비율로 존재하는 성분이다. 이 경우에, 방출체 화합물은 도펀트라고도 한다.

[0009] 종래 기술로부터 공지된 형광 방출체를 위한 호스트 재료는 다수의 화합물이다. 방출층은 하나 이상의 호스트 화합물을 포함할 수도 있다.

[0010] 페난트렌 기를 포함하는 호스트 화합물은 종래 기술에(예를 들어, WO 2009/100925)에 개시되어 있다. 벤즈안트라센 기를 포함하는 호스트 화합물이 또한 종래 기술에(예를 들어, WO 2015/158409)에 개시되어 있다.

[0011] 그러나, OLED 에서 채용될 수 있고 수명, 색상 방출 및 효율의 측면에서 매우 양호한 특성을 갖는 OLED 에 이를 수 있는, 형광 방출체를 위한 추가 호스트 재료가 여전히 필요하다. 보다 구체적으로, 매우 높은 효율, 매우 양호한 수명 및 매우 양호한 열 안정성을 조합하는 형광 방출체용 호스트 재료가 필요하다.

[0012] 또한, OLED는, 진공 챔버에서 증착에 의해 또는 용액으로부터의 처리에 의해 적용될 수도 있는, 상이한 층들을 포함할 수도 있다는 것이 알려져 있다. 증착에 기초한 공정은 매우 양호한 결과에 이르지만, 이러한 공정은 복잡하고 비용이 많이 들 수도 있다. 따라서, 용액으로부터 용이하게 그리고 신뢰적으로 처리될 수 있는 OLED 재료를 포함하는 조성물이 또한 필요하다. 보다 구체적으로, 포뮬레이션으로부터, 보다 특히 잉크와

같은 용액으로부터 처리될 때 OLED의 제조 동안 균일한 필름으로서 성막될 수 있는 OLED 재료를 포함하는 조성물이 필요하다. 이 경우, 재료는 그를 포함하는 용액에서 우수한 용해도 특성을 가져야 하고 OLED 재료를 포함하는 성막된 필름은 용매 제거로 이어지는 건조 단계 후에 가능한 한 매끄러워야 한다. 성막된 층이 매끄럽고 균일한 필름을 형성하는 것이 중요한데, 층 두께가 불균일하면 필름 두께가 얇은 영역은 휘도가 증가하고 더 두꺼운 영역은 휘도가 감소하는 불균일한 휘도 분포를 유발하여, OLED 품질의 저하에 이르기 때문이다.

동시에, 용액으로부터 처리된 필름을 포함하는 OLED는 예를 들어 수명, 작동 전압 및 효율 측면에서 우수한 성능을 나타내야 한다.

[0013] 또한, 정제가 용이하고 처리가 용이한 안정된 OLED 재료에 이르는 공정이 여전히 필요하다. OLED 재료를 허용 가능한 순도 및 높은 수율로 제공함으로써 경제적이고 질적으로 흥미로운 공정이 필요하다.

발명의 내용

해결하려는 과제

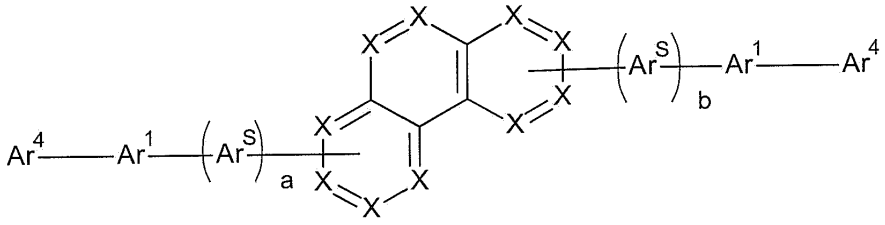
[0014] 따라서, 본 발명은 OLED와 같은 전자 디바이스, 보다 특히 형광 방출체용 매트릭스 성분으로서 사용하기에 적합한 OLED 재료를 포함하는 조성물을 제공하는 기술적 목적에 기초한다. 본 발명은 또한 용액 처리에 특히 적합한 OLED 재료를 포함하는 조성물을 제공하는 기술적 목적에 기초한다. 본 발명은 또한 공정들을 제공하는 기술적 목적에 기초한다.

과제의 해결 수단

[0015] 전자 디바이스에 사용하기 위한 신규한 조성물에 관한 연구에서, 이제, 아래 정의된 바와 같은 식 (H1) 의 화합물 및 식 (H2) 의 화합물을 포함하는 조성물이 전자 디바이스에 사용하기에 뛰어나게 적합한 것을 알아냈다.

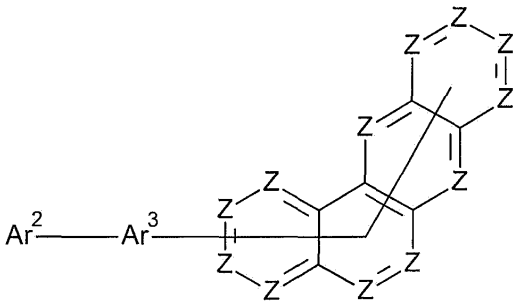
특히, 이들은 전술한 기술적 목적 중 하나 이상, 바람직하게는 전부를 달성한다.

[0016] 따라서 본원은 식 (H1) 의 화합물 및 식 (H2) 의 화합물을 포함하는 조성물에 관한 것이다,



식 (H1)

[0017]



식 (H2)

[0018]

[0019] 식 중 사용된 기호 및 인덱스들에 이하가 적용된다:

[0020] X 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, CR^X 또는 N 을 나타내거나; 또는 X 가 기 Ar^1 또는 Ar^S 에 결합되는 경우 X 는 C 이다;

[0021] Z 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, CR^Z 또는 N 을 나타내거나; 또는 Z 가 기 Ar^3 에 결합되는 경우 Z 는 C

이다;

[0022] Ar^1 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 각 경우에 또한 하나 이상의 라디칼 R^V 에 의해 치환될 수도 있는, 10 내지 60개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴 기이다;

[0023] Ar^3 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 각 경우에 또한 하나 이상의 라디칼 R^Y 에 의해 치환될 수도 있는, 10 내지 60개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴 기이다;

[0024] Ar^2, Ar^4, Ar^S 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 각 경우에 또한 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이다;

[0025] R^V, R^X, R^Y, R^Z 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CHO, CN, C(=O)Ar, $P(=O)(Ar)_2$, S(=O)Ar, $S(=O)_2Ar$, $N(R)_2$, $N(Ar)_2$, NO_2, $Si(R)_3$, $B(OR)_2$, OSO_2R, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있고, 여기서 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 RC=CR, C≡C, $Si(R)_2$, $Ge(R)_2$, $Sn(R)_2$, C=O, C=S, C=Se, P(=O)(R), SO, SO_2, O, S 또는 CONR 로 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 로 대체될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 기를 나타내고; 여기서 2 개의 인접한 라디칼 R^V, 2개의 인접한 라디칼 R^X, 2개의 인접한 라디칼 R^Y, 2개의 인접한 라디칼 R^Z 은, 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 함께 형성할 수도 있다;

[0026] R 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CHO, CN, C(=O)Ar, $P(=O)(Ar)_2$, S(=O)Ar, $S(=O)_2Ar$, $N(R')_2$, $N(Ar)_2$, NO_2, $Si(R')_3$, $B(OR')_2$, OSO_2R', 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R′ 에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 R′C=CR′, C≡C, $Si(R')_2$, $Ge(R')_2$, $Sn(R')_2$, C=O, C=S, C=Se, P(=O)(R′), SO, SO_2, O, S 또는 CONR′ 에 의해 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R′ 에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 또는 하나 이상의 라디칼 R′ 에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기를 나타내고; 여기서 2 개의 인접한 치환기 R 은 하나 이상의 라디칼 R′ 에 의해 치환될 수도 있는, 지방족 또는 방향족 고리 시스템을 함께 형성할 수도 있다;

[0027] Ar 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R′ 에 의해 또한 치환될 수도 있는 5 내지 60개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이다;

[0028] R′ 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (여기서 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 SO, SO_2, O, S 로 대체될 수도 있고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br 또는 I 로 대체될 수도 있음), 또는 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타낸다; 그리고

[0029] a, b는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 0 또는 1이고; 여기서 a 또는 b가 0일 때, 대응하는 Ar^S 는 부재하고 기 Ar^1 은 기 X에 직접 결합된다.

[0030] 본 발명의 의미에서 인접 치환기는 서로 직접 링크되는 원자에 결합되거나 동일한 원자에 결합되는 치환기이다.

[0031] 더욱이, 아래 화학 기의 정의가 본 출원의 목적을 위해 적용된다:

[0032] 본 발명의 의미에서 아릴 기는 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자, 바람직하게는 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자, 보다 바람직하게는 6 내지 20 개의 방향족 고리 원자를 함유하고; 본 발명의 의미에서 헤테로아릴 기는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자, 바람직하게는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자, 보다 바람직하게는 5 내지 20 개의 방향족 고리 원자를 함유하며, 이들 중 적어도 하나는 헤테로원자이다. 헤테로원자는 바람직하게 N, O 및 S 로부터 선택된다. 이는 기본 정의를 나타낸다. 다른 선호들이 본 발명의 상세한 설명에 표시되는 경우, 예를 들어 존재하는 방향족 고리 원자 또는 헤테로원자의 수와 관련하여, 이들이 적용된다.

[0033] 여기서 아릴기 또는 헤테로아릴기는 단순 방향족 고리, 즉 벤젠, 또는 단순 헤테로방향족 고리, 예를 들어 피리딘, 피리미딘 또는 티오펜, 또는 축합 (어닐레이트된 (annellated)) 방향족 또는 헤테로방향족 다환, 예를 들어 나프탈렌, 페난트렌, 퀴놀린 또는 카르바졸을 의미하는 것으로 여겨진다. 축합된 (어닐레이트된) 방향족 또는 헤테로방향족 다환은 본 출원의 의미에서 서로 축합된 2 개 이상의 단순 방향족 또는 헤테로방향족 고리로 이루어진다.

[0034] 각 경우에 위에 언급된 라디칼로 치환될 수 있고 임의의 원하는 위치를 통해 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템에 링크될 수도 있는, 아릴 또는 헤테로아릴 기는, 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, 벤즈이미다졸, 나프트이미다졸, 페난트리미다졸, 피리디미다졸, 피라진이미다졸, 퀴녹살린이미다졸, 옥사졸, 벤즈옥사졸, 나프트옥사졸, 안트르옥사졸, 페난트르옥사졸, 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, 퓨린, 프테리딘, 인돌리진 및 벤조티아디아졸로부터 유도되는 기를 의미하는 것으로 여겨진다.

[0035] 본 발명의 정의에 따른 아릴옥시기는 산소 원자를 통해 결합되는, 위에 정의된 바와 같은, 아릴기를 의미하는 것으로 여겨진다. 유사한 정의가 헤테로아릴옥시 기에 적용된다.

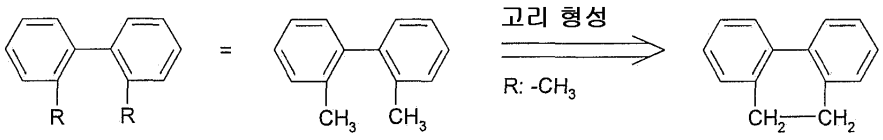
[0036] 본 발명의 의미에서 방향족 고리 시스템은 고리 시스템에 6 내지 60 개의 탄소 원자, 바람직하게 6 내지 40 개의 탄소 원자, 보다 바람직하게 6 내지 20 개의 탄소 원자를 함유한다. 본 발명의 의미에서 헤테로방향족 고리 시스템은 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자, 바람직하게 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자, 보다 바람직하게 5 내지 20 개의 방향족 고리 원자를 함유하며, 그 중 적어도 하나는 헤테로원자이다. 헤테로원자는 바람직하게 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 본 발명의 의미에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은, 아릴 또는 헤테로아릴 기들만을 반드시 포함할 필요는 없고, 대신에, 추가적으로, 복수의 아릴 또는 헤테로아릴 기들이 비방향족 단위 (바람직하게는 H 외에 10% 미만의 원자들), 이를테면, 예를 들어, sp^3-혼성 C, Si, N 또는 O 원자, sp^2-혼성 C 또는 N 원자 또는 sp-혼성 C 원자에 의해 연결될 수도 있는, 시스템을 의미하는 것으로 여겨지도록 의도된다. 따라서, 예를 들어 9,9'-스피로바이플루오렌, 9,9'-디아릴플루오렌, 트리아릴아민, 디아릴 에테르, 스틸벤 등과 같은 시스템은 또한, 2 개 이상의 아릴기가 예를 들어 선형 또는 환형 알킬, 알케닐 또는 알키닐기에 의해, 또는 실릴기에 의해 연결되는 시스템과 같이, 본 발명의 맥락에서 방향족 고리 시스템인 것으로 여겨지게 의도된다. 또한, 2개 이상의 아릴 또는 헤테로아릴기가 단일 결합을 통해 서로 링크되는 시스템은 또한 본 발명의 의미에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 이를테면 예를 들어, 바이페닐, 테르페닐 또는 디페닐트리아진과 같은 시스템인 것으로 여겨진다.

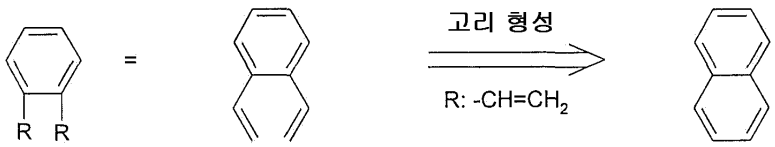
[0037] 또한 각 경우에 위에 정의된 바와 같은 라디칼에 의해 치환될 수도 있으며 임의의 원하는 위치를 통해 방향족 또는 헤테로방향족 기에 링크될 수도 있는, 5 - 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 특히, 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센, 페난트렌, 벤조페난트렌, 피렌, 크리센, 페릴렌, 플루오란텐, 나프타센, 펜타센, 벤조피렌, 바이페닐, 바이페닐렌, 테르페닐, 테르페닐렌, 쿼터페닐, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 디히드로페난트렌, 디히드로피렌, 테트라히드로피렌, 시스- 또는 트랜스-인데노플루오렌, 트룩센, 이소트룩센, 스피로트룩센, 스피로이소트룩센, 푸란, 벤조푸란, 이소벤조푸란, 디벤조푸란, 티오펜, 벤

조티오펜, 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, 벤즈이미다졸, 나프트이미다졸, 페난트르이미다졸, 피리디미다졸, 피라진이미다졸, 퀴녹살린이미다졸, 옥사졸, 벤즈옥사졸, 나프트옥사졸, 안트르옥사졸, 페난트르옥사졸, 이소옥사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴녹살린, 1,5-디아자안트라센, 2,7-디아자피렌, 2,3-디아자피렌, 1,6-디아자피렌, 1,8-디아자피렌, 4,5-디아자피렌, 4,5,9,10-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, 퓨린, 프테리딘, 인돌리진 및 벤조티아디아졸에서 유래된 기, 또는 이들 기의 조합을 의미하는 것으로 여겨진다.

[0038] 본 발명의 목적을 위해, 추가적으로 개개의 H 원자 또는 CH_2 기가 라디칼의 정의하에 위에 언급된 기에 의해 치환될 수도 있는, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기, 또는 2 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기는 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 의미하는 것으로 여겨진다. 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 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 의미하는 것으로 여겨진다

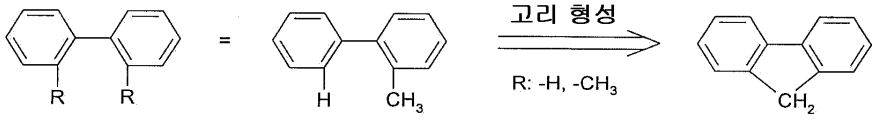
[0039] 둘 이상의 라디칼이 서로 고리를 형성할 수 있는 포뮬레이션은, 본 출원의 목적을 위해, 그 중에서도, 2 개의 라디칼이 서로 화학 결합에 의해 링크되는 것을 의미하는 것으로 의도된다. 이것은 다음 도식으로 설명된다:





[0040]

[0041] 그러나, 더욱이, 위에 설명된 포뮬레이션은 또한, 2 개의 라디칼 중 하나가 수소를 나타내는 경우에, 수소 원자가 결합되었던 위치에 제 2 라디칼이 결합되어 고리를 형성하는 것을 의미하는 것으로 의도된다. 이것은 다음 도식으로 설명된다:

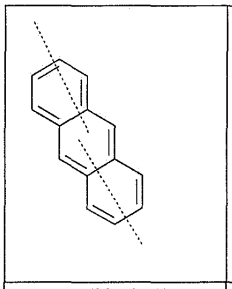
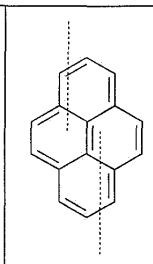
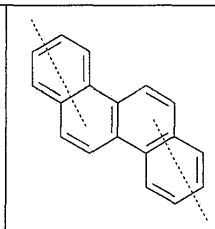
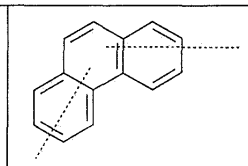
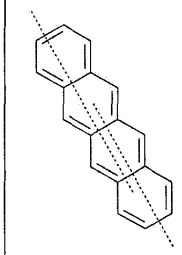
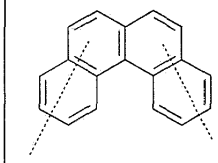
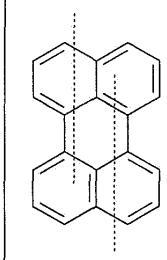
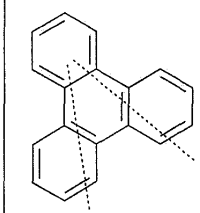
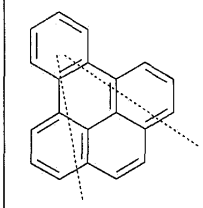
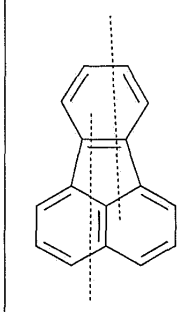
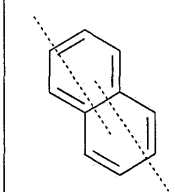


[0042]

[0043] 바람직하게, 기 Ar^1 및 Ar^3 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 안트라센, 페난트렌, 피렌, 크리센, 페릴렌, 플루오란텐, 벤즈안트라센, 벤조페난트렌, 테트라센 또는 펜타센을 나타내며, 이들 각각은 각 경우에 Ar^1 에 대해 임의의 자유 위치에서 하나 이상의 라디칼 R^V 에 의해 또는 Ar^3에 대해 임의의 자유 위치에서 하나 이상의 라디칼 R^Y 에 의해 치환될 수도 있다.

[0044] 바람직하게, 기 Ar^1, Ar^3 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 10 내지 18개의 방향족 고리 원자를 갖는 축합된 아릴기를 나타낸다. 보다 바람직하게, 기 Ar^1, Ar^3 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 안트라센, 나프탈렌, 페난트렌, 테트라센, 크리센, 벤즈안트라센, 벤조페난트렌, 피렌, 페릴렌, 트리페닐렌, 벤조피렌 또는 플루오란텐을 나타내며, 이들 각각은 임의의 자유 위치에서 Ar^1 의 경우에 하나 이상의 라디칼 R^V 또는 Ar^3의 경우에 R^Y 에 의해 치환될 수도 있다. 매우 바람직하게, 기 Ar^1 , Ar^3 은 안트라센 기를 나타내며, 이는 Ar^1에 대해 임의의 자유 위치에서 하나 이상의 라디칼 R^V 에 의해 또는 Ar^3에 대해 임의의 자유 위치에서 하나 이상의 라디칼 R^Y 에 의해 치환될 수도 있다.

[0045] 적합한 기 Ar^1 및 Ar^3 의 예는 아래 표에 표현되는 식 (Ar1-1) 내지 (Ar1-11) 의 기이다:

			
(Ar1-1)	(Ar1-2)	(Ar1-3)	(Ar4-4)
			
(Ar1-5)	(Ar1-6)	(Ar1-7)	(Ar4-8)
			
(Ar1-9)	(Ar1-10)	(Ar1-11)	

[0046]

[0047] 식 중

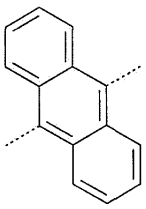
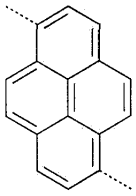
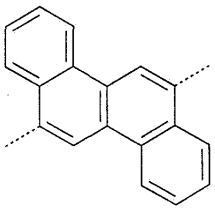
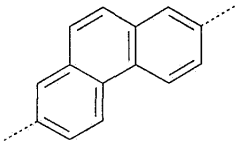
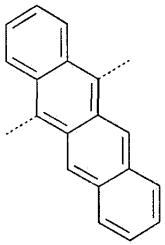
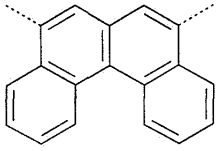
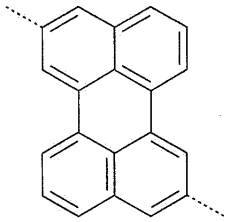
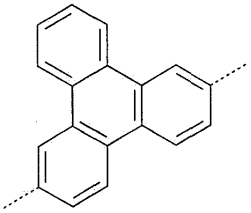
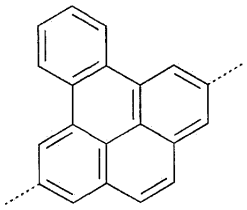
[0048] 점선 결합은 인접한 기에 대한 결합을 나타내고; 식 (Ar1-1) 내지 (Ar1-11)의 기는 각 자유 위치에서 Ar^1 의 경우에 기 R^V 에 의해 또는 Ar^3 의 경우에 기 R^Y 에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 R^V 및 R^Y 는 위와 같은 의미를

갖는다.

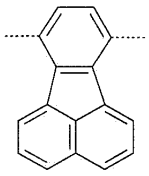
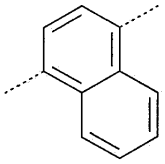
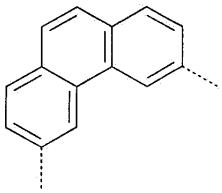
[0049] 식 (Ar1-1) 내지 (Ar1-11) 의 기 중에서, 식 (Ar1-1) 의 기가 바람직하다.

[0050] 매우 적합한 기 Ar^1 및 Ar^3 의 예는 아래 표에 표현되는 식 (Ar1-1-1) 내지 (Ar1-12-1) 의 기이다:

[0051]

		
(Ar1-1-1)	(Ar1-2-1)	(Ar1-3-1)
		
(Ar1-4-1)	(Ar1-5-1)	(Ar1-6-1)
		
(Ar1-7-1)	(Ar1-8-1)	(Ar1-9-1)

[0052]

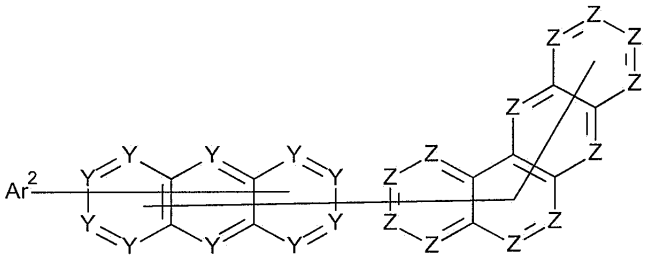
		
(Ar1-10-1)	(Ar1-11-1)	(Ar1-12-1)

[0053] 식 중

[0054] 점선 결합은 인접한 기에 대한 결합을 나타내고; 식 (Ar1-1-1) 내지 (Ar1-12-1)의 기는 각 자유 위치에서 Ar^1 의 경우에 기 R^V 에 의해 또는 Ar^3 의 경우에 기 R^Y 에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 R^V 및 R^Y 는 위와 동일한 의미를 갖는다.

[0055] 식 (Ar1-1-1) 내지 (Ar1-12-1) 의 기 중에서, 식 (Ar1-1-1) 의 기가 바람직하다.

[0056] 바람직하게, 식 (H2) 의 화합물은 식 (H2-1) 의 화합물로부터 선택되고,



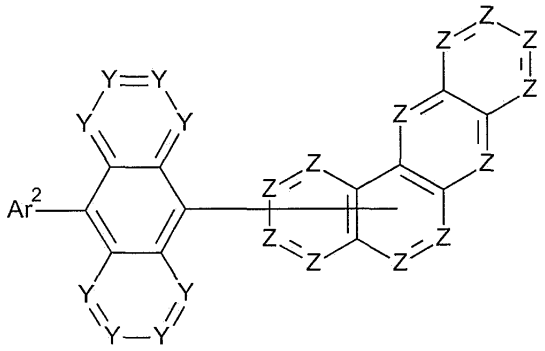
식 (H2-1)

[0057]

[0058] 식 중, 기호 Ar^2 및 Z 는 위와 동일한 의미를 갖고,

[0059] Y 는 CR^Y 또는 N이거나; 또는 Y 는 Ar^2 또는 기 Z 에 결합되는 경우 C이고; 여기서 R^Y 는 위와 동일한 의미를 갖는다.

[0060] 보다 바람직하게, 식 (H2) 의 화합물은 식 (H2-2) 의 화합물로부터 선택되고,

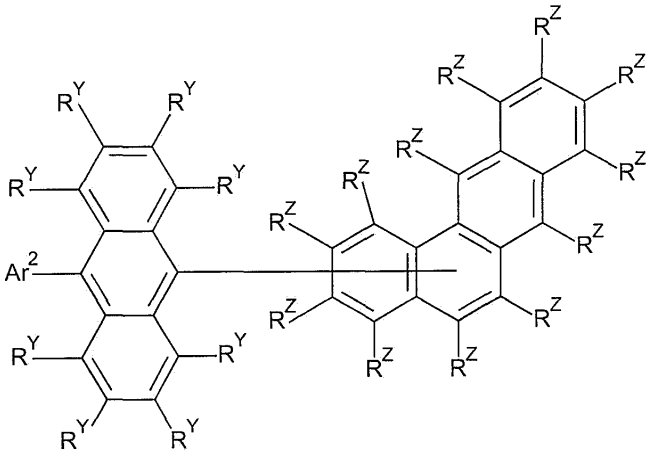


식 (H2-2)

[0061]

[0062] 식중 Ar^2, Y, Z 는 위와 동일한 의미를 갖는다.

[0063] 더욱 더 바람직하게, 식 (H2) 의 화합물은 식 (H2-3) 의 화합물로부터 선택되고,

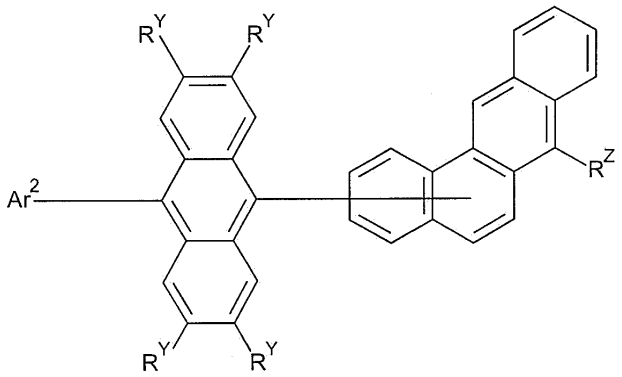


식 (H2-3)

[0064]

[0065] 여기서 기호는 위와 동일한 의미를 가지며, 단, 기 CR^Z 는 인접한 안트라센의 결합 위치에서 기 C에 대응한다.

[0066] 특히 바람직하게, 식 (H2) 의 화합물은 식 (H2-4) 의 화합물로부터 선택되고,

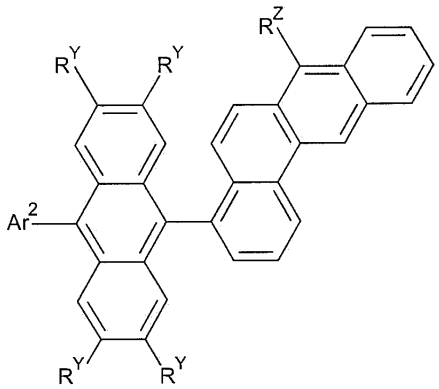


식 (H2-4)

[0067]

[0068] 식 중 기호는 위와 동일한 의미를 갖는다.

[0069] 매우 특히 바람직하게, 식 (H2) 의 화합물은 식 (H2-5) 의 화합물로부터 선택되고,

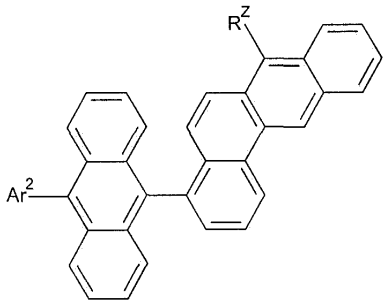


식 (H2-5)

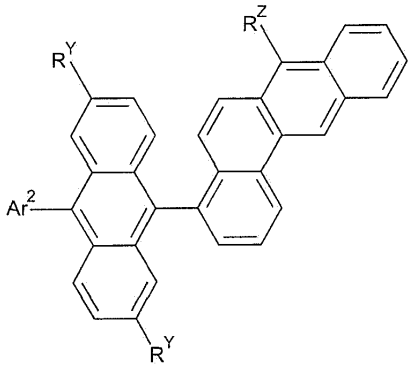
[0070]

[0071] 식 중 기호는 위와 동일한 의미를 갖는다.

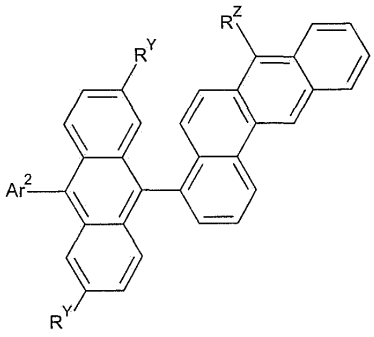
[0072] 식 (H2-5) 의 매우 적합한 화합물의 예는 화합물 (H2-5-1) 내지 (H2-5-4) 이다:



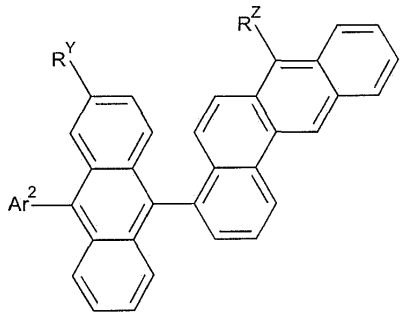
식 (H2-5-1)



식 (H2-5-2)



식 (H2-5-3)



식 (H2-5-4)

[0073]

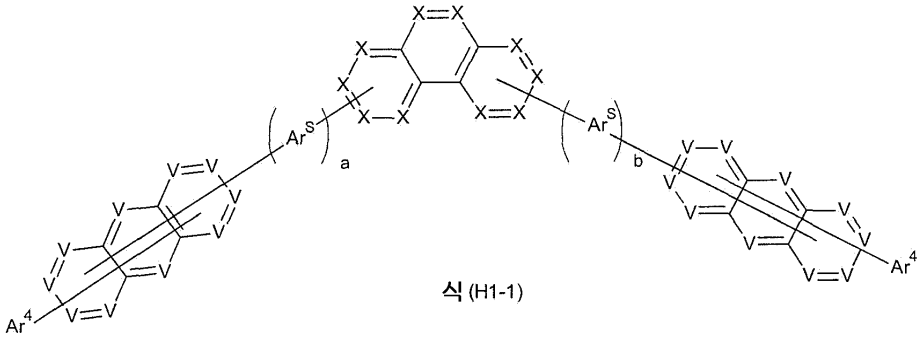
[0074] 식 중 기호는 위와 동일한 의미를 갖는다.

[0075] 바람직하게는, R^Y, R^Z 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, 1 내지 40개, 바람직하게는 1 내지 20개, 보다 바람직하게는 1 내지 10개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기, 또는 3 내지 40개, 바람직하게는 3 내지 20개, 보다 바람직하게는 3 내지 10개의 탄소 원자를 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수 있고, 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 RC=CR, C≡C, O 또는 S 에 의해 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F에 의해 대체될 수 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수 있는 5 내지 60개, 바람직하게는 5 내지 40개, 보다 바람직하게는 5 내지 30개, 특히 바람직하게는 5 내지 18개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타낸다. 보다 바람직하게, R^Y, R^Z 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, 1 내지 20 개, 바람직하게는 1 내지 10 개, 보다 바람직하게는 1 내지 6 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 기, 3 내지 20 개, 바람직하게는 3 내지 10 개, 보다 바람직하게는 3 내지 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 40 개, 바람직하게는 5 내지 30 개, 보다 바람직하게는 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타낸다.

[0076] 특히 바람직하게, R^Y 는 H 를 나타낸다.

[0077] 특히 바람직하게, R^Z 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 1 내지 10 개, 보다 바람직하게는 1 내지 6 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 기 또는, 3 내지 10 개, 바람직하게는 3 내지 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 40 개, 바람직하게는 5 내지 30 개, 보다 바람직하게는 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타낸다.

[0078] 바람직하게, 식 (H1) 의 화합물은 식 (H1-1) 의 화합물로부터 선택되고,



식 (H1-1)

[0079]

[0080] 식 중 기호 X, Ar^S, Ar^4 및 인덱스 a 및 b 는 위와 같은 의미를 갖는다; 그리고

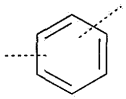
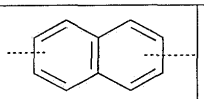
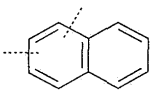
[0081] V 는 CR^V 또는 N이거나; 또는 V 는 Ar^4, Ar^S 또는 기 X 에 결합되는 경우 C이고; 여기서 R^V 는 위와 동일한 의미를 갖는다.

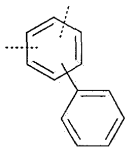
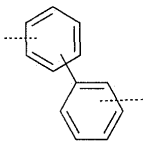
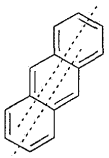
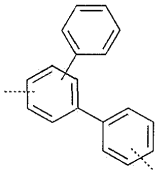
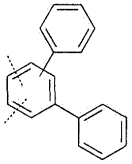
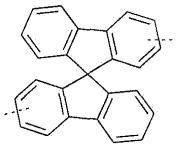
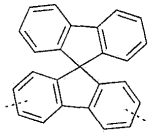
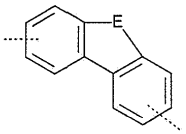
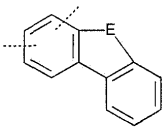
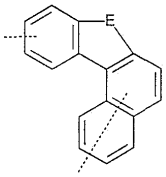
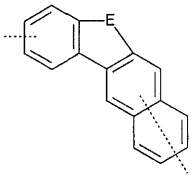
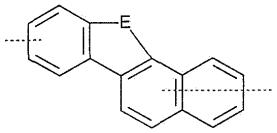
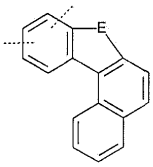
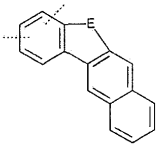
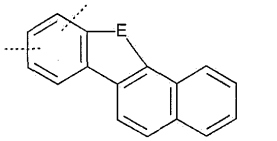
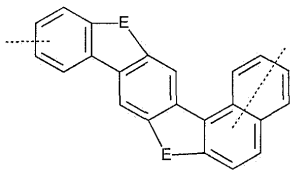
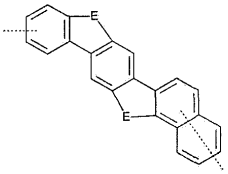
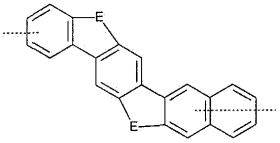
[0082] 바람직하게는, 인덱스 a 및 b는 0과 동일하여, 기 Ar^S 가 부재하고 안트라센 모이어티는 페난트렌 모이어티에 직접 결합된다.

[0083] 바람직하게는, 기 Ar^S 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 페닐, 바이페닐, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 나프탈렌, 페난트렌, 안트라센, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 카르바졸, 피리딘, 피리미딘, 피라진, 피리다진, 트리아진, 벤조피리딘, 벤조피리다진, 벤조피리미딘 및 퀴나졸린을 나타내고, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있다.

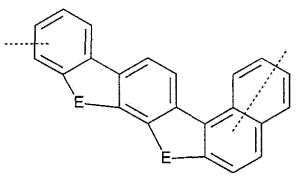
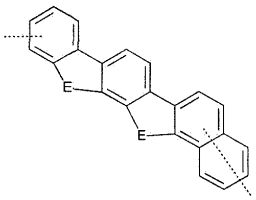
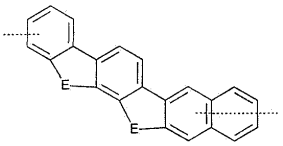
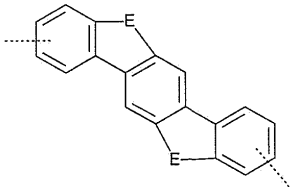
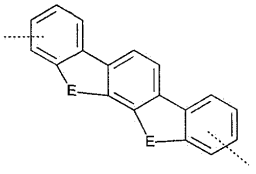
[0084] 적합한 기 Ar^S 의 예는 아래 표에 나타낸 바와 같은 식 (ArS-1) 내지 (ArS-26) 의 기이다:

[0085]

		
(ArS-1)	(ArS-2)	(ArS-3)

		
(ArS-4)	(ArS-5)	(ArS-6)
		
(ArS-7)	(ArS-8)	(ArS-9)
		
(ArS-10)	(ArS-11)	(ArS-12)
		
(ArS-13)	(ArS-14)	(ArS-15)
		
(ArS-16)	(ArS-17)	(ArS-18)
		
(ArS-19)	(ArS-20)	(ArS-21)

[0086]

		
(ArS-22)	(ArS-23)	(ArS-24)
		
(ArS-25)	(ArS-26)	

[0087]

[0088] 식 중 점선 결합은 식 (1) 에서 인접한 기에 대한 결합을 나타내고;

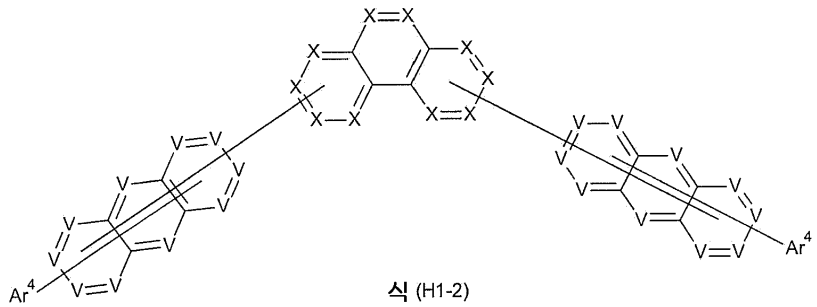
[0089] 여기서 식 (ArS-1) 내지 (ArS-26) 의 기는, 위에 정의된 바와 동일한 의미를 갖는, 기 R 에 의해 각각의 자유 위치에서 치환될 수도 있다.

[0090] 기 E 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, $-BR^0-$, $-C(R^0)_2-$, $-Si(R^0)_2-$, $-C(=O)-$, $-O-$, $-S-$, $-S(=O)-$, $-SO_2-$, $-N(R^0)-$, 및 $-P(R^0)-$ 로부터 선택되고,

[0091] 식 중, R^0 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, 1 내지 20 개, 바람직하게는 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 기 또는 3 내지 20 개, 바람직하게는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있고, 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 O 또는 S 로 대체될 수도 있으며 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 로 대체될 수도 있음), 또는 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 5 내지 40 개, 바람직하게는 5 내지 30 개, 보다 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내고, 여기서 2 개의 인접한 라디칼 R^0 는 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있는 지방족 또는 방향족 고리 시스템을 함께 형성할 수도 있다.

[0092] 식 (ArS-1) 내지 (ArS-26)의 기 중에서, 식 (ArS-1), (ArS-2), (ArS-3), (ArS-11) 및 (ArS-12)의 기가 바람직하다. 식 (ArS-1), (ArS-2), (ArS-3) 의 기가 매우 바람직하다.

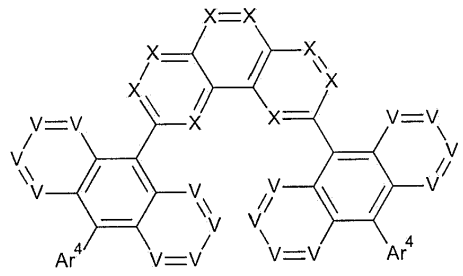
[0093] 보다 바람직하게, 식 (H1) 의 화합물은 식 (H1-2) 의 화합물로부터 선택되고,

[0094] 

식 (H1-2)

[0095] 식 중 X, Ar^4 및 V 는 위와 동일한 의미를 갖는다.

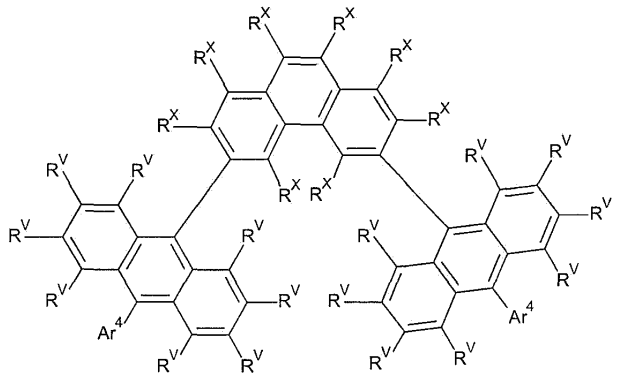
[0096] 더욱 더 바람직하게, 식 (H1) 의 화합물은 식 (H1-3) 의 화합물로부터 선택되고,

[0097] 

식 (H1-3)

[0098] 식 중 기호는 위와 동일한 의미를 갖는다.

[0099] 특히 바람직하게, 식 (H1) 의 화합물은 식 (H1-4) 의 화합물로부터 선택되고,

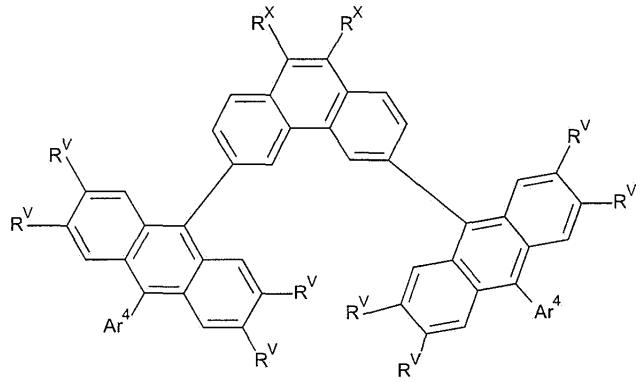


식 (H1-4)

[0100]

[0101] 식 중 기호는 위와 동일한 의미를 갖는다.

[0102] 매우 특히 바람직하게, 식 (H1) 의 화합물은 식 (H1-5) 의 화합물로부터 선택되고,

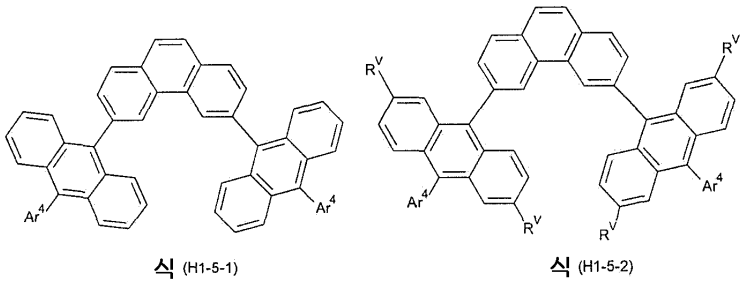


식 (H1-5)

[0103]

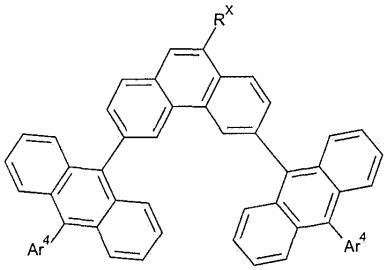
[0104] 식 중, 기호는 제 1 항에서와 동일한 의미를 가진다.

[0105] 식 (H1-5) 의 매우 적합한 화합물의 예는 화합물 (H1-5-1) 내지 (H1-5-4) 이다:

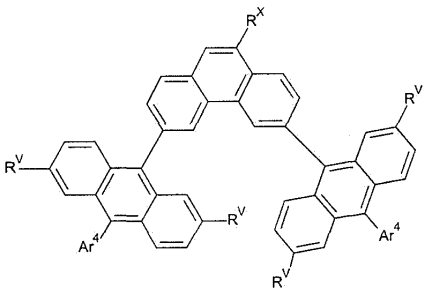


식 (H1-5-1)

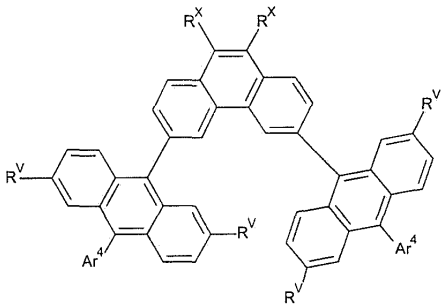
식 (H1-5-2)



식 (H1-5-3)



식 (H1-5-4)



식 (H1-5-5)

[0106]

[0107] 식 중 기호는 위와 동일한 의미를 갖는다.

[0108] 바람직하게는, R^X, R^V 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, 1 내지 40개, 바람직하게는 1 내지 20개, 보다 바람직하게는 1 내지 10개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기, 또는 3 내지 40개, 바람직하게는 3 내지 20개, 보다 바람직하게는 3 내지 10개의 탄소 원자를 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수 있고, 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 RC=CR, C≡C, O 또는 S 에 의해 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F에 의해 대체될 수 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수 있는 5 내지 60개, 바람직하게는 5 내지 40개, 보다 바람직하게는 5 내지 30개, 특히 바람직하게는 5 내지 18개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타낸다. 보다 바람직하게, R^X, R^V 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, 1 내지 20 개, 바람직하게는 1 내지 10 개, 보다 바람직하게는 1 내지 6 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 기, 3 내지 20 개, 바람직하게는 3 내지 10 개, 보다 바람직하게는 3 내지 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 40 개, 바람직하게는 5 내지 30 개, 보다 바람직하게는 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타낸다.

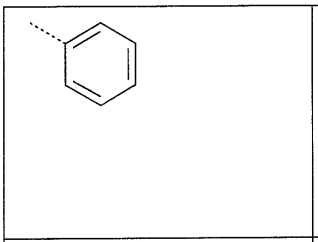
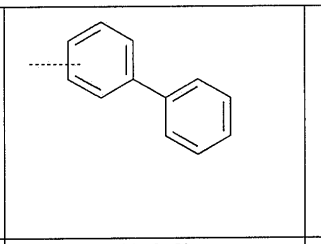
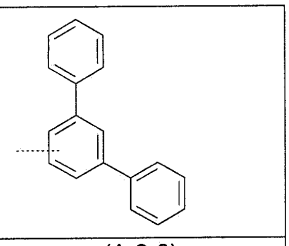
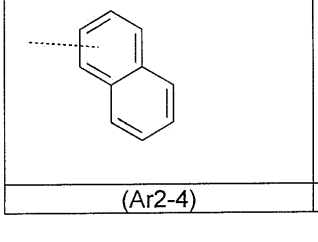
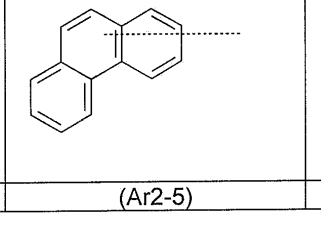
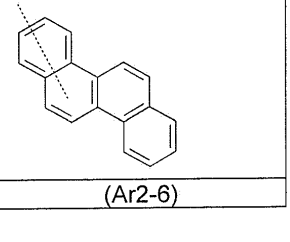
[0109] 보다 바람직하게, R^X, R^V 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, 1 내지 10 개, 보다 바람직하게는 1 내지 6 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 기, 또는 3 내지 10 개, 보다 바람직하게는 3 내지 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 40 개, 바람직하게는 5 내지 30 개, 보다 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타낸다.

[0110] 바람직하게, 기 Ar^2, Ar^4 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 30 개, 바람직하게 5 내지 25 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택된다. 더욱 바람직하게는, 기 Ar^2, Ar^4 는 페닐, 바이페닐, 테르페닐, 쿼터페닐, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 나프탈렌, 페난트렌, 안트라센, 트리페닐렌, 플루오란텐, 테트라센, 크리센, 벤즈안트라센, 벤조페난트라센, 피렌, 페릴렌, 인돌, 벤조푸란, 벤조티오펜, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 카르바졸, 인데노카르바졸, 인돌로카르바졸, 피리딘, 피리미딘, 피라진, 피리다진, 트리아진, 퀴놀론, 벤조피리딘, 벤조피리다진, 벤조피리미딘, 벤즈이미다졸 및 퀴나졸린으로 이루어지는 군으로부터 선택되고, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R로 치환될 수 있고; 여기서 Ar^2, Ar^4 는 또한, 전술된 기 중 둘 이상의 조합일 수도 있다.

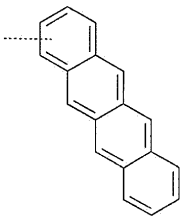
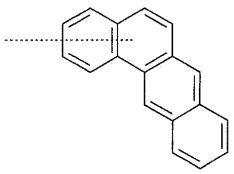
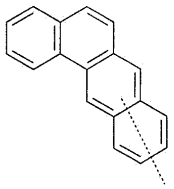
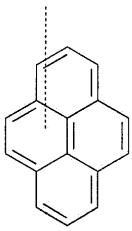
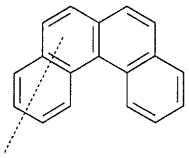
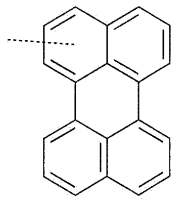
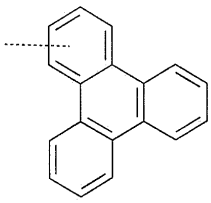
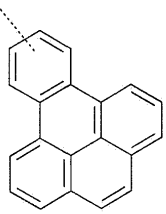
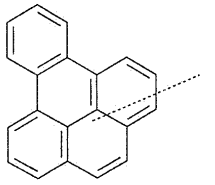
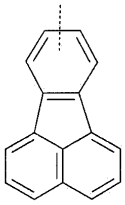
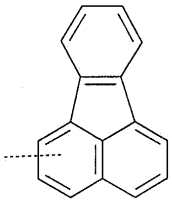
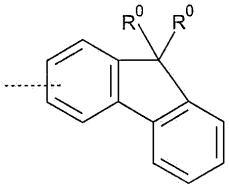
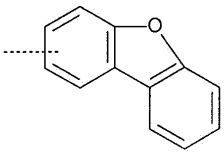
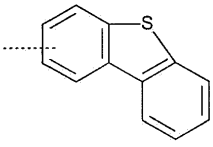
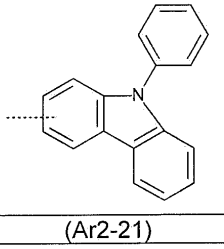
특히 바람직하게 기 Ar^2, Ar^4 는 페닐, 바이페닐, 테르페닐, 쿼터페닐, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 트리페닐렌, 플루오란텐, 테트라센, 크리센, 벤즈안트라센, 벤조페난트라센, 피렌 또는 페릴렌, 디벤조푸란, 카르바졸 및 디벤조티오펜으로 이루어지는 군으로부터 선택되고, 이들 각각은 임의의 자유 위치에서 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수도 있고; 여기서 Ar^2, Ar^4 는 또한 전술된 기 중 둘 이상의 조합일 수도 있다. 매우 특히 바람직하게 기 Ar^2, Ar^4 는 페닐, 바이페닐, 테르페닐, 쿼터페닐, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 트리페닐렌, 플루오란텐, 디벤조푸란, 카르바졸 및 디벤조티오펜으로 이루어지는 군으로부터 선택되고, 이들 각각은 임의의 자유 위치에서 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수도 있고; 여기서 Ar^2, Ar^4 는 또한 전술된 기 중 둘 이상의 조합일 수도 있다.

[0111] 적합한 기 Ar^2 및 Ar^4 의 예는 아래 표에 묘사되는 식 (Ar2-1) 내지 (Ar2-27) 의 기이다:

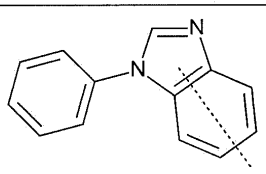
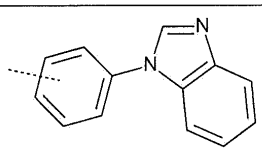
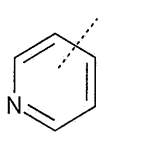
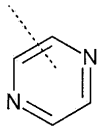
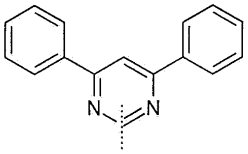
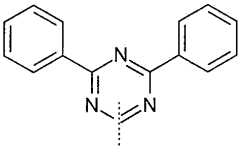
[0112]

		
(Ar2-1)	(Ar2-2)	(Ar2-3)
		
(Ar2-4)	(Ar2-5)	(Ar2-6)

[0113]

		
(Ar2-7)	(Ar2-8)	(Ar2-9)
		
(Ar2-10)	(Ar2-11)	(Ar2-12)
		
(Ar2-13)	(Ar2-14)	(Ar2-15)
		
(Ar2-16)	(Ar2-17)	(Ar2-18)
		
(Ar2-19)	(Ar2-20)	(Ar2-21)

[0114]

		
(Ar2-22)	(Ar2-23)	(Ar2-24)
		
(Ar2-25)	(Ar2-26)	(Ar2-27)

[0115] 식에서 점선 결합은 인접한 기에 대한 결합을 나타내고 기 R^0 는 위와 동일한 의미를 갖고; 식 (Ar2-1) 내지 (Ar2-27) 의 기는, 위와 동일한 의미를 갖는 기 R 에 의해 각각의 자유 위치에서 치환될 수도 있다.

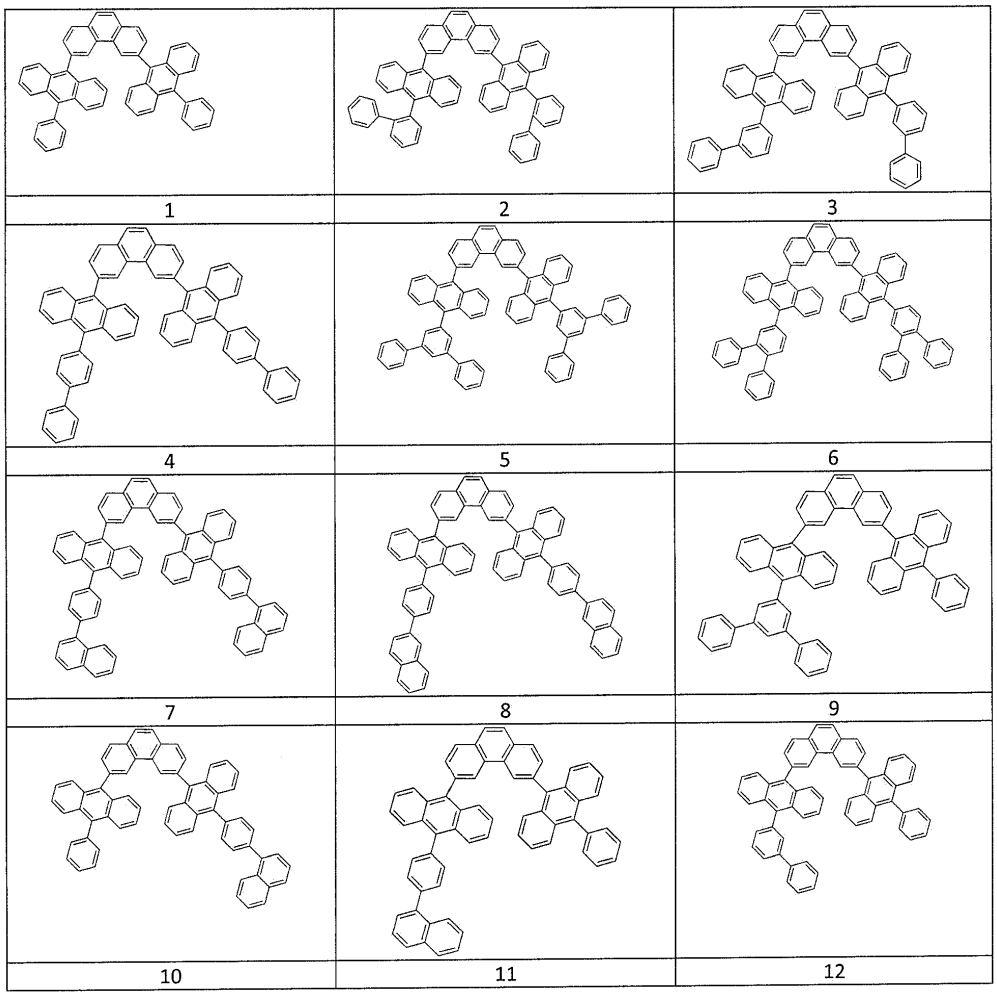
[0116] 식 (Ar2-1) 내지 (Ar2-27) 의 기 중에서, 식 (Ar2-1), (Ar2-2), (Ar2-3), (Ar2-4), (Ar2-5), (Ar2-8), (Ar2-18), (Ar2-19) 의 기가 바람직하다. 식 (Ar2-1), (Ar2-2), (Ar2-3), (Ar2-4), (Ar2-5) 의 기가 매우 바람직하다.

[0117] 바람직하게, R 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, CN, $N(Ar)_2$, 1 내지 40 개, 바람직하게는 1 내지 20 개, 보다 바람직하게는 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 40 개, 바람직하게는 3 내지 20 개, 보다 바람직하게는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R′ 로 치환될 수도 있고, 여기서 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 R′C=CR′, C≡C, O 또는 S 로 대체될 수도 있으며 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 로 대체될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R′ 로 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개, 5 내지 40 개, 보다 바람직하게는 5 내지 30 개, 특히 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타낸다.

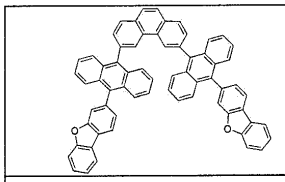
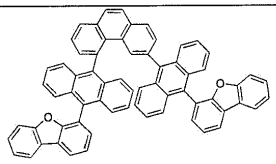
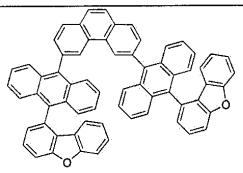
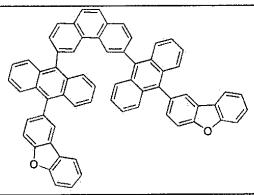
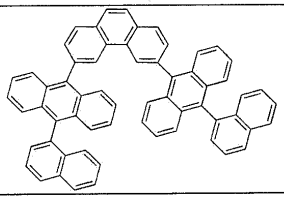
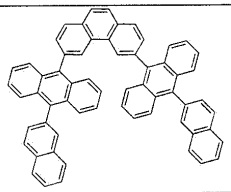
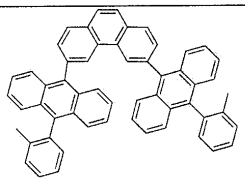
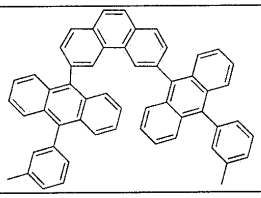
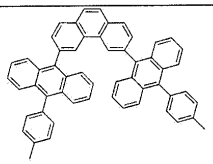
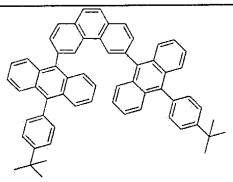
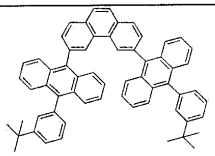
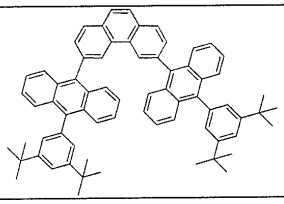
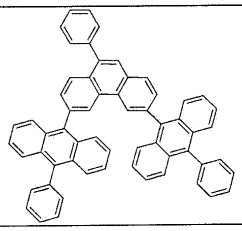
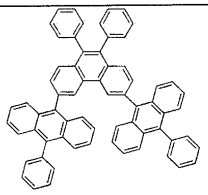
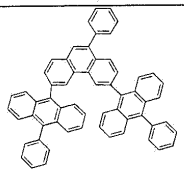
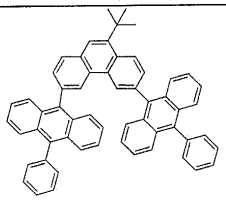
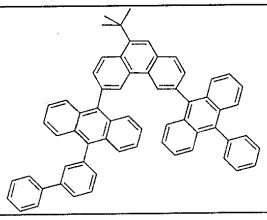
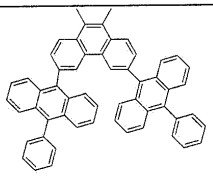
[0118] 바람직하게, R′ 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CN, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 기 또는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (여기서 각 경우에 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 에 의해 대체될 수도 있음), 또는 5 내지 18 개의 탄소 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타낸다.

[0119] 하기 화합물은 식 (H1) 의 화합물의 예이다:

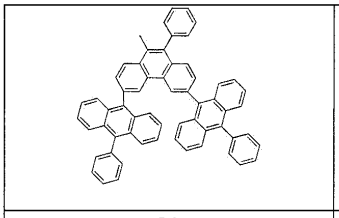
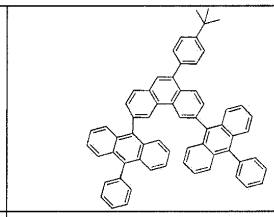
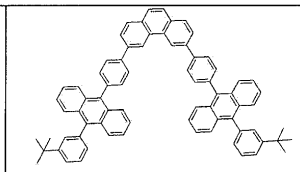
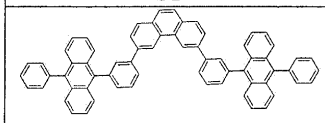
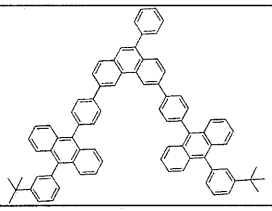
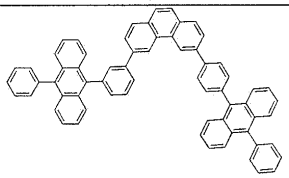
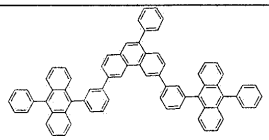
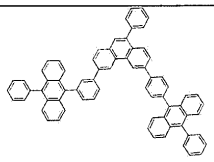
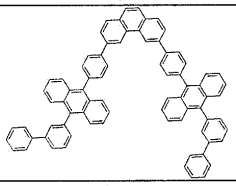
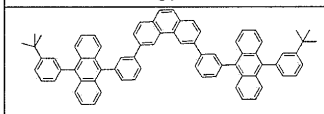
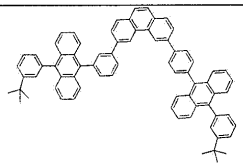
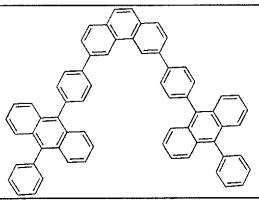
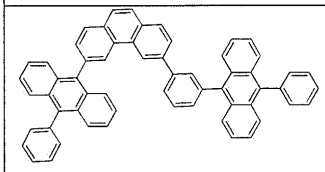
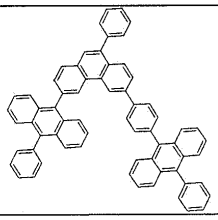
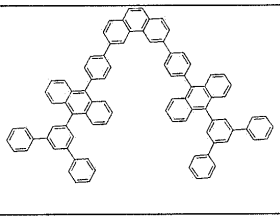
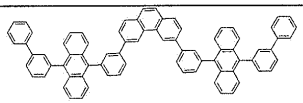
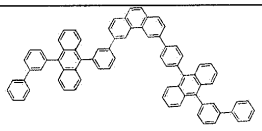
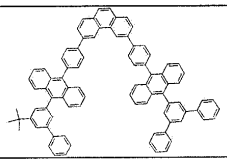
[0120]



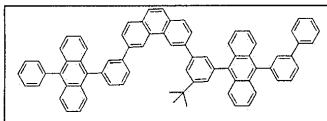
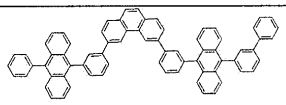
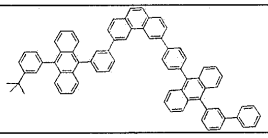
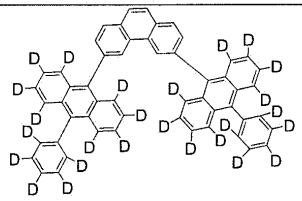
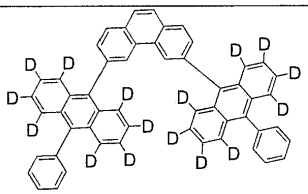
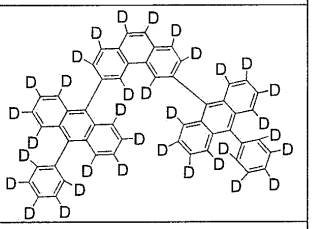
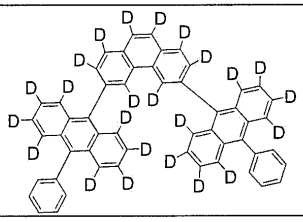
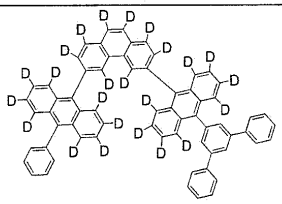
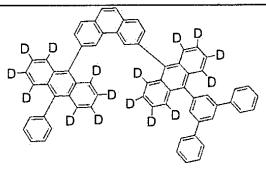
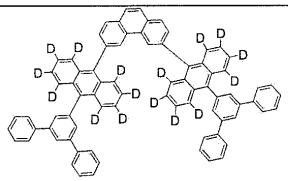
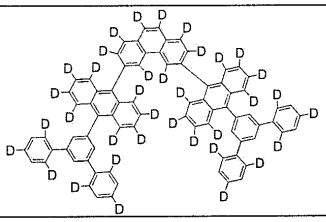
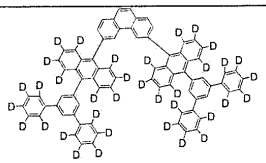
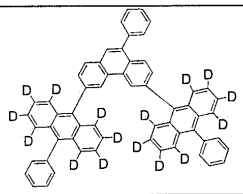
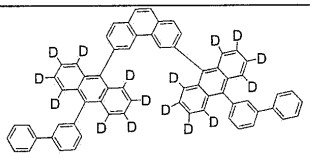
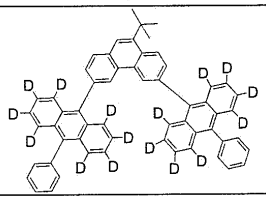
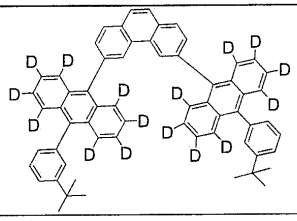
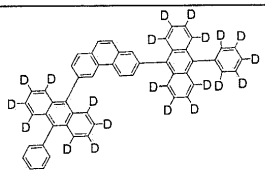
[0121]

		
13	14	15
		
16	17	18
		
19	20	21
		
22	23	24
		
25	26	27
		
28	29	30

[0122]

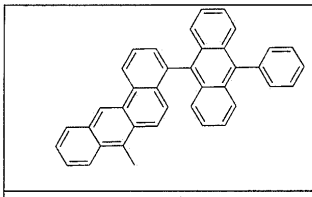
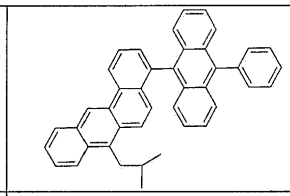
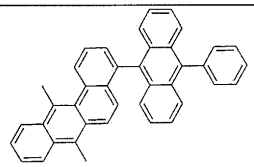
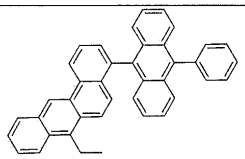
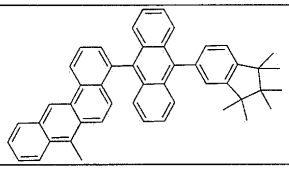
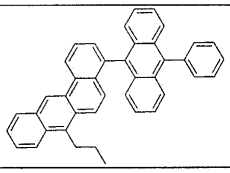
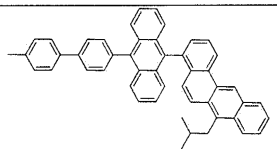
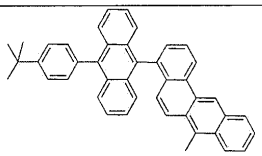
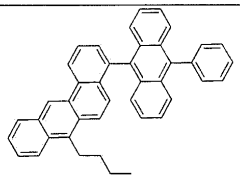
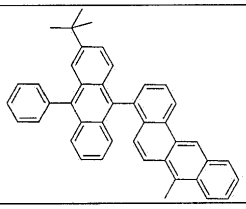
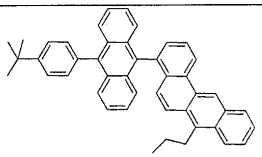
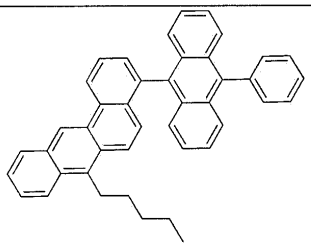
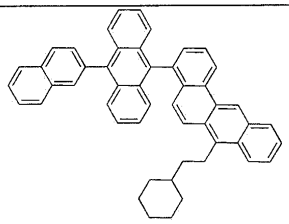
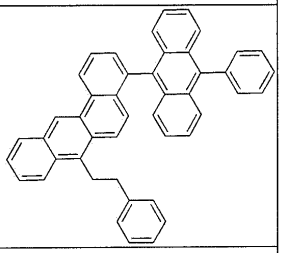
		
31	32	33
		
34	35	36
		
37	38	39
		
40	41	42
		
43	44	45
		
46	47	48

[0123]

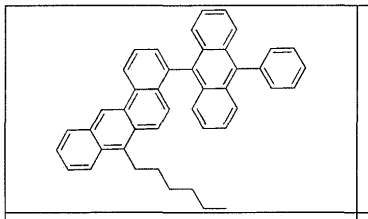
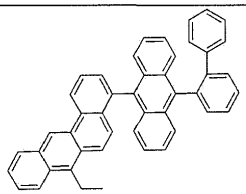
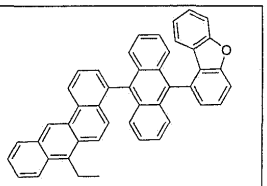
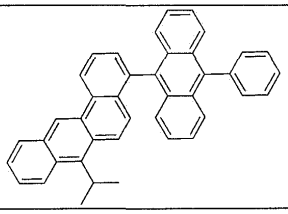
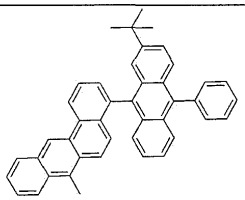
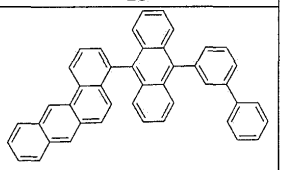
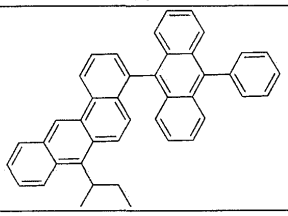
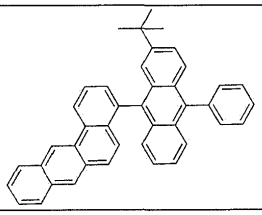
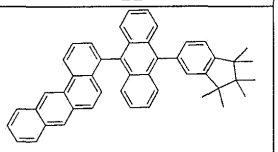
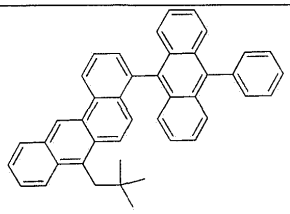
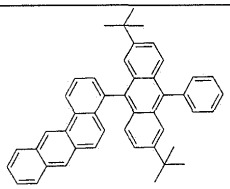
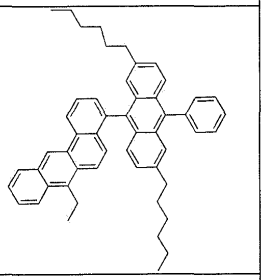
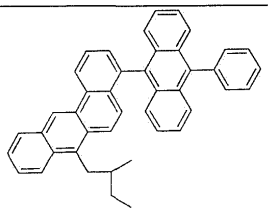
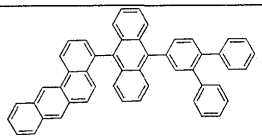
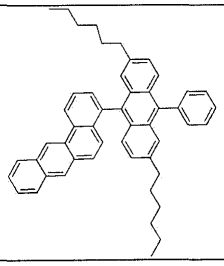
		
49	50	51
		
52	53	54
		
55	56	57
		
58	59	60
		
61	62	63
		
64	65	

[0124] 하기 화합물은 식 (H2) 의 화합물의 예이다:

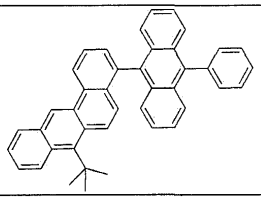
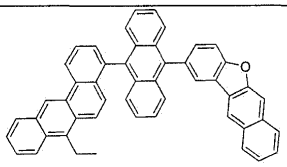
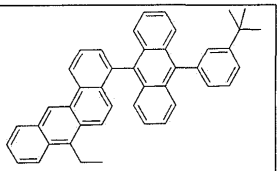
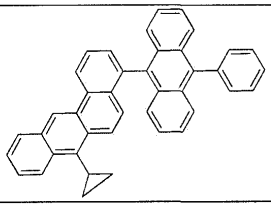
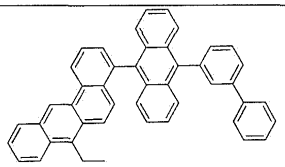
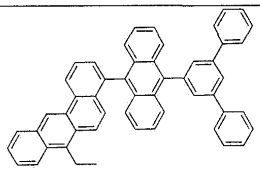
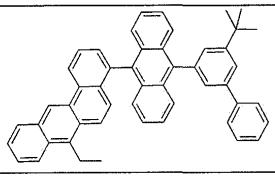
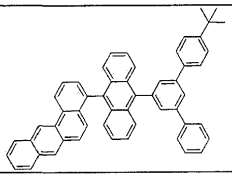
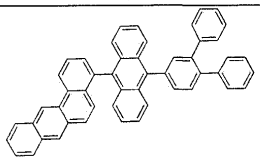
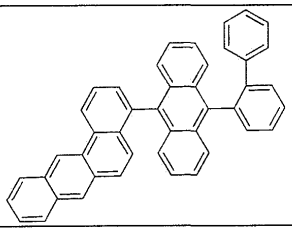
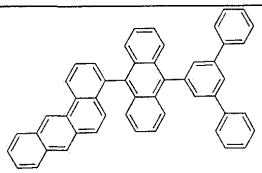
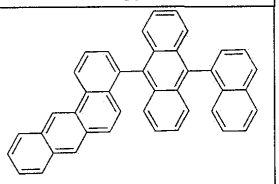
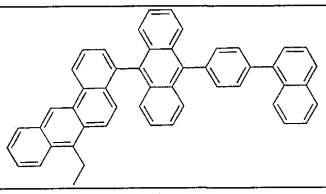
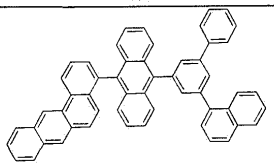
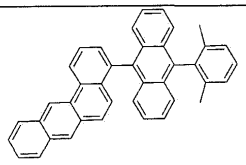
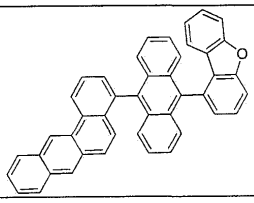
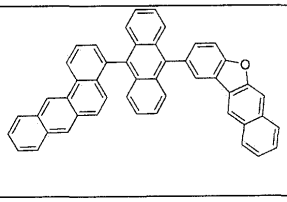
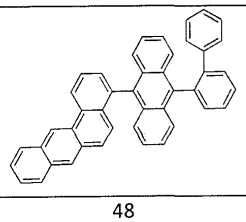
[0125]

		
1	2	3
		
4	5	6
		
7	8	9
		
10	11	12
		
13	14	15

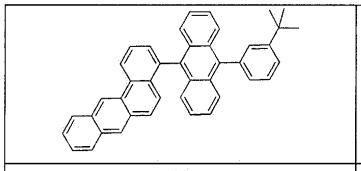
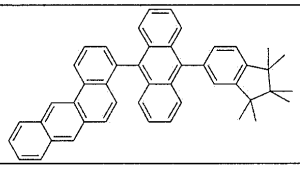
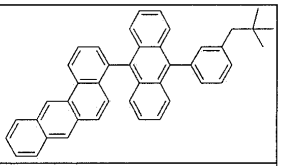
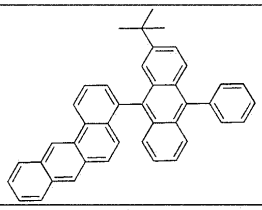
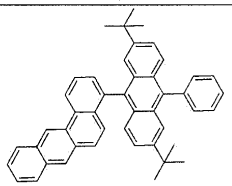
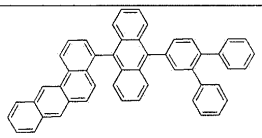
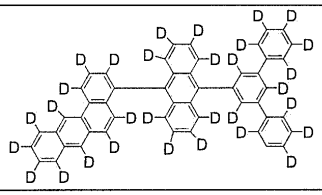
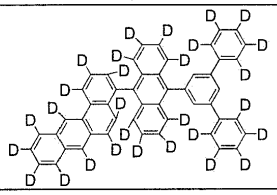
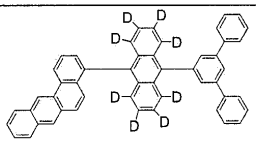
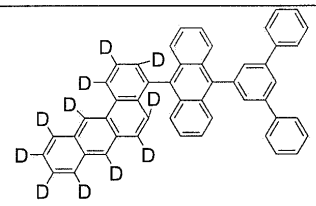
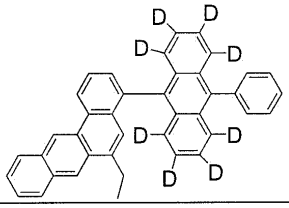
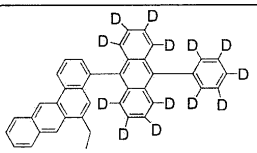
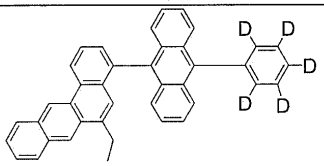
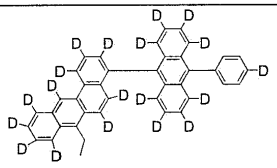
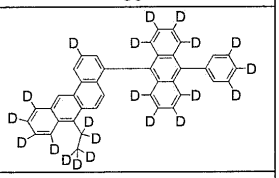
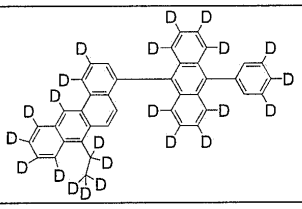
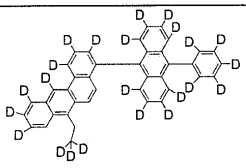
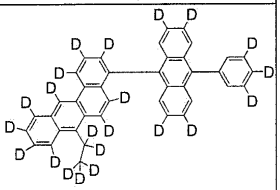
[0126]

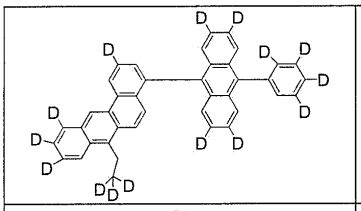
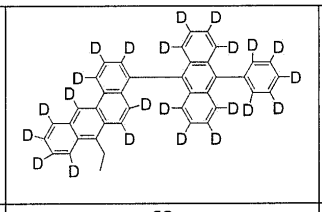
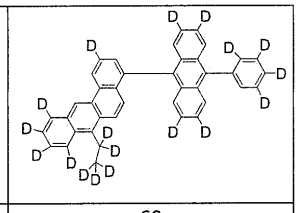
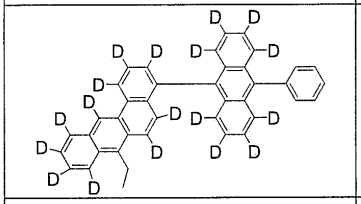
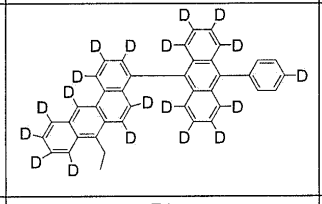
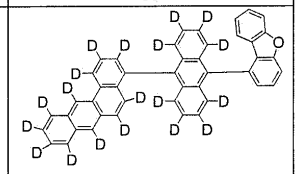
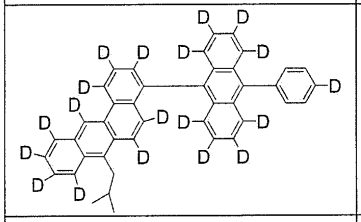
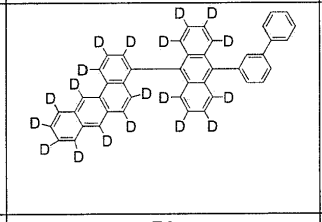
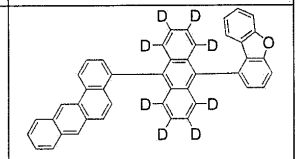
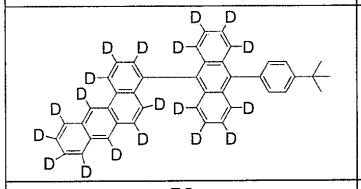
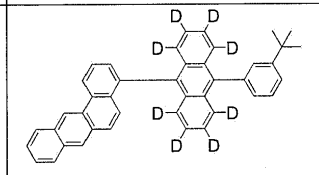
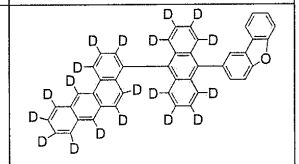
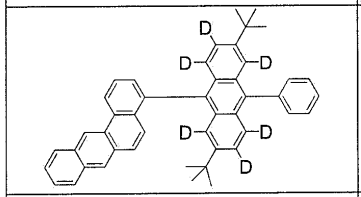
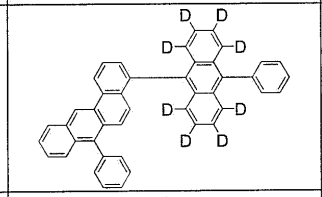
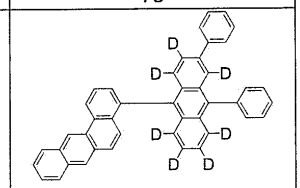
		
16	17	18
		
19	20	21
		
22	23	24
		
25	26	27
		
28	29	30

[0127]

		
31	32	33
		
34	35	36
		
37	38	39
		
40	41	42
		
43	44	45
		
46	47	48

[0128]

		
49	50	51
		
52	53	54
		
55	56	57
		
58	59	60
		
61	62	63
		
64	65	66

		
67	68	69
		
70	71	72
		
73	74	75
		
76	77	78
		
79	80	81

[0129]

[0130] 바람직한 실시형태에 따르면, 조성물은 식 (H1) 의 화합물, 식 (H2) 의 화합물 및 적어도 하나의 형광 방출체를 포함한다. "적어도 하나의 형광 방출체"라는 표현은 "하나, 둘, 셋 또는 그보다 많은 형광 방출체"를 의미한다.

[0131] 바람직하게는, 조성물은 하기 군:

[0132] - 질소에 직접 결합된 3개의 치환 또는 비치환 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 함유하는 아릴아민;

[0133] - 적어도 14개의 방향족 고리 원자를 갖는 축합 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템;

[0134] - 인데노플루오렌, 인데노플루오렌아민 또는 인데노플루오렌디아민;

[0135] - 벤조인도노플루오렌, 벤조인데노플루오렌아민 또는 벤조인데노플루오렌디아민;

[0136] - 디벤조인데노플루오렌, 디벤조인데노플루오렌아민 또는 디벤조인데노플루오렌디아민;

[0137] - 적어도 10개의 방향족 고리 원자를 갖는 축합 아릴기를 함유하는 인데노플루오렌;

[0138] - 비스인데노인데노플루오렌;

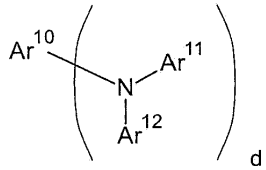
[0139] - 인데노디벤조푸란; 인데노플루오렌아민 또는 인데노플루오렌디아민;

[0140] - 플루오렌 이량체;

[0141] - 페녹사진; 또는

[0142] - 보론 유도체 중 적어도 하나를 포함하는 적어도 하나의 형광 방출체를 포함한다.

[0143] 보다 바람직하게는, 조성물은 하기 식 (E-1) 의 적어도 하나의 형광 방출체,



식 (E-1)

[0144]

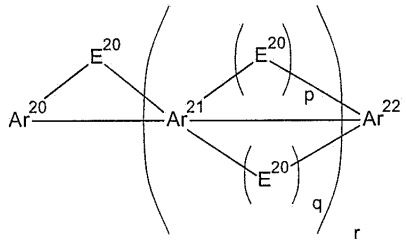
[0145] [식 중

[0146] Ar^{10}, Ar^{11}, Ar^{12} 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 6 내지 60개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이며, 이는 각 경우에 또한 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수도 있고; 단, 적어도 하나의 기 Ar^{10}, Ar^{11}, Ar^{12} 는, 서로 축합된 2 내지 4개의 방향족 고리로 이루어지는 적어도 하나의 축합 아릴 또는 헤테로아릴 기를 함유하는 10 내지 40개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 여기서 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수도 있다;

[0147] R 은 위와 동일한 정의를 갖는다; 그리고

[0148] d 는 1, 2, 3 또는 4 이고; 보다 바람직하게, d 는 1이다];

[0149] 또는 하기 식 (E-2) 의 적어도 하나의 형광 방출체,



식 (E-2)

[0150]

[0151] [식 중

[0152] Ar^{20}, Ar^{21}, Ar^{22} 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 각 경우에 또한 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있는, 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴 기이다;

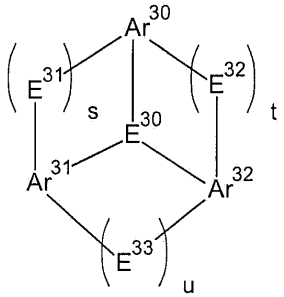
[0153] E^{20}는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, BR, $C(R^0)_2$, $Si(R^0)_2$, C=O, $C=NR^0$, $C=C(R^0)_2$, O, S, S=O, SO_2, NR^0, PR^0, $P(=O)R^0$ 또는 $P(=S)R^0$ 로부터 선택된 기이고; 여기서 Ar^{20}, Ar^{21} 및 E^{20} 는 함께 5원 고리 또는 6원 고리를 형성하고, Ar^{21}, Ar^{23} 및 E^{20} 는 함께 5원 고리 또는 6원 고리를 형성한다;

[0154] R^0 는 위와 동일한 정의를 갖는다;

[0155] p, q는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 0 또는 1 이며, 단, p + q = 1 이다;

[0156] r 은 1, 2 또는 3 이다];

[0157] 또는 하기 식 (E-3) 의 적어도 하나의 형광 방출체,



식 (E-3)

[0158]

[0159] [식 중

[0160] Ar^{30}, Ar^{31}, Ar^{32} 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 5 내지 22개, 바람직하게는 5 내지 18개, 보다 바람직하게는 6 내지 14개의 방향족 고리 원자를 갖는 치환 또는 비치환된 아릴 또는 헤테로아릴 기를 나타낸다;

[0161] E^{30} 는 B 또는 N 을 나타낸다;

[0162] E^{31}, E^{32}, E^{33} 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게,O, S, $C(R^0)_2$, C=O, C=S, $C=NR^0$, $C=C(R^0)_2$, $Si(R^0)_2$, BR^0, NR^0, PR^0, SO_2, SeO_2 또는 화학 결합을 나타내고, 단, E^{30} 이 B이면, 기 E^{31}, E^{32}, E^{33} 중 적어도 하나는 NR^0 를 나타내고 E^{30} 가 N이면, 기 E^{31}, E^{32}, E^{33} 중 적어도 하나는 BR^0 를 나타낸다;

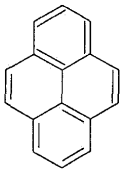
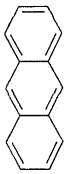
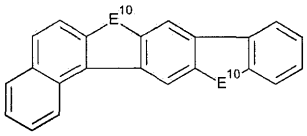
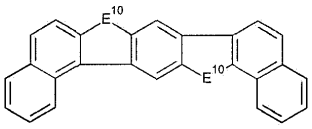
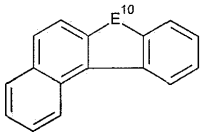
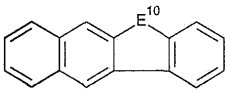
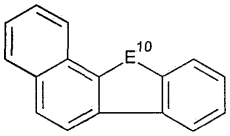
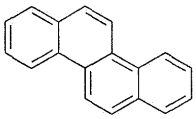
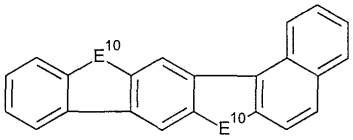
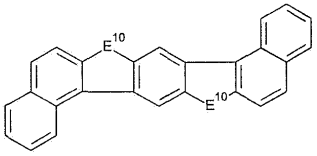
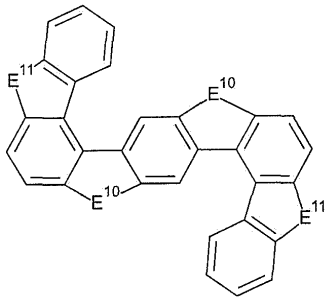
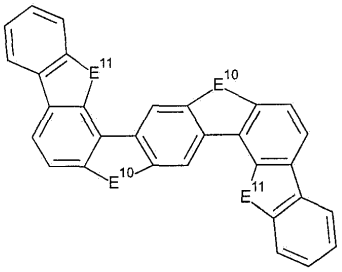
[0163] R^0 는 위와 동일한 정의를 갖는다;

[0164] s, t, u 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 0 또는 1 이며, 단, $s + t + u \geq 1$ 이다]

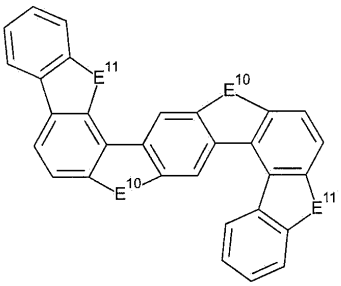
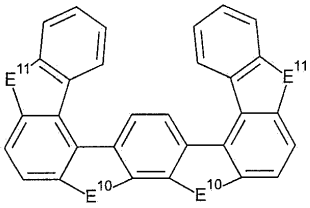
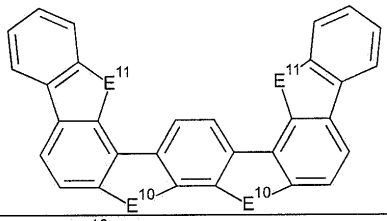
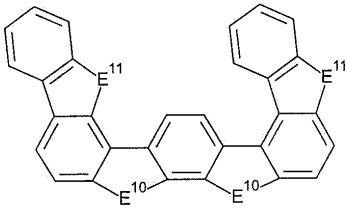
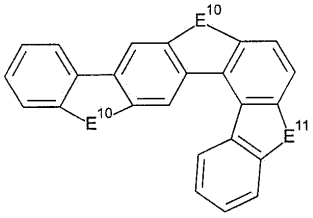
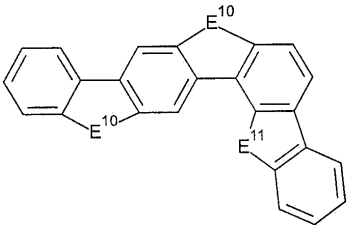
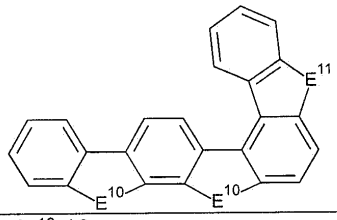
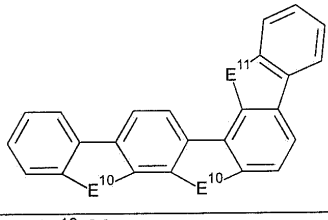
[0165] 를 포함한다.

[0166] 바람직하게는, 식 (E-1) 의 형광 방출체는 적어도 하나의 기 Ar^{10}, Ar^{11} 또는 Ar^{12}, 바람직하게는 Ar^{10} 을 포함하고, 이는 식 (Ar^{10}-1) 내지 (Ar^{10}-24) 의 기로부터 선택된다:

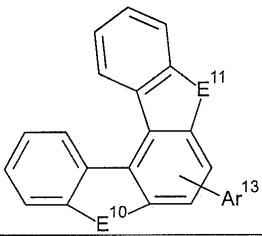
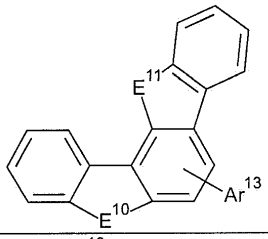
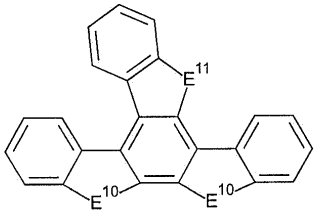
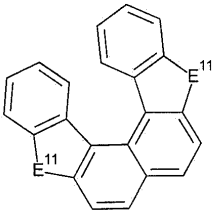
[0167]

	
Ar^{10} -1	Ar^{10}-2
	
Ar^{10}-3	Ar^{10}-4
	
Ar^{10}-5	Ar^{10}-6
	
Ar^{10}-7	Ar^{10}-8
	
Ar^{10}-9	Ar^{10}-10
	
Ar^{10}-11	Ar^{10}-12

[0168]

	
Ar^{10}-13	Ar^{10}-14
	
Ar^{10}-15	Ar^{10}-16
	
Ar^{10}-17	Ar^{10}-18
	
Ar^{10}-19	Ar^{10}-20

[0169]

	
Ar^{10}-21	Ar^{10}-22
	
Ar^{10}-23	Ar^{10}-24

[0170] 식 중, 기 Ar^{10}-1 내지 Ar^{10}-24 는 라디칼 R 에 의해 모든 자유 위치에서 치환될 수도 있고;

[0171] E^{10} 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게 BR^0, $C(R^0)_2$, $Si(R^0)_2$, C=O, $C=NR^0$, $C=C(R^0)_2$, O, S, S=O, SO_2, NR^0,

PR^0, $P(=O)R^0$ 또는 $P(=S)R^0$ 로부터 선택되는 기이고, 바람직하게 E^{10} 는 $C(R^0)_2$이다;

[0172] 식 중, R^0 는 위와 동일한 정의를 갖는다.

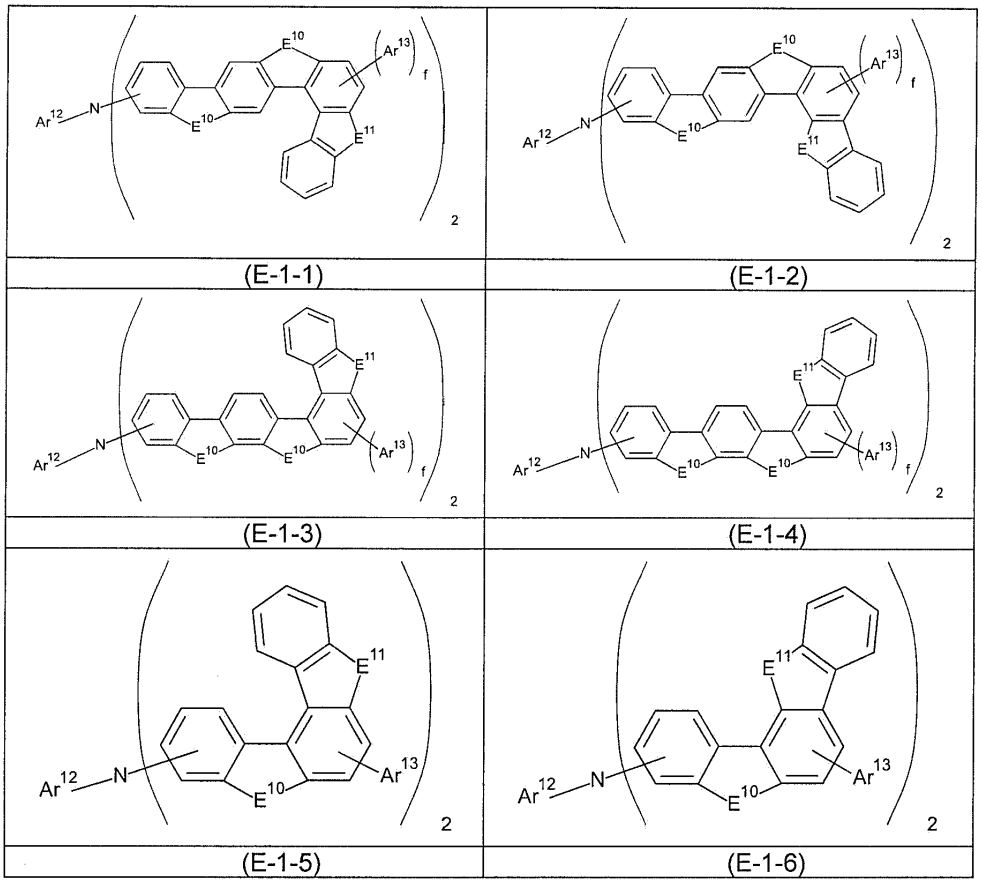
[0173] E^{11} 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, C=O, O, S, S=O 또는 SO_2, 바람직하게 O 또는 S, 보다 바람직하게 O 로부터 선택되는 기이다; 그리고

[0174] Ar^{13} 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 또한 치환될 수도 있는 5 내지 60개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이다.

[0175] 바람직한 실시형태에 따르면, 식 (E-1) 의 방출체는 식 (Ar^{10}-15) 내지 (Ar^{10}-22) 의 기로부터 선택되는 기 Ar^{10} 을 포함하고, 여기서 d 는 바람직하게 1과 동일하고 바람직하게 적어도 하나의 기 Ar^{11}, Ar^{12} 는 식 (Ar^{10}-15) 내지 (Ar^{10}-22) 의 기로부터 선택된다.

[0176] 매우 바람직한 실시형태에 따르면, 식 (E-1) 의 형광 방출체는 식 (E-1-1) 내지 (E-1-6) 의 방출체로부터 선택되고,

[0177]

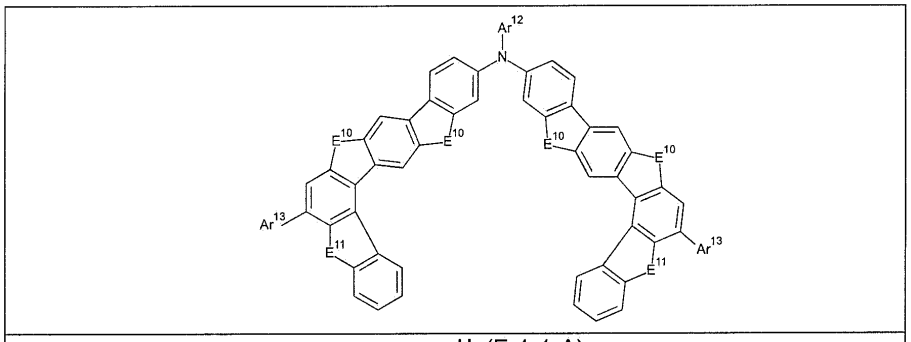


[0178] 식 중, 기호는 위와 동일한 의미를 갖고 여기서:

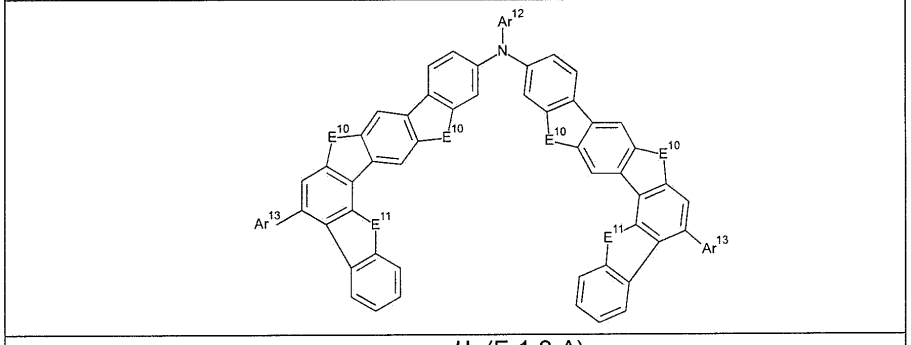
[0179] f 는 0, 1 또는 2 이다; 그리고

[0180] 식 (E-1-1) 내지 (E-1-6) 의 화합물에서 위에 나타낸 벤젠 고리는 하나 이상의 라디칼 R에 의해 모든 자유 위치에서 치환될 수도 있다.

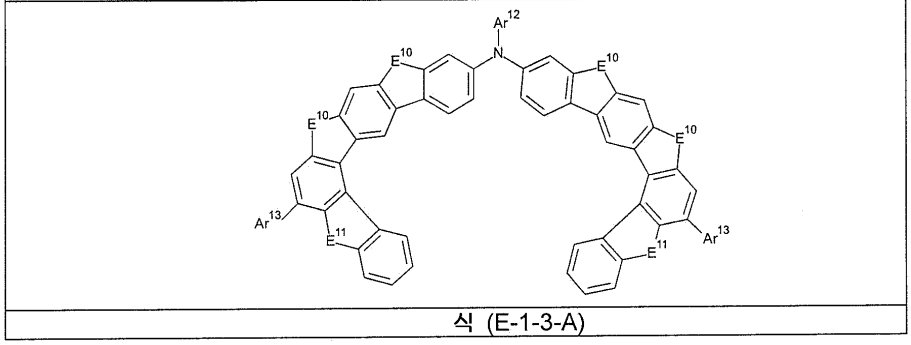
[0181] 특히 바람직하게, 식 (E-1) 의 형광 방출체는 식 (E-1-1-A) 내지 (E-1-6-A) 의 화합물로부터 선택되고,



식 (E-1-1-A)

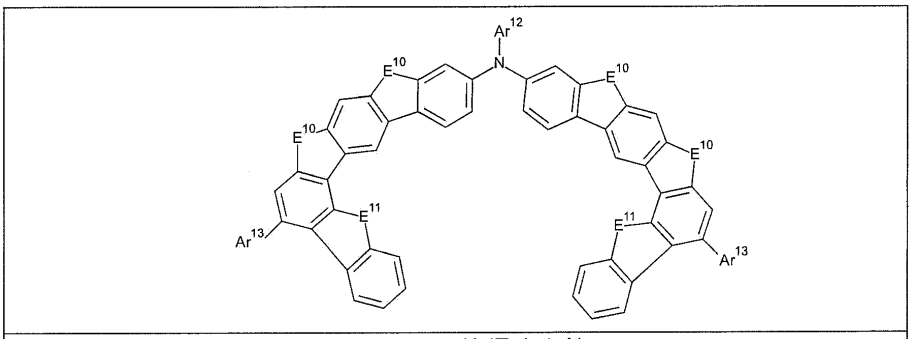


식 (E-1-2-A)

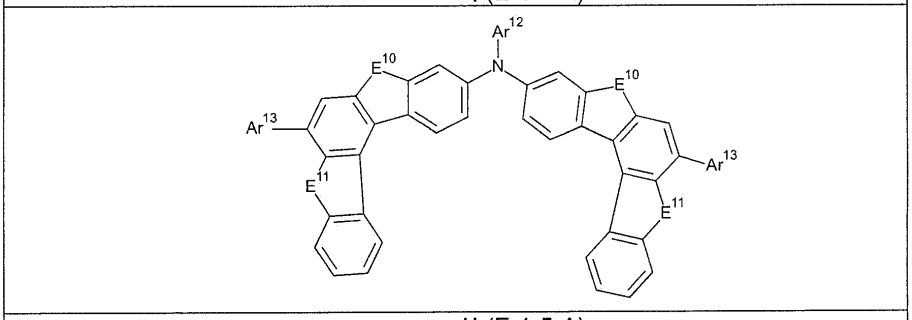


식 (E-1-3-A)

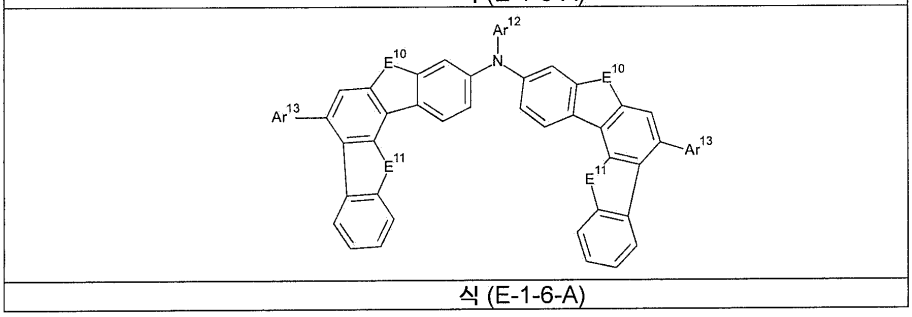
[0182]



식 (E-1-4-A)



식 (E-1-5-A)



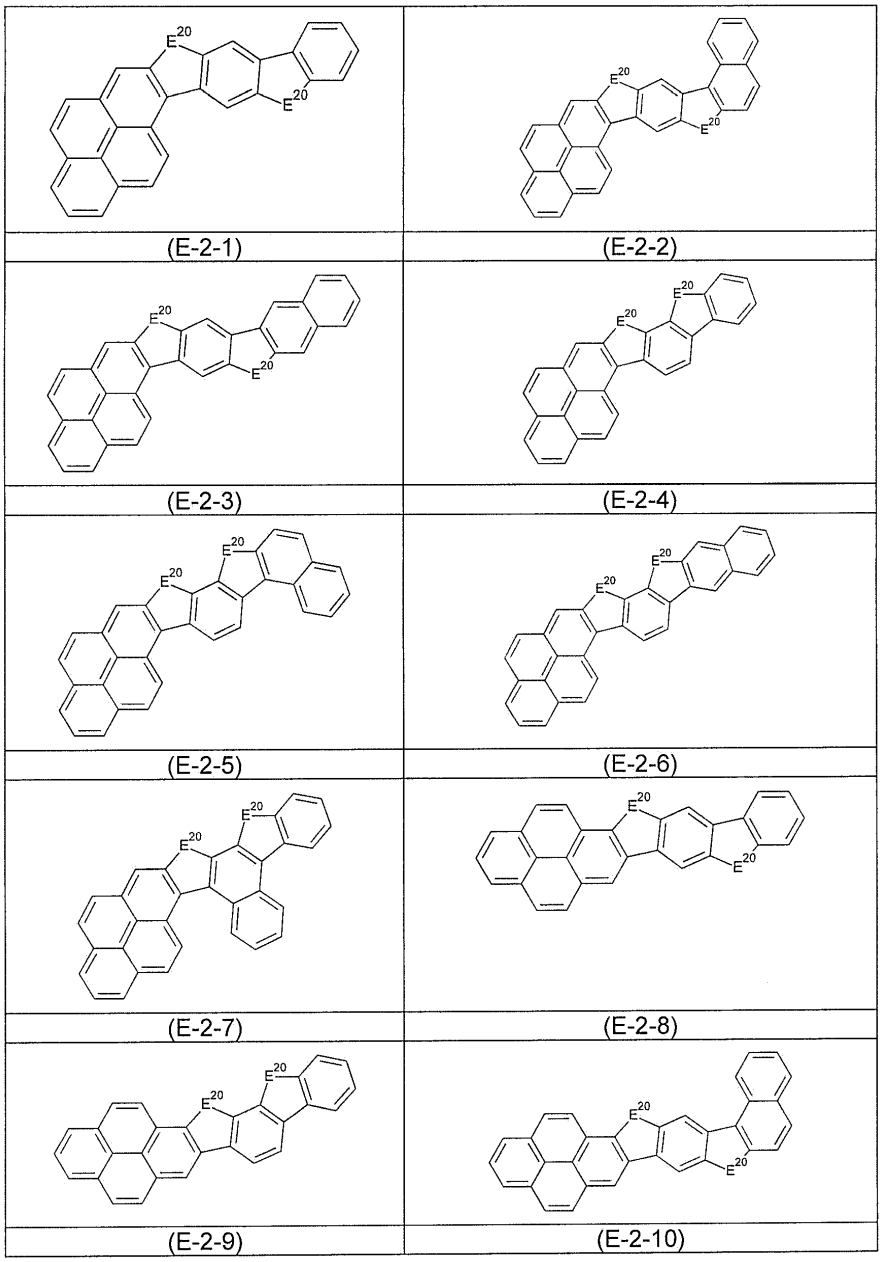
식 (E-1-6-A)

[0183]

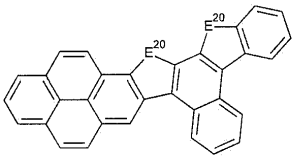
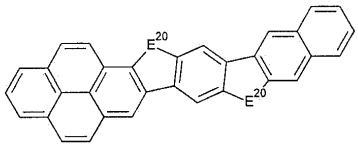
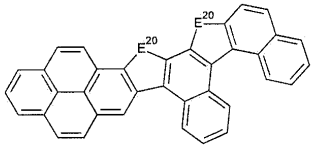
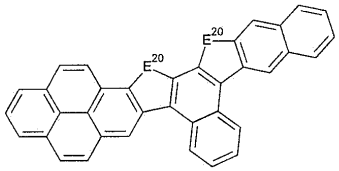
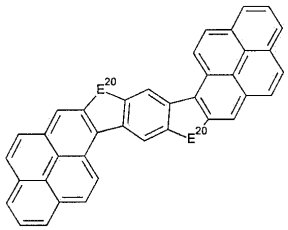
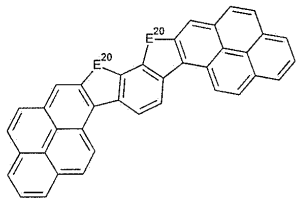
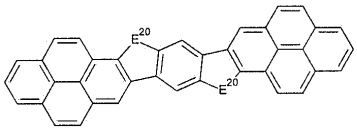
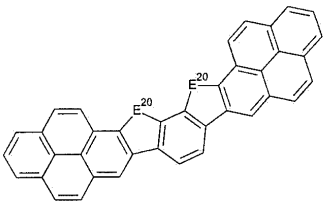
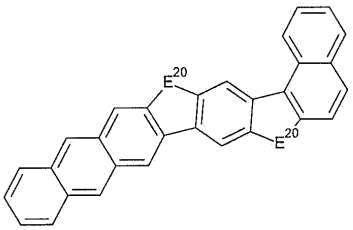
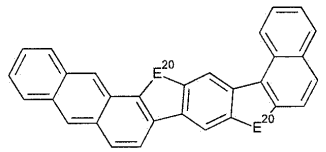
[0184] 식 중 기호 및 인덱스는 위와 동일한 의미를 갖고 식 (E-1-1-A) 내지 (E-1-6-A) 의 화합물에서 위에 나타낸 벤젠 고리는 하나 이상의 라디칼 R에 의해 모든 자유 위치에서 치환될 수도 있다.

[0185] 바람직하게, 식 (E-2) 의 형광 방출체는 식 (E-2-1) 내지 (E-2-43) 의 형광 방출체로부터 선택되고,

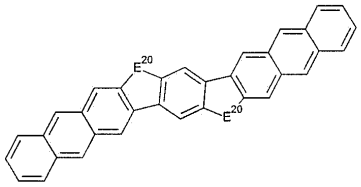
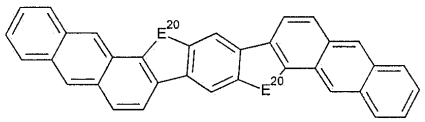
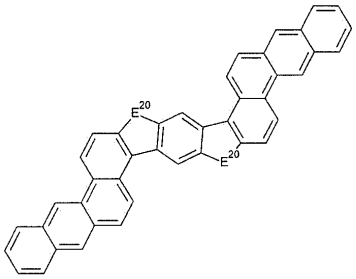
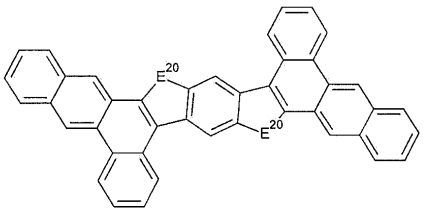
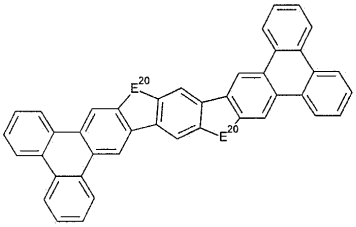
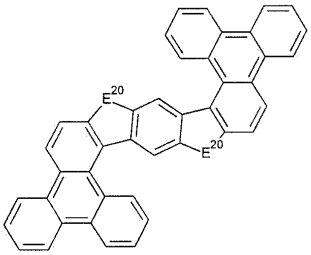
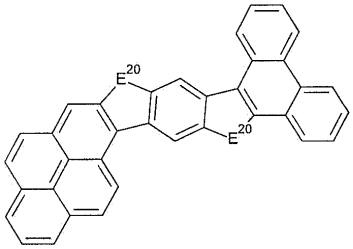
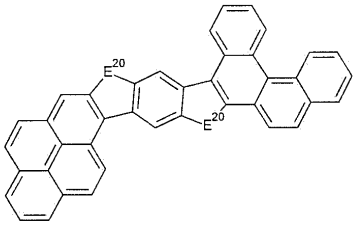
[0186]



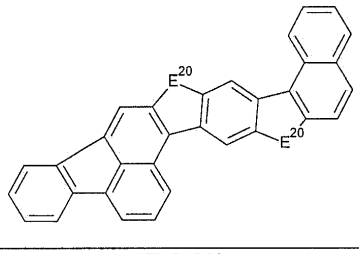
[0187]

	
(E-2-11)	(E-2-12)
	
(E-2-13)	(E-2-14)
	
(E-2-15)	(E-2-16)
	
(E-2-17)	(E-2-18)
	
(E-2-19)	(E-2-20)

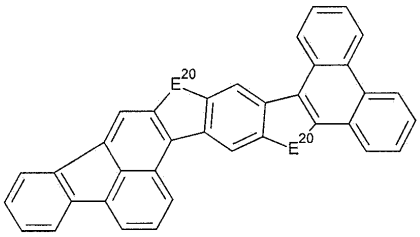
[0188]

	
(E-2-21)	(E-2-22)
	
(E-2-23)	(E-2-24)
	
(E-2-25)	(E-2-26)
	
(E-2-27)	(E-2-28)

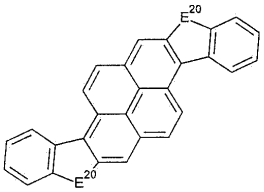
[0189]



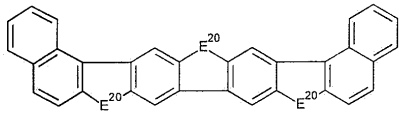
(E-2-29)



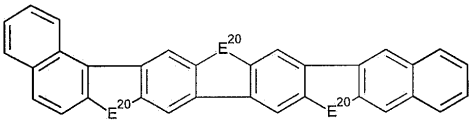
(E-2-30)



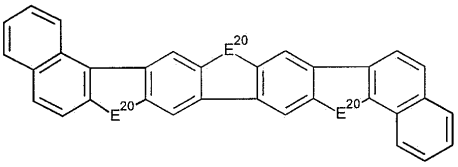
(E-2-31)



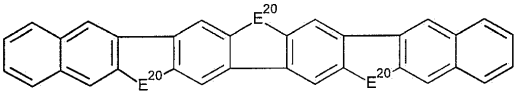
(E-2-32)



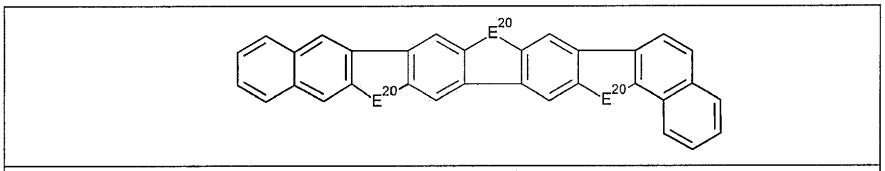
(E-2-33)



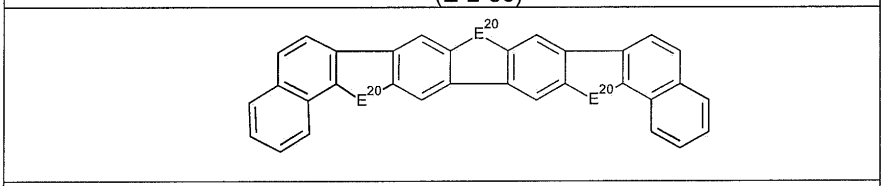
(E-2-34)



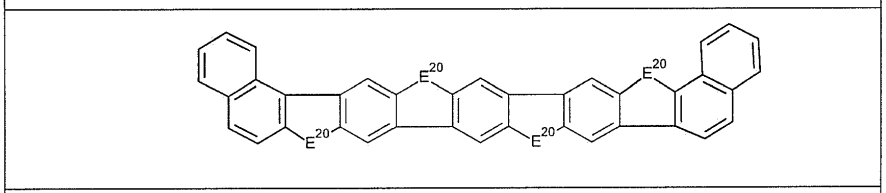
(E-2-35)



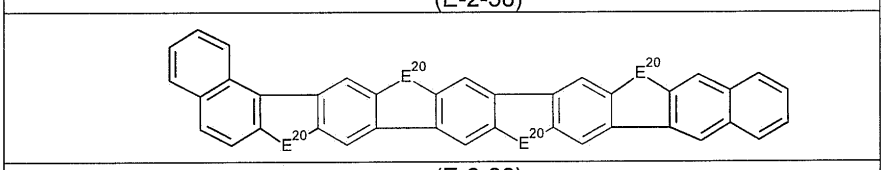
(E-2-36)



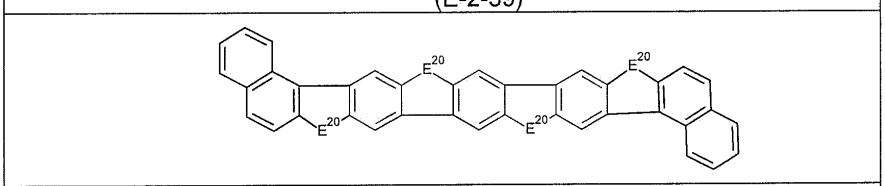
(E-2-37)



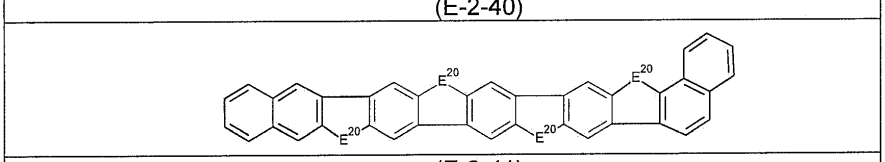
(E-2-38)



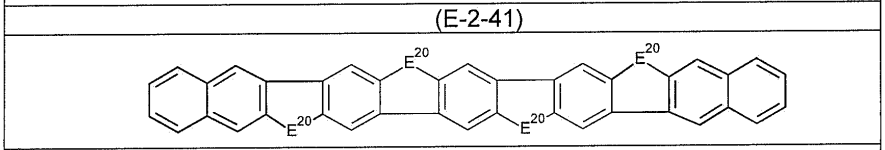
(E-2-39)



(E-2-40)

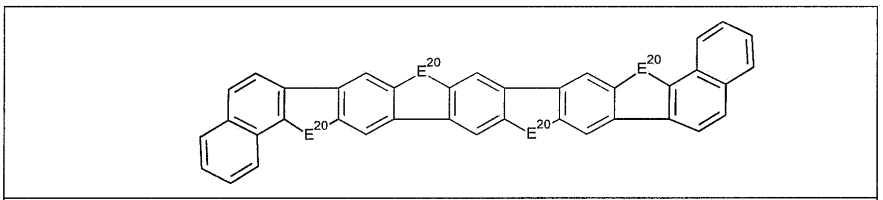


(E-2-41)



(E-2-42)

[0190]



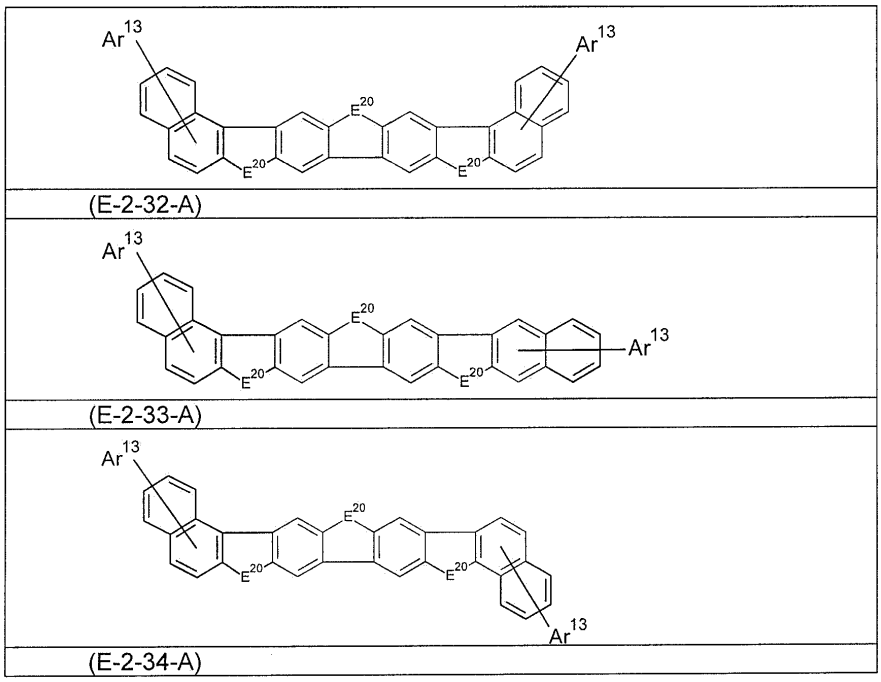
(E-2-43)

[0191]

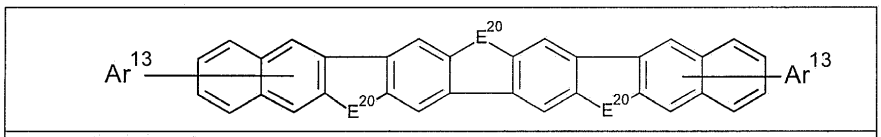
[0192] 식 중, 식 (E-2-1) 내지 (E-2-43) 의 기는, 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 모든 자유 위치에서 치환될 수도 있고; E^{20} 는 위와 동일한 의미를 갖는다. 바람직하게, E^{20} 는 $C(R^0)_2$ 이다.

[0193] 식 (E-2) 의 형광 방출체는 바람직하게 식 (E-2-32) 내지 (E-2-43) 의 화합물로부터 선택된다. 보다 바람직하게, 식 (E-2) 의 화합물은 화합물 (E-2-32-A) 내지 (E-2-43-A) 로부터 선택된다:

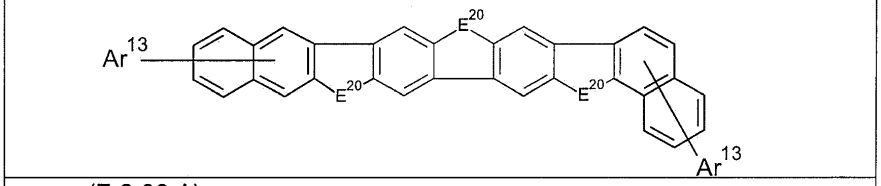
[0194]


Ar13
Ar13
E20
E20
E20
(E-2-32-A)
Ar13
E20
E20
E20
Ar13
(E-2-33-A)
Ar13
E20
E20
E20
Ar13
(E-2-34-A)

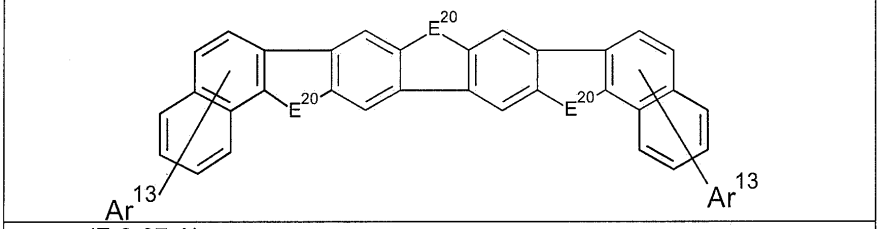
[0195]



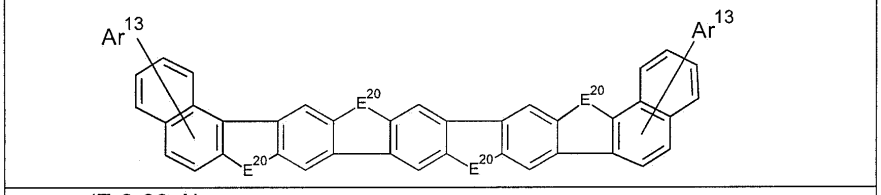
(E-2-35-A)



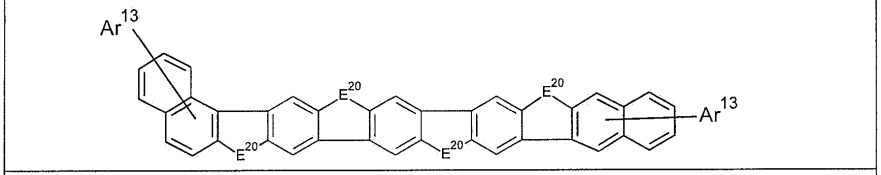
(E-2-36-A)



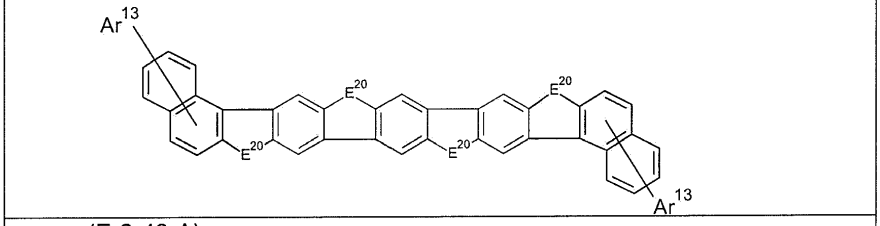
(E-2-37-A)



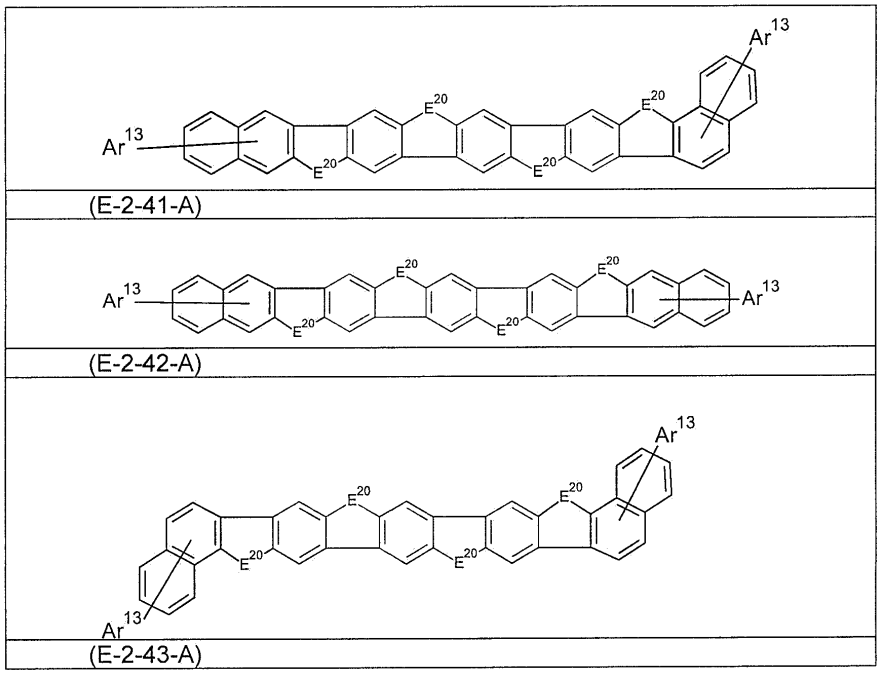
(E-2-38-A)



(E-2-39-A)



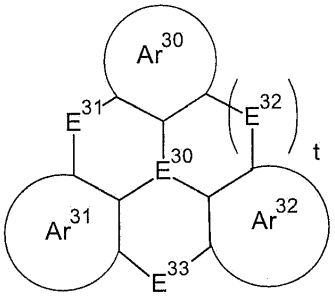
(E-2-40-A)



[0196]

[0197] 식 중 기호는 위와 동일한 의미를 갖고 식 (E-2-32-A) 내지 (E-2-43-A) 의 화합물에서 위에 나타낸 벤젠 및 나프탈렌 고리는 하나 이상의 라디칼 R에 의해 모든 자유 위치에서 치환될 수도 있다.

[0198] 바람직하게, 식 (E-3) 의 형광 방출체는 식 (E-3-1) 의 형광 방출체로부터 선택되고,

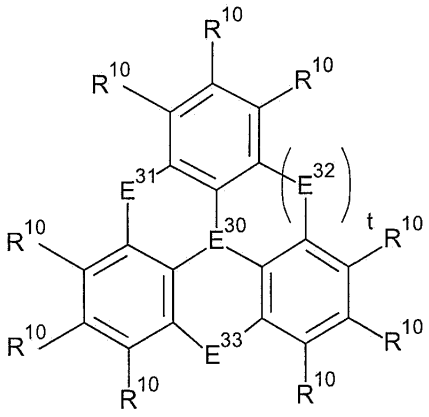


식 (E-3-1)

[0199]

[0200] 식 중, 기호 및 인덱스는 위와 동일한 의미를 가진다.

[0201] 보다 바람직하게, 식 (E-3) 의 형광 방출체는 식 (E-3-2) 의 형광 방출체로부터 선택되고,



식 (E-3-2)

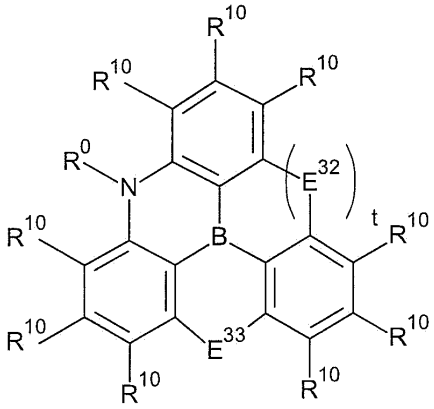
[0202]

[0203] 식 중 기호 E^{30} 내지 E^{33} 는 위와 동일한 의미를 갖는다; 여기서 t 는 0 또는 1 이고, t 가 0일 때, 기 E^{32} 는 부

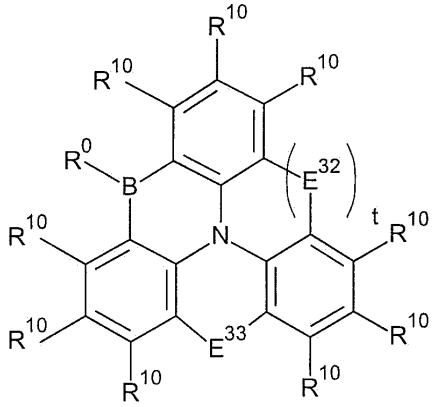
재하고 라디칼 R^{30} 이 존재하고, 이는 E^{32} 에 대한 결합을 대체한다; 그리고 여기서

[0204] R^{10} 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CHO, CN, C(=O)Ar, P(=O)$(Ar)_2$, S(=O)Ar, $S(=O)_2Ar$, $N(R')_2$, $N(Ar)_2$, NO_2, $Si(R')_3$, $B(OR')_2$, OSO_2R', 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R' 에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 R'C=CR', C≡C, $Si(R')_2$, $Ge(R')_2$, $Sn(R')_2$, C=O, C=S, C=Se, P(=O)(R'), SO, SO_2, O, S 또는 CONR' 에 의해 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 에 의해 대체될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R' 에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 또는 하나 이상의 라디칼 R' 에 의해 치환될 수 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기를 나타내고; 여기서 2 개의 인접한 치환기 R^{10} 은 하나 이상의 라디칼 R' 에 의해 치환될 수도 있는, 지방족 또는 방향족 고리 시스템을 함께 형성할 수도 있다; 여기서 R' 는 위와 동일한 정의를 갖는다.

[0205] 더욱 더 바람직하게, 식 (E-3) 의 형광 방출체는 식 (E-3-3) 및 (E-3-4) 의 형광 방출체로부터 선택되고,



식 (E-3-3)



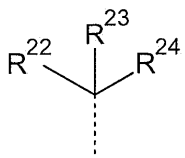
식 (E-3-4)

[0206]

[0207] 식 중, 기호 및 인덱스는 위와 동일한 의미를 가진다.

[0208] 바람직한 실시형태에 따르면, 식 (E-1), (E-2) 또는 (E-3) 의 형광 방출체는 기 RS를 포함하고, 여기서 기 RS는,

[0209] - 하기 식 (RS-a) 의 기 일반 식으로 표시되는 분지형 또는 환형 알킬 기로부터,



(RS-a)

[0210]

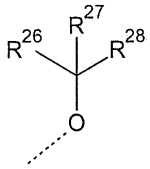
[0211] [식 중,

[0212] R^{22}, R^{23}, R^{24} 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 또는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기로부터 선택되고, 여기서 위에 언급된 기는 각각 하나 이상의 라디칼 R^{25} 에 의해 치환될 수 있고, 그리고 라디칼 R^{22}, R^{23}, R^{24} 중 2개 또는 모든 라디칼 R^{22}, R^{23}, R^{24} 는 연결되어 (다)환형 알킬기를 형성할 수 있고, 이는 하나 이상의 라디칼 R^{25} 에 의해 치환될 수 있다;

[0213] R^{25} 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기로부터 선택되고;

[0214] 단, 각각의 경우, 라디칼 R^{22}, R^{23} 및 R^{24} 중 적어도 하나는 H 외의 것이고, 단, 각각의 경우, 모든 라디칼 R^{22}, R^{23} 및 R^{24} 는 함께 적어도 4 개의 탄소 원자를 갖고, 단, 각각의 경우, 라디칼 R^{22}, R^{23} 및 R^{24} 중 2개가 H인 경우, 나머지 라디칼은 직쇄가 아니다]; 또는

[0215] - 하기 일반 식 (RS-b) 로 표현되는 분지형 또는 환형 알콕시기로부터



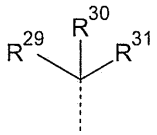
[0216] (RS-b)

[0217] [식 중,

[0218] R^{26}, R^{27}, R^{28} 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 또는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기로부터 선택되고, 여기서 위에 언급된 기는 각각 위에 정의된 바와 같은 하나 이상의 라디칼 R^{25} 에 의해 치환될 수 있고, 라디칼 R^{26}, R^{27}, R^{28} 중 2개 또는 모든 라디칼 R^{26}, R^{27}, R^{28} 는 연결되어 (다)환형 알킬기를 형성할 수 있고, 이는 위에 정의된 하나 이상의 라디칼 R^{25} 에 의해 치환될 수 있다;

[0219] 단, 각각의 경우, 라디칼 R^{26}, R^{27} 및 R^{28} 중 하나만이 H일 수도 있다];

[0220] - 하기 일반 식 (RS-c) 으로 표현되는 아르알킬 기로부터



[0221] (RS-c)

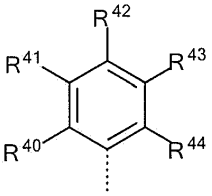
[0222] [식 중,

[0223] R^{29}, R^{30}, R^{31} 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 또는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기 (여기서 상기 기는 각각 하나 이상의 라디칼 R^{32} 에 의해 치환될 수 있음), 또는 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R^{32} 에 의해 치환될 수 있는 6 내지 30개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템로부터 선택되고, 2개 또는 모든 라디칼 R^{29}, R^{30}, R^{31} 은 연결되어 (다)환형 알킬기 또는 방향족 고리 시스템을 형성할 수 있고, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R^{32} 에 의해 치환될 수 있다;

[0224] R^{32} 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 또는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기, 또는 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템으로부터 선택되고;

[0225] 단, 각각의 경우, 라디칼 R^{29}, R^{30} 및 R^{31} 중 적어도 하나는 H 외의 것이고, 각각의 경우, 라디칼 R^{29}, R^{30} 및 R^{31} 중 적어도 하나는 적어도 6개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템이거나 이를 함유한다];

[0226] - 하기 일반 식 (RS-d) 로 표현되는 방향족 고리 시스템으로부터



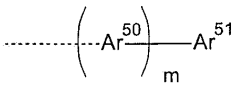
(RS-d)

[0227]

[0228] [식 중,

[0229] R^{40} 내지 R^{44} 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 또는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기 (위에 언급된 기는 각각 하나 이상의 라디칼 R^{32} 에 의해 치환될 수 있음), 또는 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R^{32} 에 의해 치환될 수 있는 6 내지 30개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템로부터 선택되고, 여기서 라디칼 R^{40} 내지 R^{44} 중 2개 이상은 연결되어 (다)환형 알킬기 또는 방향족 고리 시스템을 형성할 수 있고, 이들 각각은 위에 정의된 하나 이상의 라디칼 R^{32} 에 의해 치환될 수도 있다]; 또는

[0230] - 하기 식 (RS-e) 의 기로부터,



식 (RS-e)

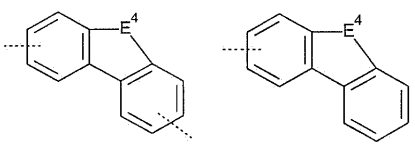
[0231]

[0232] [식 (RS-e) 에서의 점선 결합은 형광 방출체에 대한 결합을 표시하고; Ar^{50}, Ar^{51} 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 5 개 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내고; 여기서 m 는 1 내지 10 으로부터 선택되는 정수이다] 선택된다.

[0233] 바람직하게는, 식 (RS-e) 의 기에서 인덱스 m은 1 내지 6, 매우 바람직하게는 1 내지 4 로부터 선택된 정수이다.

[0234] 바람직하게, Ar^{50}, Ar^{51} 은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 40 개, 바람직하게 5 내지 30 개, 매우 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타낸다. 더욱 바람직하게는, Ar^{50}, Ar^{51} 은 페닐, 바이페닐, 테르페닐, 쿼터페닐, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 트리페닐렌, 플루오란텐, 디벤조푸란, 카르바졸 및 디벤조티오펜으로부터 선택되며, 이는 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수도 있다. 매우 바람직하게는, 적어도 하나의 기 Ar^{50} 또는 Ar^{51} 은 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수도 있는 플루오렌이다.

[0235] 보다 특히, 적어도 하나의 기 Ar^{50} 는 식 (Ar50-2) 의 기를 나타내거나 및/또는 적어도 하나의 기 Ar^{51} 는 식 (Ar51-2) 의 기를 나타내는 것이 바람직하고,



(Ar50-2) (Ar51-2)

[0236]

[0237] 식 중

[0238] 식 (Ar50-2) 에서 점선 결합은 형광 방출체에 대한 그리고 기 Ar^{50} 또는 Ar^{51} 에 대한 결합을 나타내고; 식 (Ar51-2)에서 점선 결합은 Ar^{50} 에 대한 결합을 나타낸다;

[0239] E^4은 $-C(R^{0a})_{2-}$, $-Si(R^{0a})_{2-}$, -O-, -S- 또는 $-N(R^{0a})-$, 바람직하게 $-C(R^{0a})_2$ 로부터 선택된다;

[0240] R^{0a} 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, CN, 1 내지 40개, 바람직하게는 1 내지 20개, 보다 바람직하게는 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 40개, 바람직하게는 3 내지 20개, 보다 바람직하게는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수 있는, 5 내지 60 개, 바람직하게는 5 내지 40 개, 보다 바람직하게는 5 내지 30 개, 매우 바람직하게는 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고; 여기서 2 개의 인접한 치환기 R^{0a} 는, 위와 동일한 의미를 갖는, 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있는 단환 또는 다환의 지방족 고리 시스템 또는 방향족 고리 시스템을 형성할 수도 있다; 그리고

[0241] 식 (Ar50-2) 및 (Ar51-2) 의 기는, 위와 동일한 의미를 갖는, 기 R 에 의해 각각의 자유 위치에서 치환될 수도 있다.

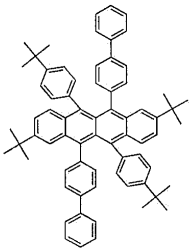
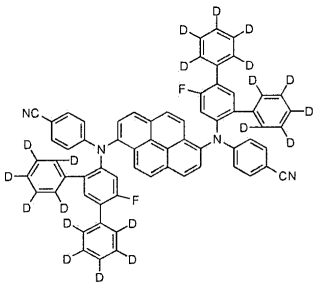
[0242] 바람직하게 기 RS 는, R, R^0 또는 R´ 을 대체하는 위치에 위치된다.

[0243] 식 (H1) 및 (H2) 의 화합물을 포함하는 조성물에 사용될 수도 있는 형광 방출체의 예는 방향족 안트라센아민, 방향족 안트라센디아민, 방향족 피렌아민, 방향족 피렌디아민, 방향족 크리센아민 또는 방향족 크리센디아민이다. 방향족 안트라센아민은, 하나의 디아릴아미노기가 안트라센기에 직접, 바람직하게는 9-위치에서 결합하는 화합물을 의미하는 것으로 여겨진다. 방향족 안트라센디아민은, 2개의 디아릴아미노기가 안트라센기에 직접, 바람직하게는 9,10-위치에서 결합하는 화합물을 의미하는 것으로 여겨진다. 방향족 피렌아민, 피렌디아민, 크리센아민 및 크리센디아민은 이와 유사하게 정의되며, 여기서 디아릴아미노 기는 바람직하게는 1-위치 또는 1,6-위치에서 피렌에 결합된다. 추가의 바람직한 방출체는 인데노플루오렌아민 또는 인데노플루오렌디아민 (예를 들어, WO 2006/108497 또는 WO 2006/122630 에 따름), 벤조인데노플루오렌아민 또는 벤조인데노플루오렌디아민 (예를 들어, WO 2008/006449 에 따름), 및 디벤조인데노플루오렌아민 또는 디벤조인데노플루오렌디아민 (예를 들어, WO 2007/140847 에 따름), 및 WO 2010/012328 에 개시된 축합 아릴 기를 함유하는 인데노플루오렌 유도체이다. 또 추가 바람직한 방출체는 WO 2015/158409 에 개시된 바와 같은 벤즈안트라센 유도체, WO 2017/036573 에 개시된 바와 같은 안트라센 유도체, WO 2016/150544 에서와 같이 헤테로아릴 기를 통해 연결된 플루오렌 이량체 또는 WO 2017/028940 및 WO 2017/028941에 개시된 바와 같은 페녹사진 유도체이다. WO 2012/048780 및 WO 2013/185871 에서 개시된 피렌아릴아민이 마찬가지로 바람직하다. 마찬가지로 WO 2014/037077 에 개시된 벤조인데노플루오렌아민, WO 2014/106522 에 개시된 벤조플루오렌아민 및 WO 2014/111269 또는 WO 2017/036574, WO 2018/007421 에 개시된 인데노플루오렌이 바람직하다. 또한 WO 2018/095888, WO 2018/095940, WO 2019/076789, WO 2019/170572 그리고 미공개 출원 PCT/EP2019/072697, PCT/EP2019/072670 및 PCT/EP2019/072662 에 개시된 바와 같은 디벤조푸란 또는 인데노디벤조푸란 모이어티를 포함하는 방출체가 바람직하다. 마찬가지로, 예를 들어 WO 2015/102118, CN108409769, CN107266484, WO2017195669, US2018069182 및 미공개 출원 EP 19168728.4, EP 19199326.0 및 EP 19208643.7에 개시된 바와 같은 붕소 유도체가 바람직하다.

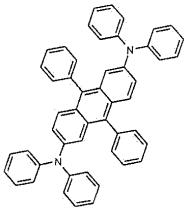
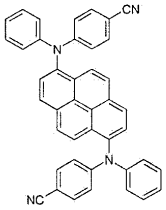
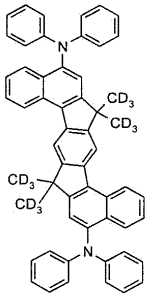
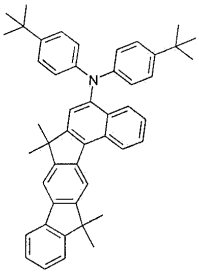
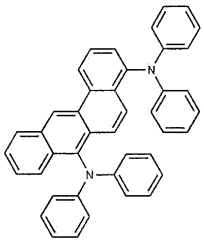
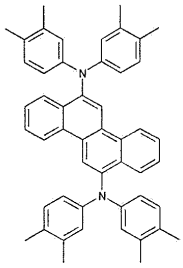
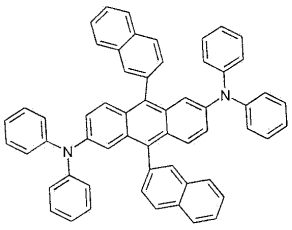
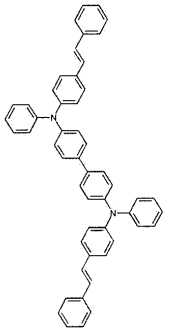
[0244] 본 발명의 경우, 매우 적합한 형광 방출체는 WO 2018/007421에 개시된 인데노플루오렌 유도체 및 WO 2019/076789에 개시된 디벤조푸란 유도체이다.

[0245] 식 (H1) 및 (H2)의 화합물을 포함하는 조성물에 사용될 수도 있는 바람직한 형광 방출 화합물의 예는 하기 표에 묘사되어 있다:

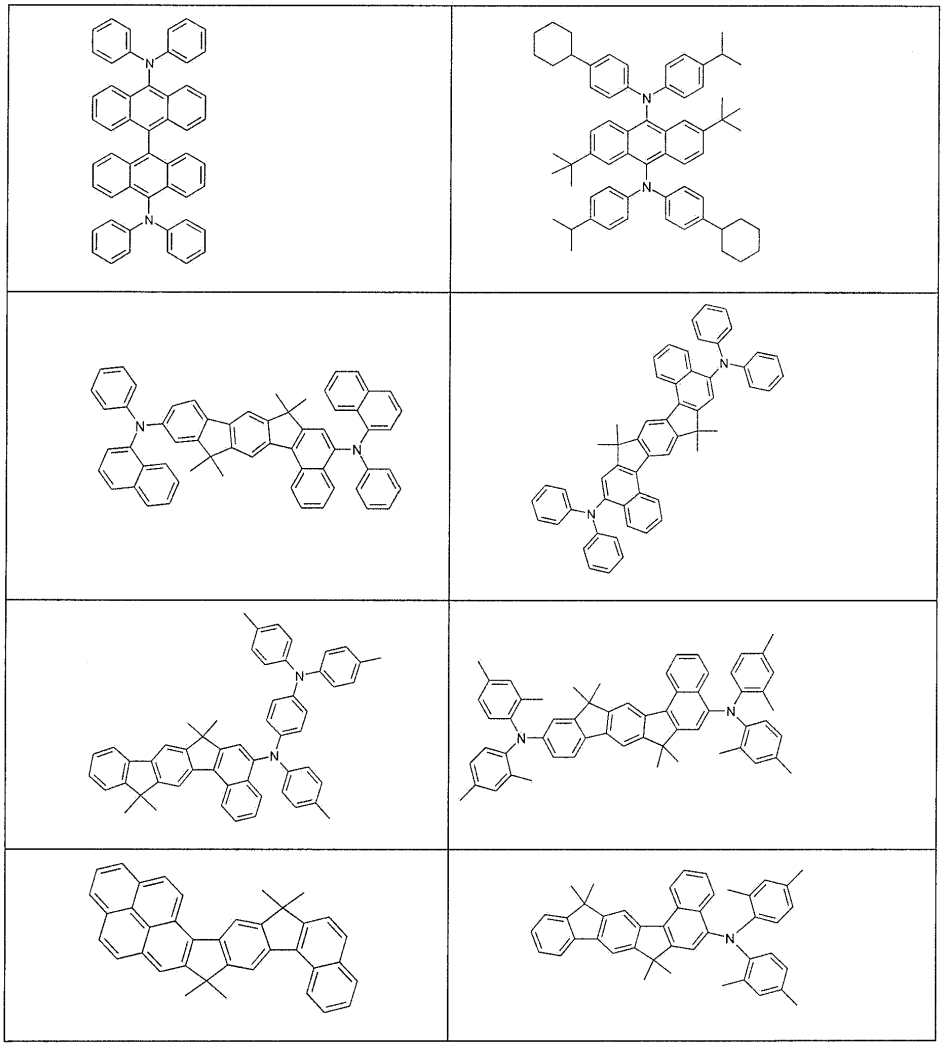
[0246]

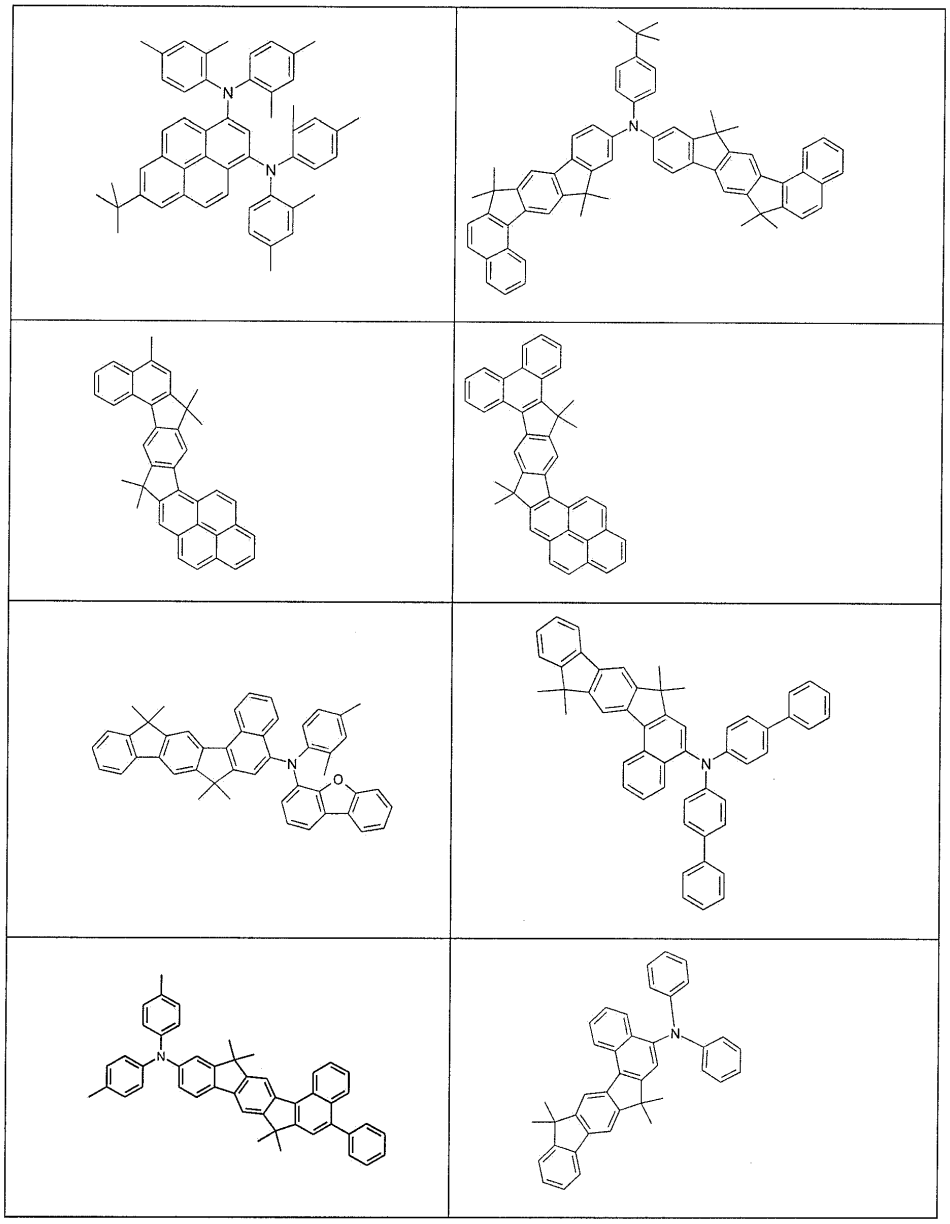
[0247]

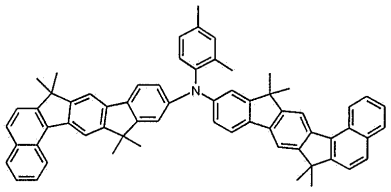
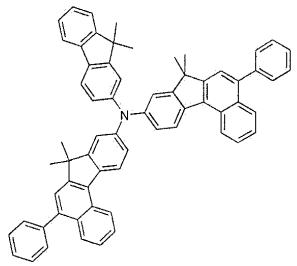
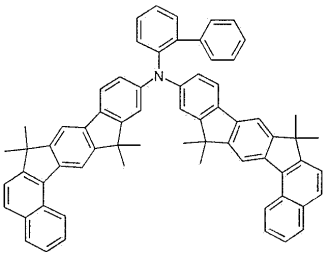
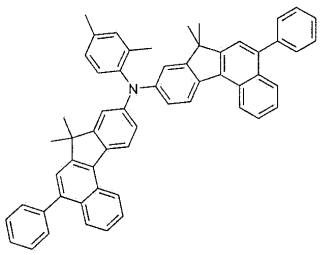
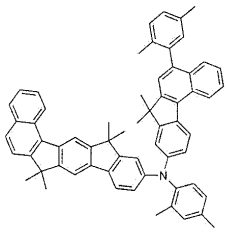
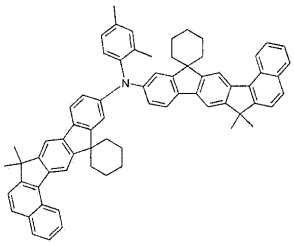
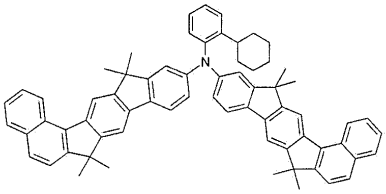
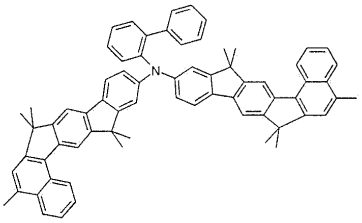
[0248]



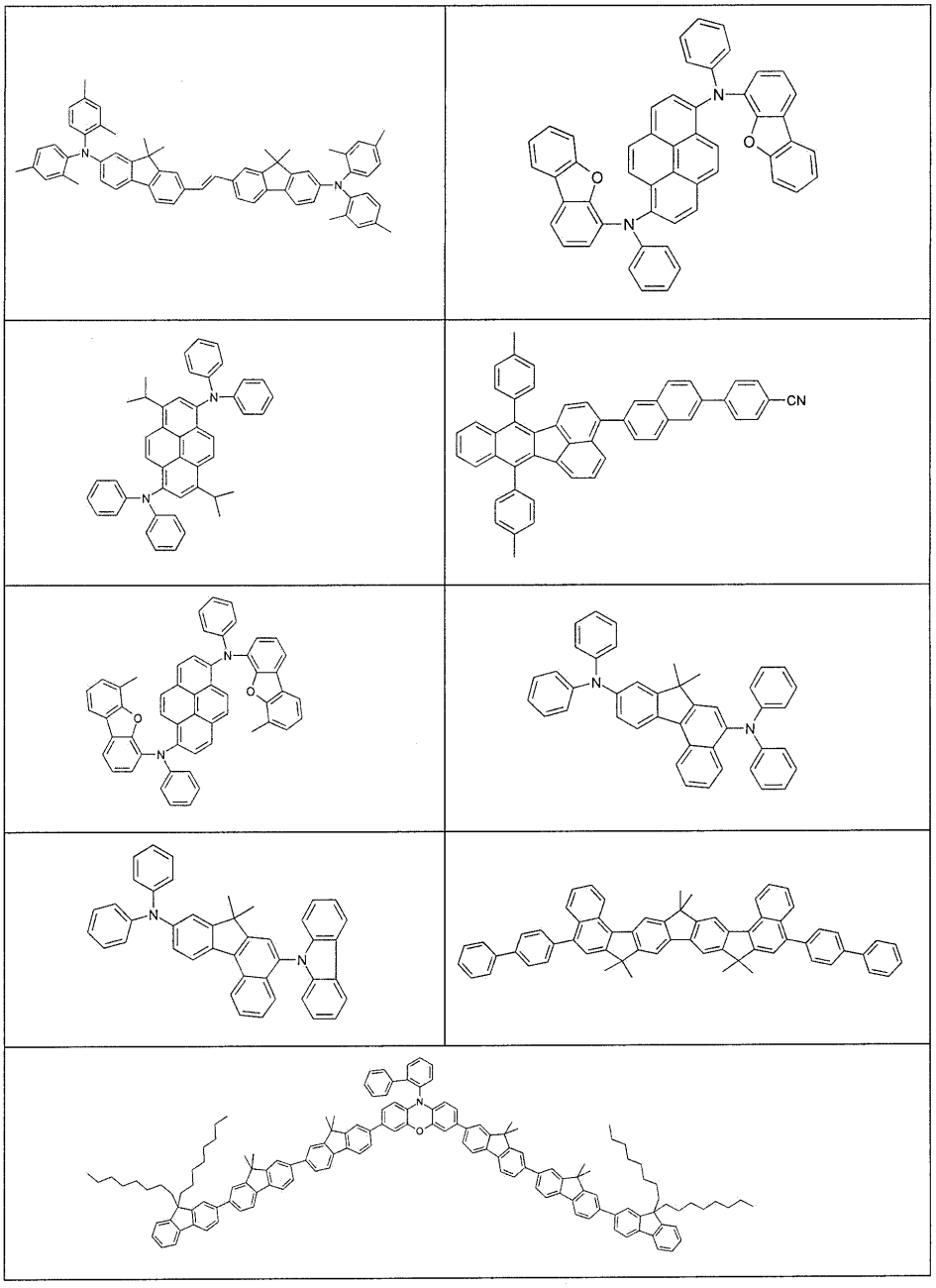
[0249]

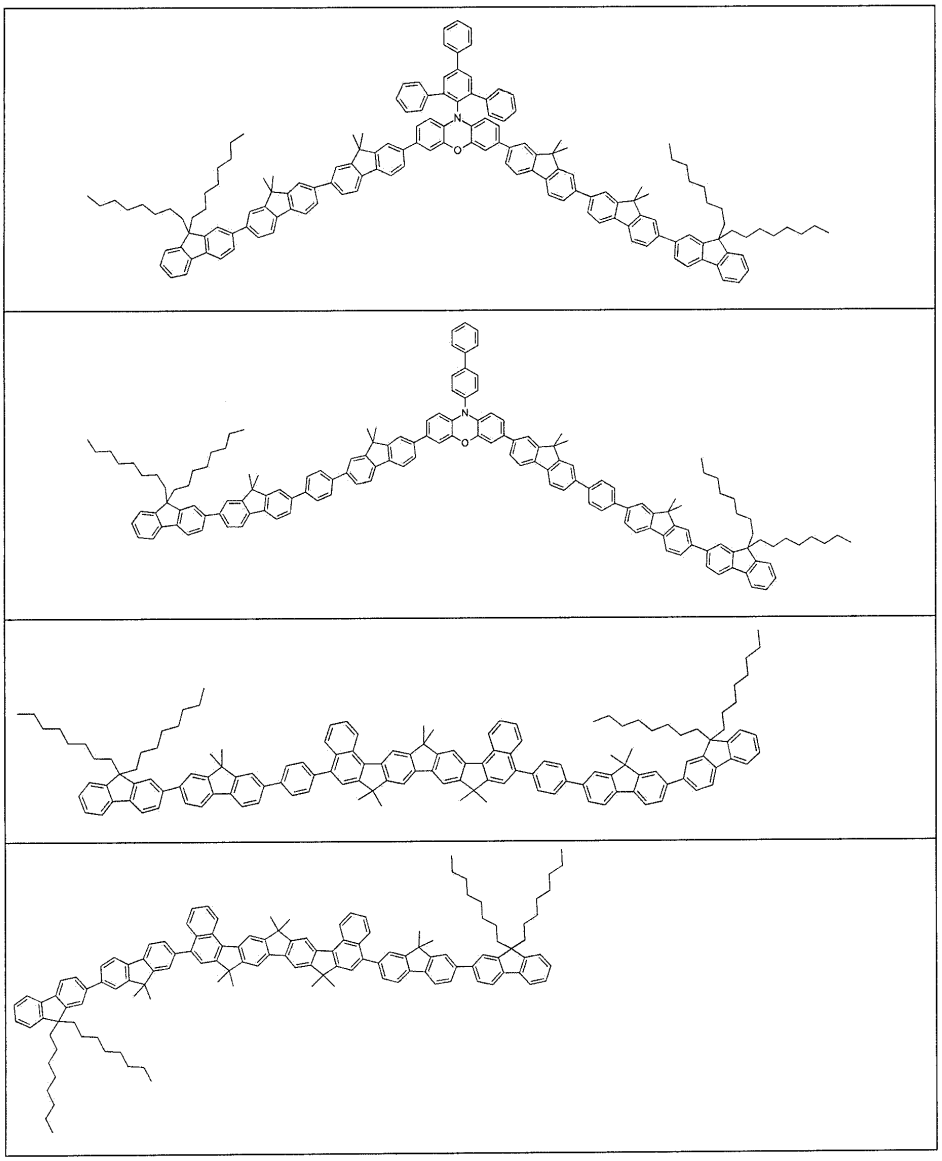


[0250]

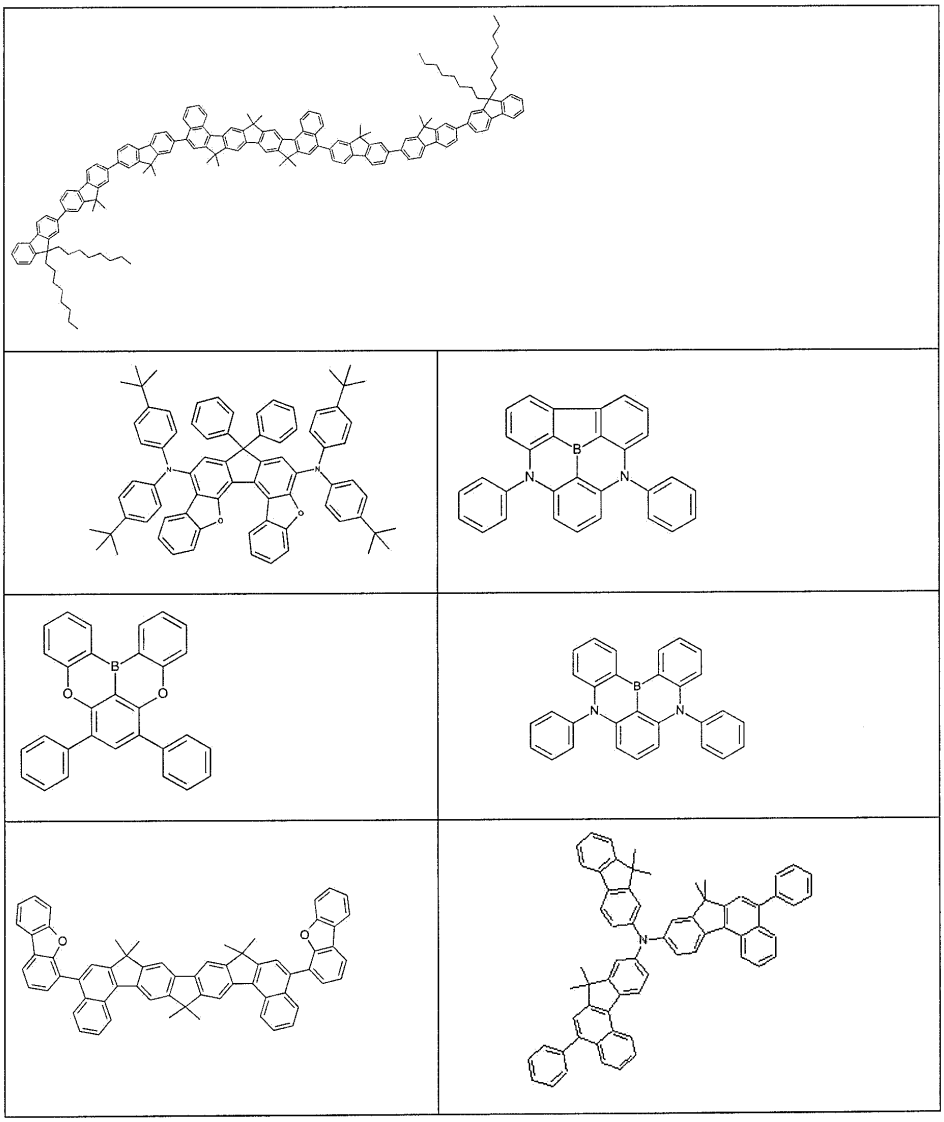
[0251]



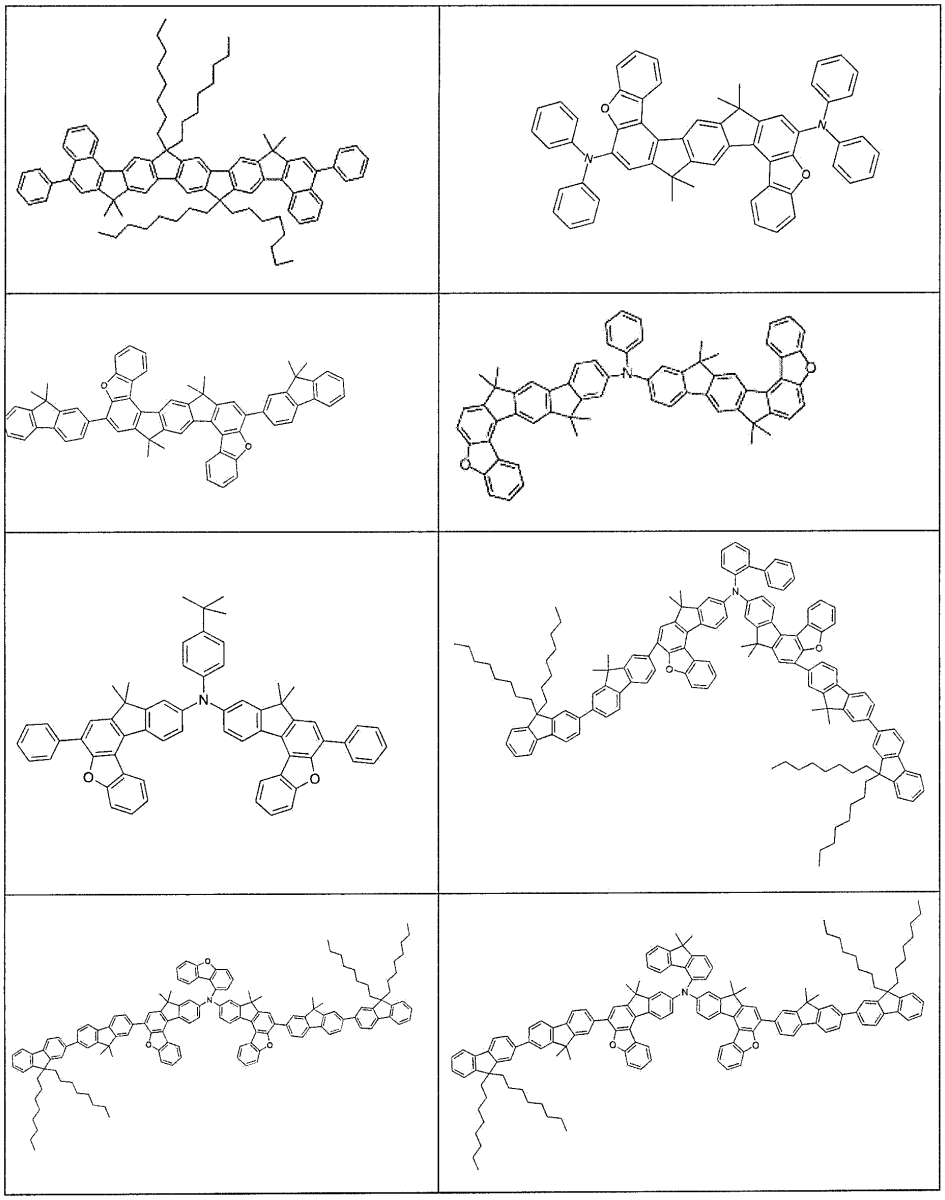


[0252]

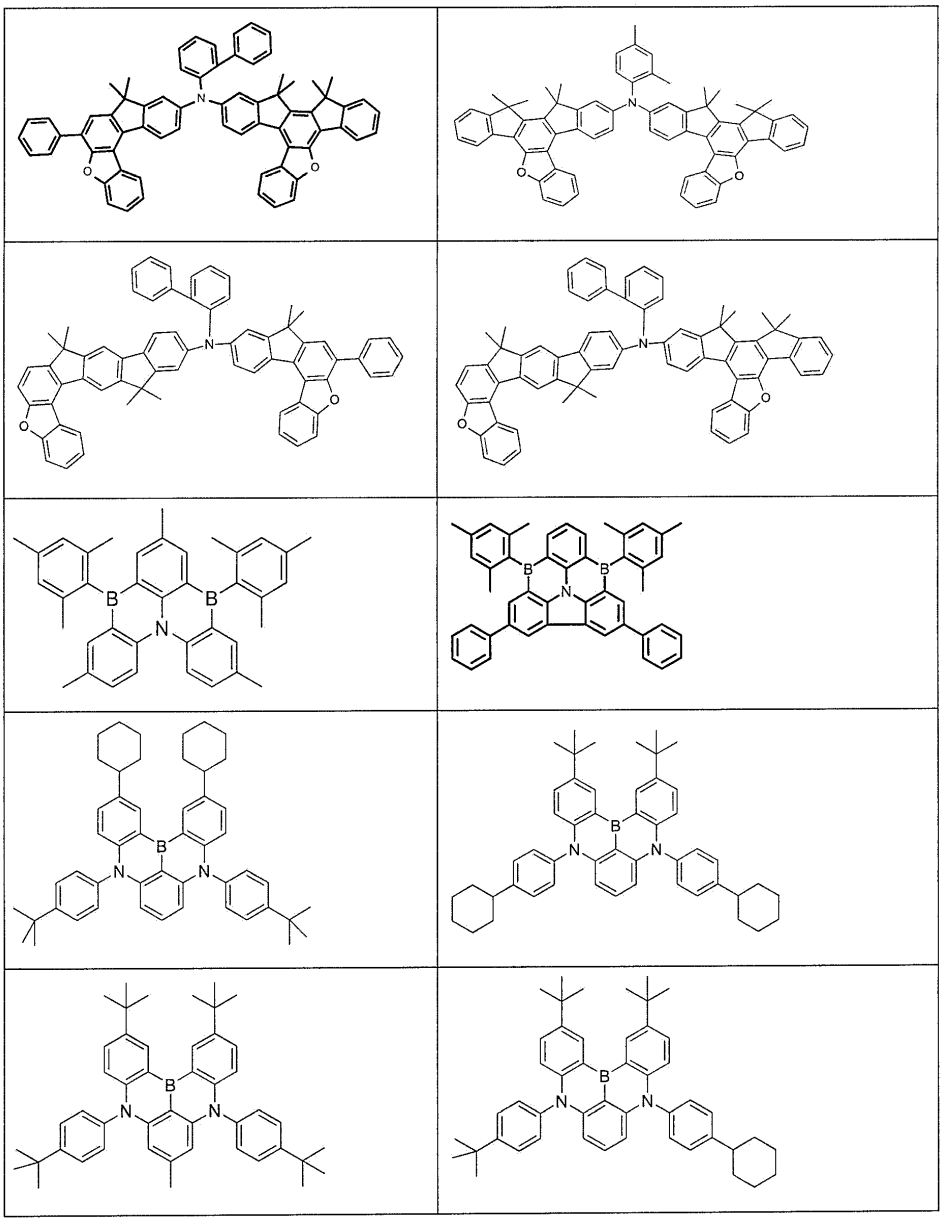
[0253]



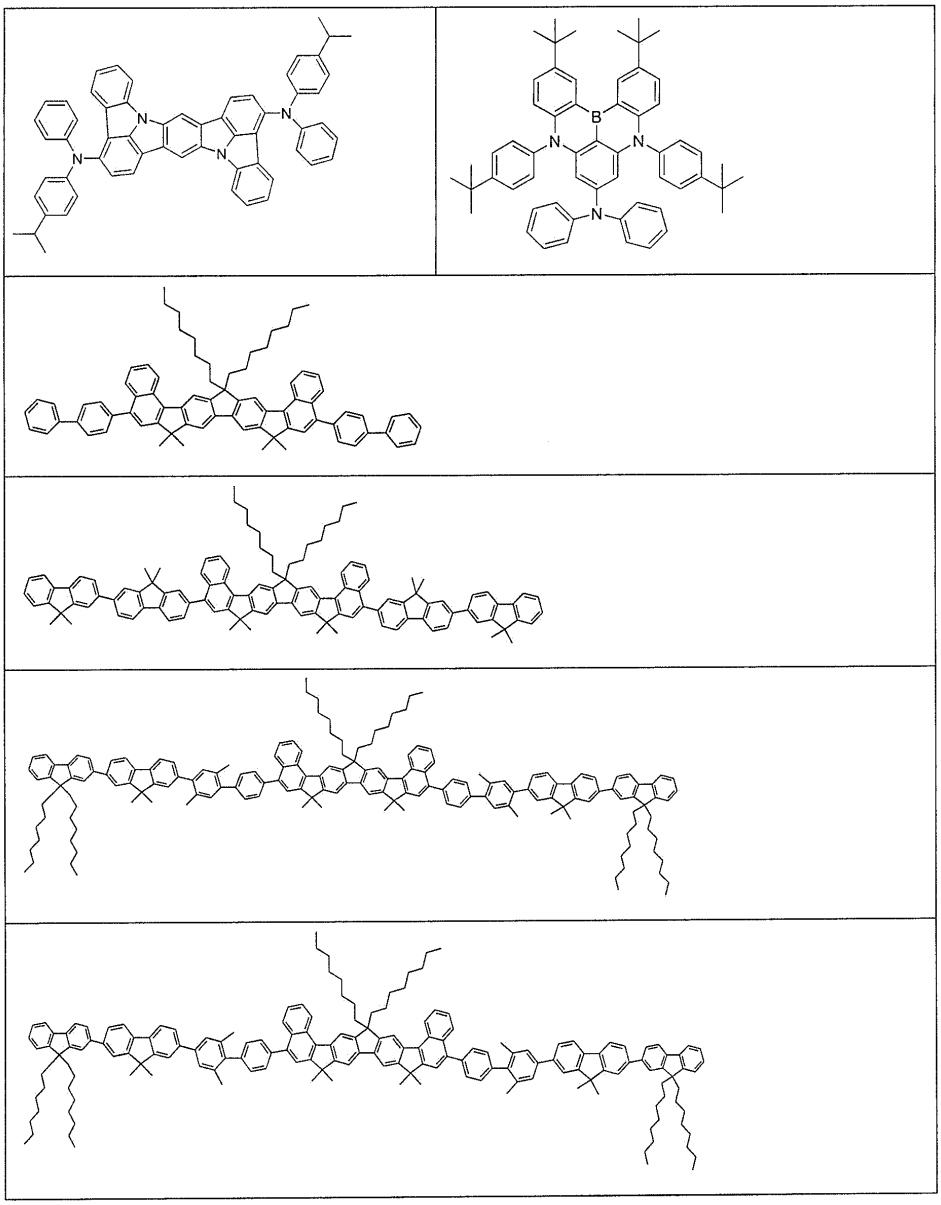
[0254]

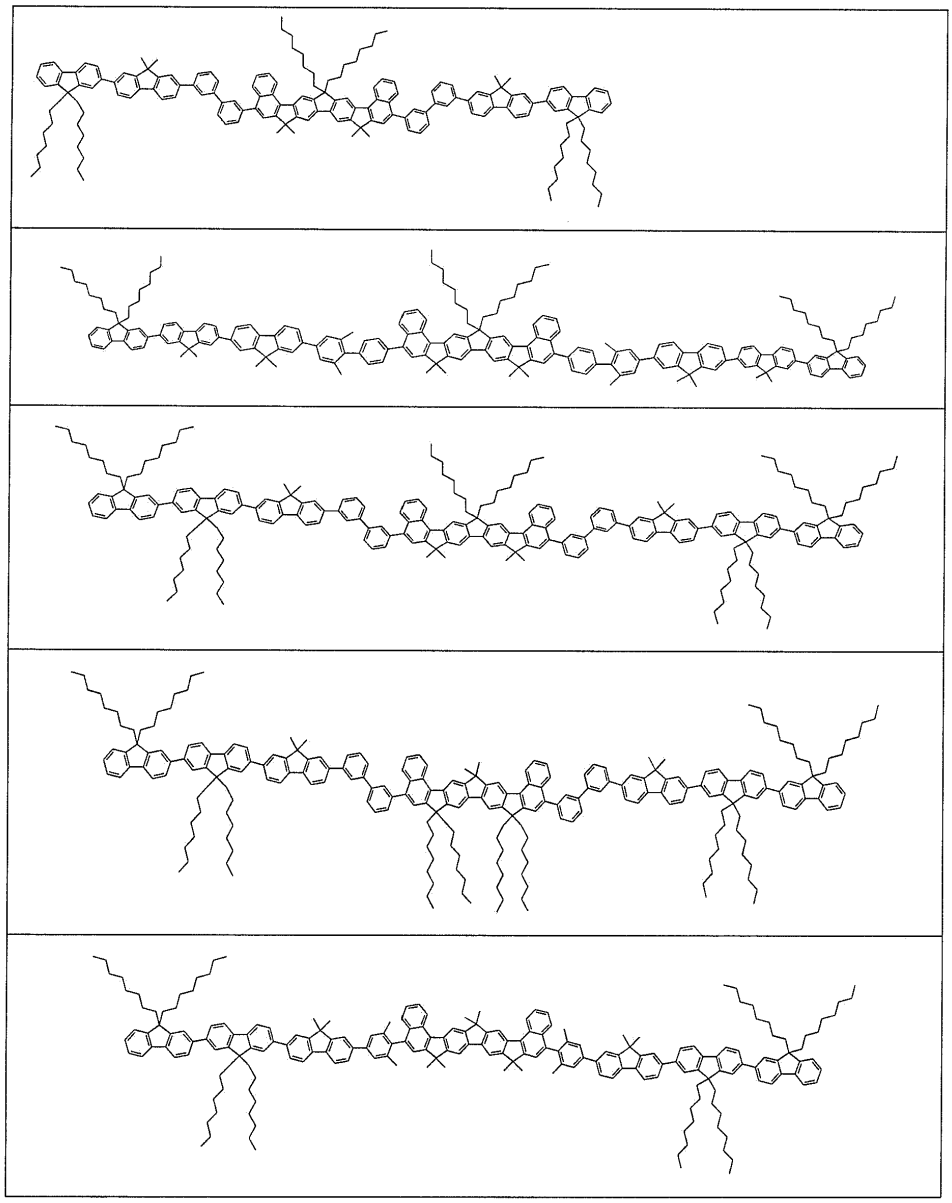


[0255]

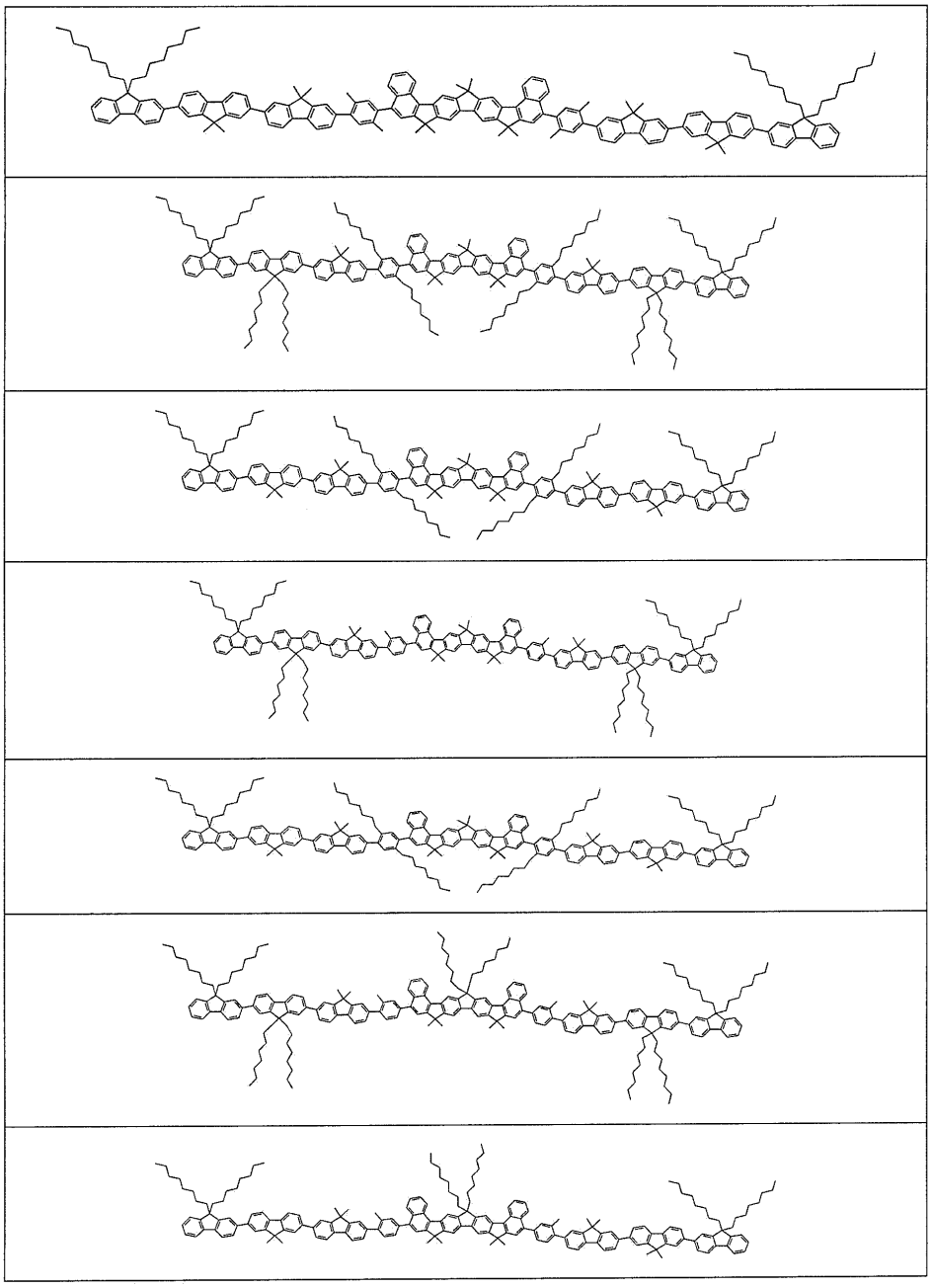


[0256]

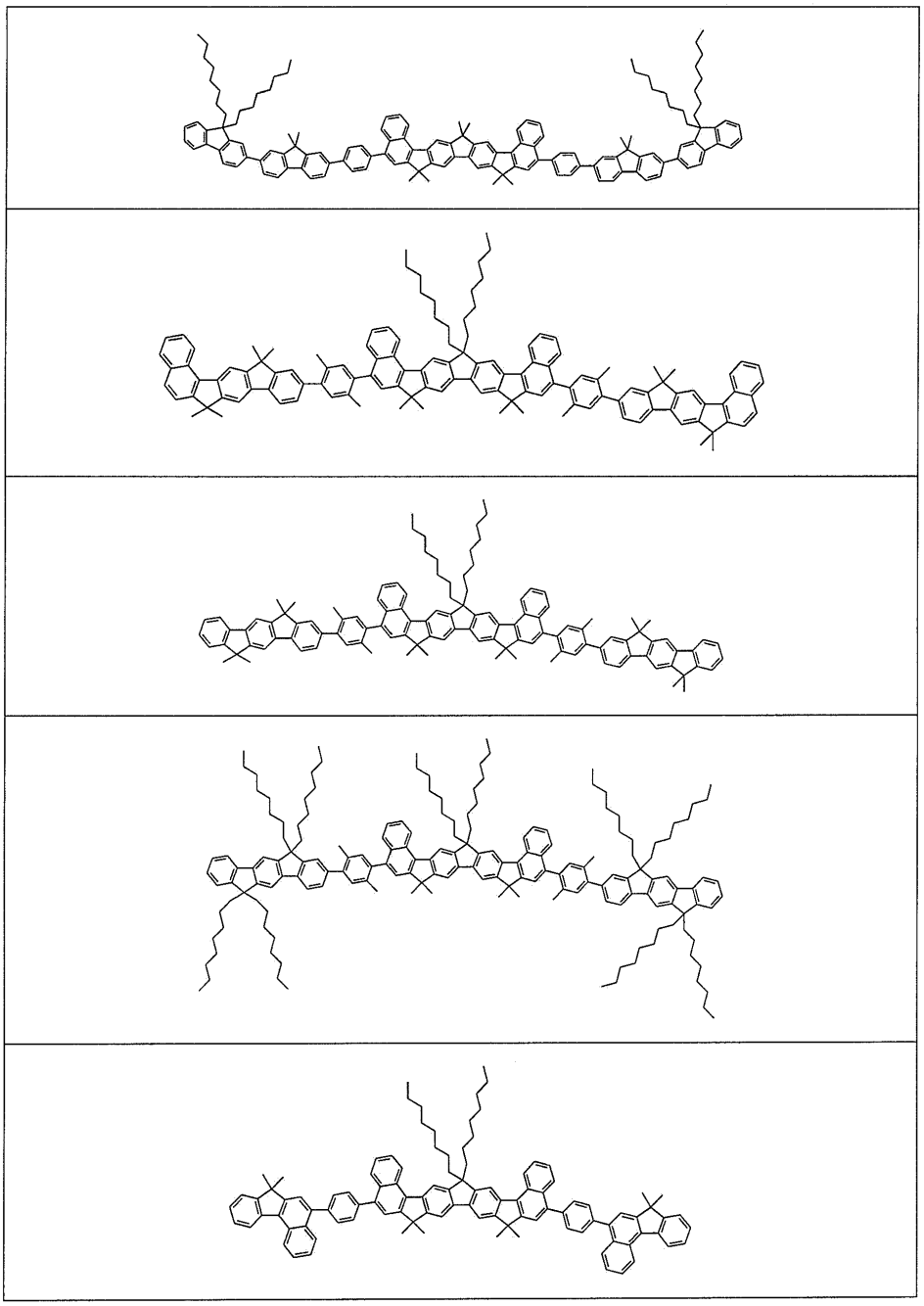




[0257]

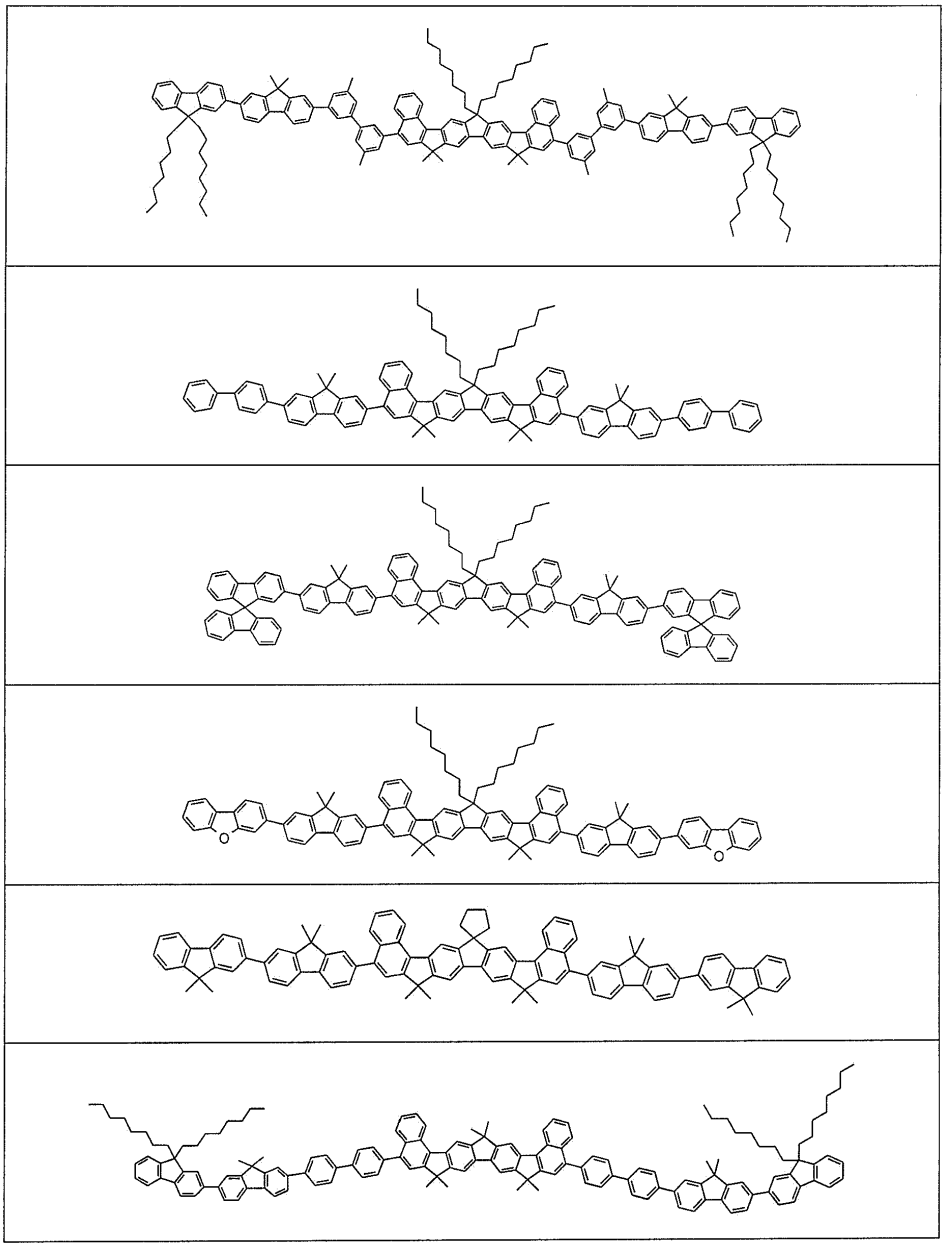


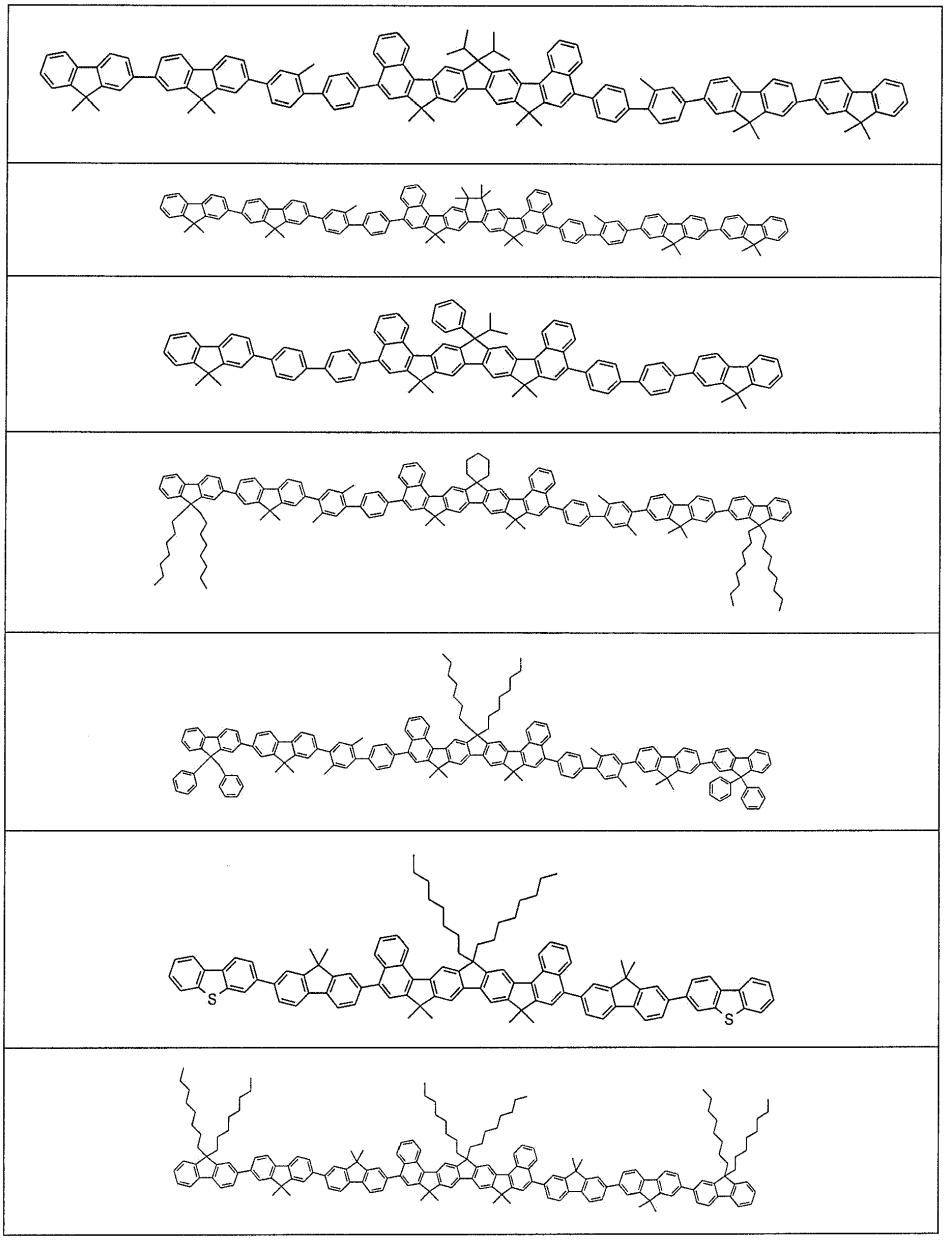
[0258]



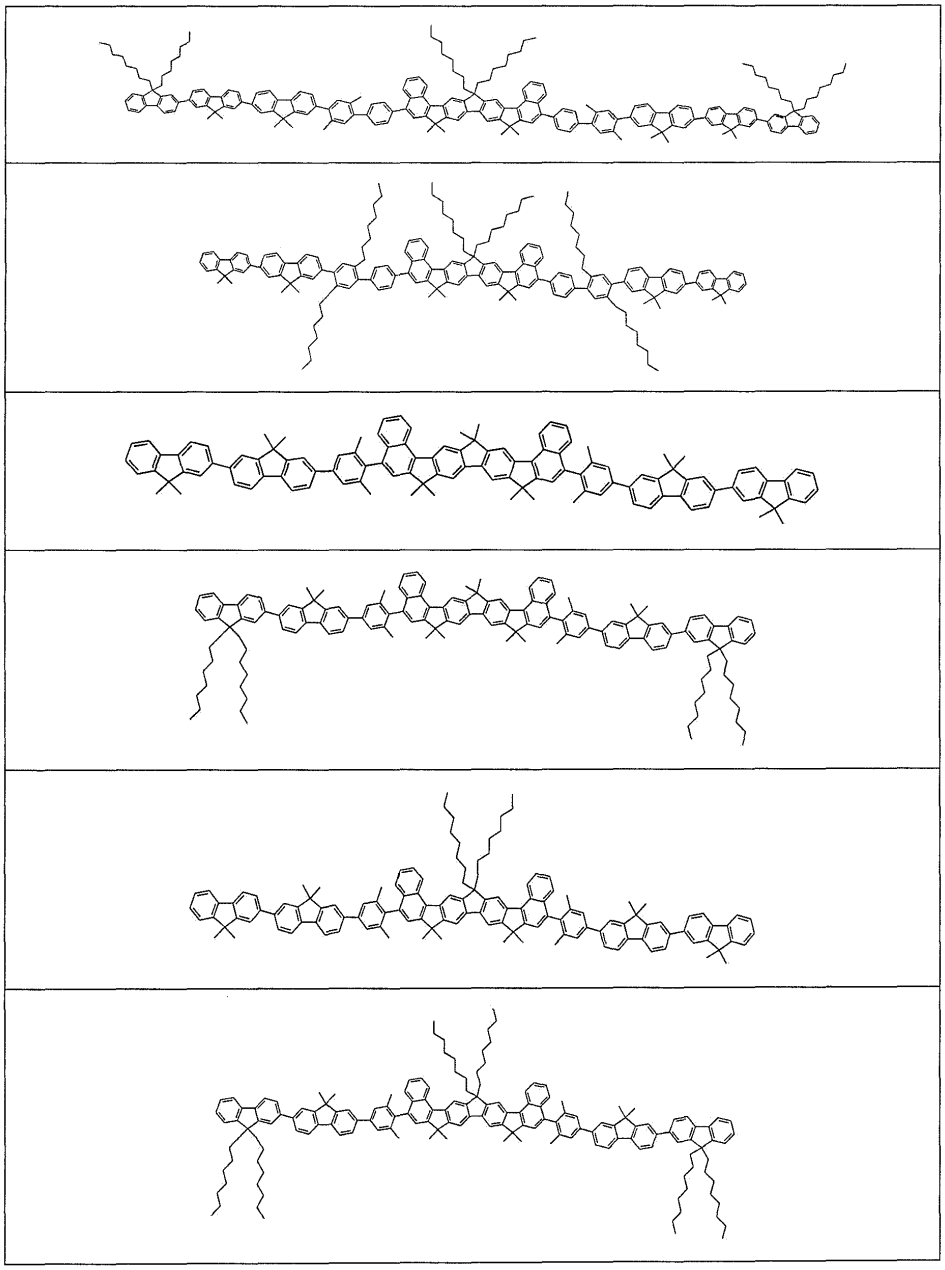
[0259]

[0260]

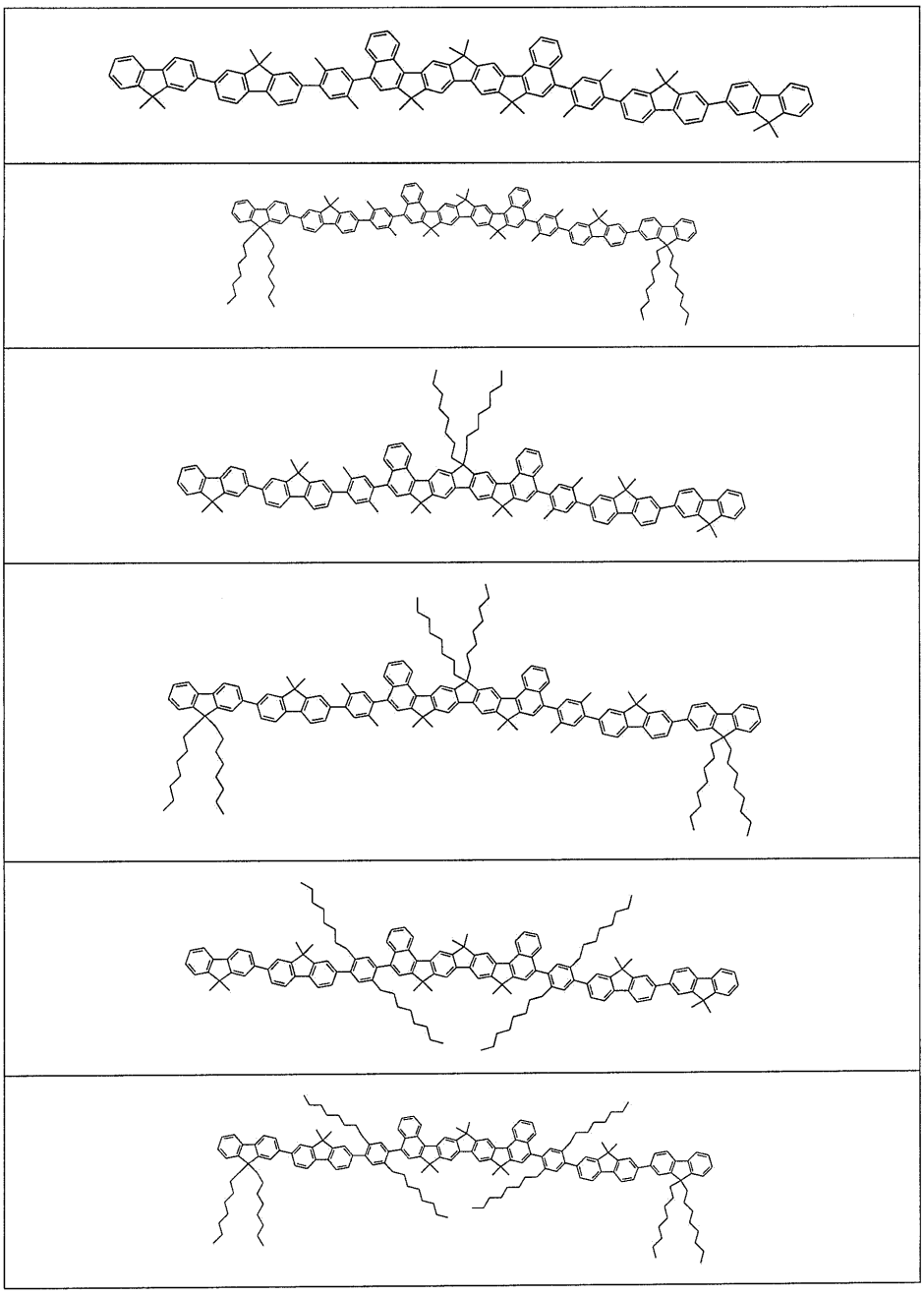




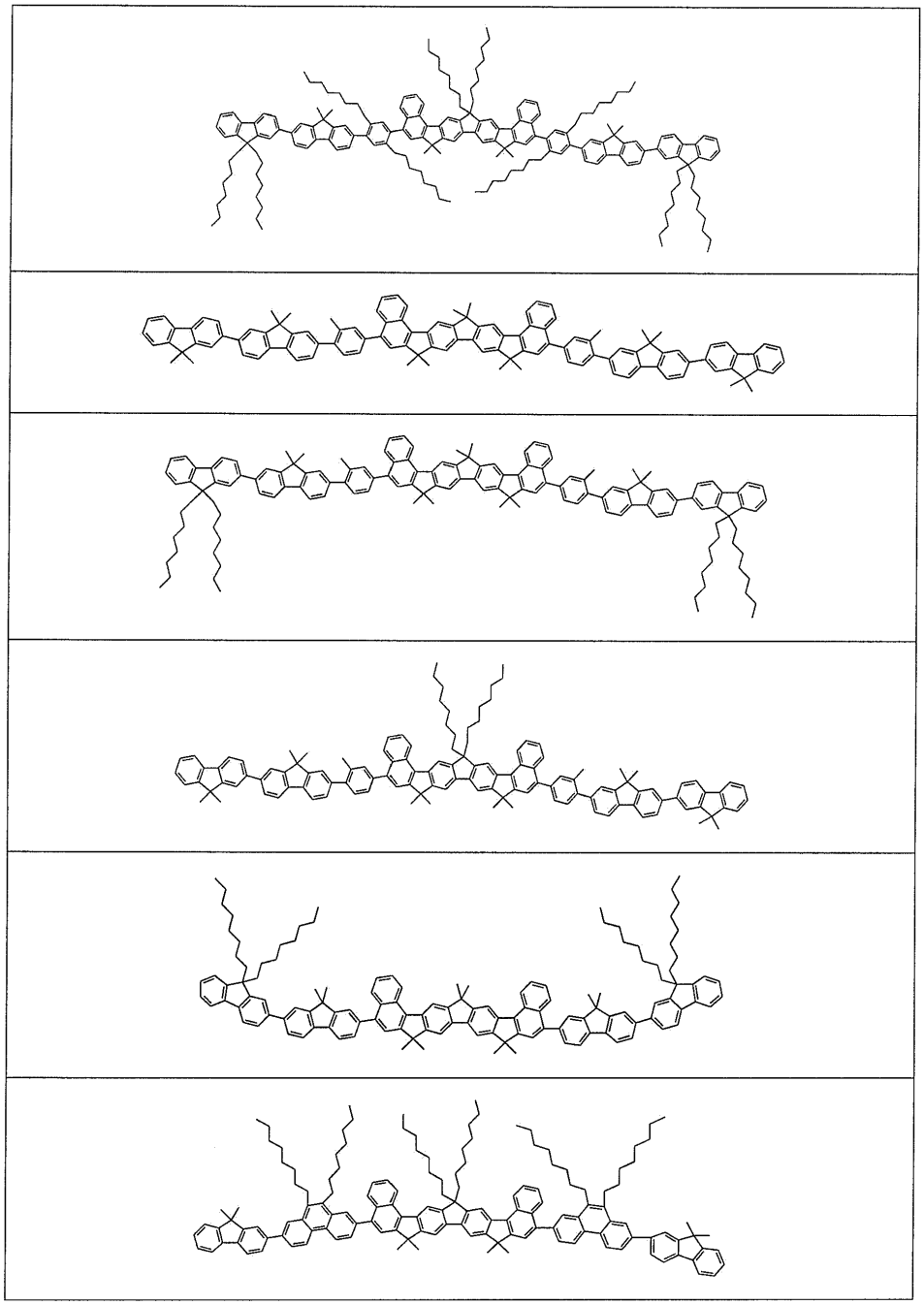
[0261]

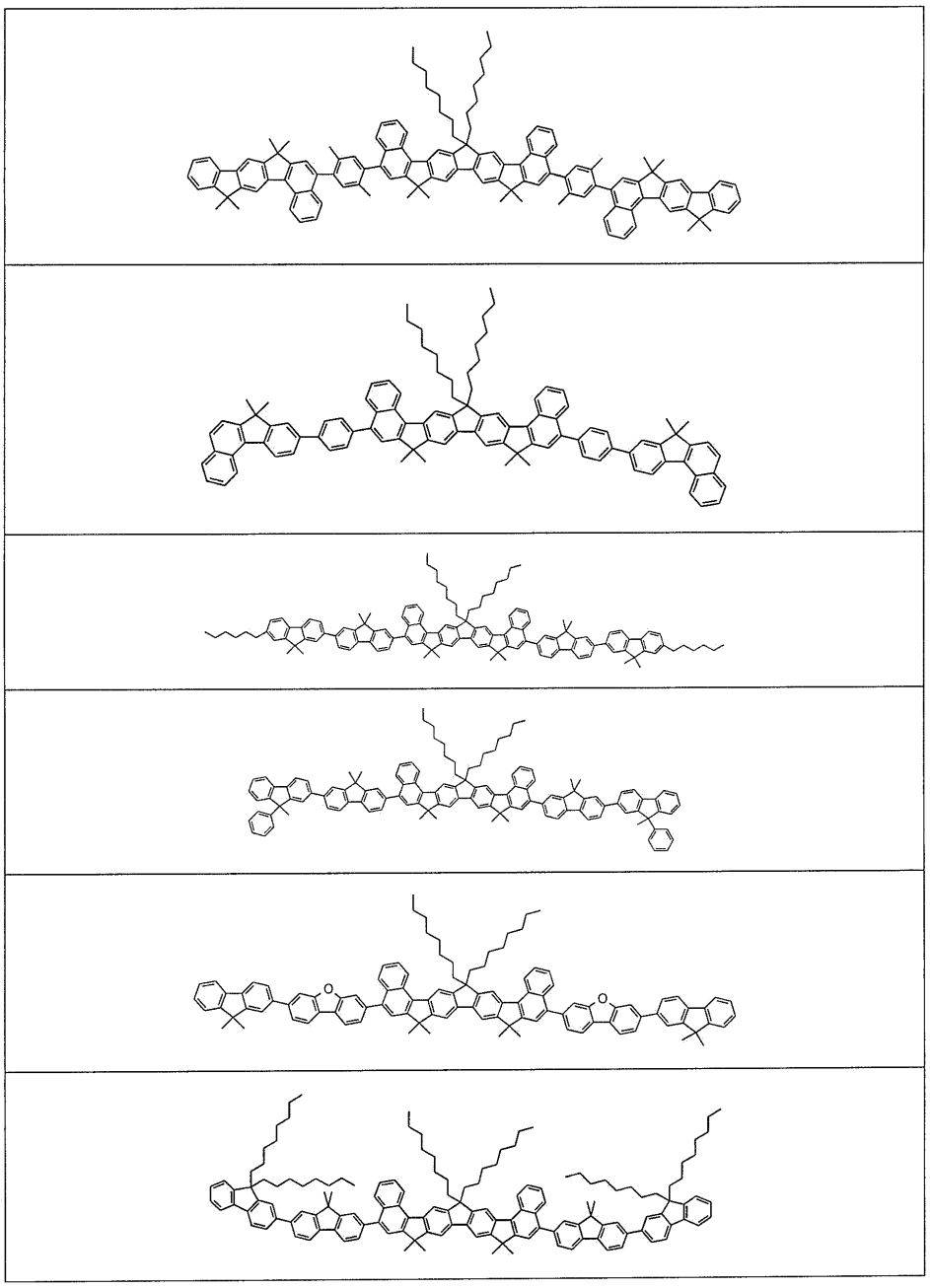


[0262]

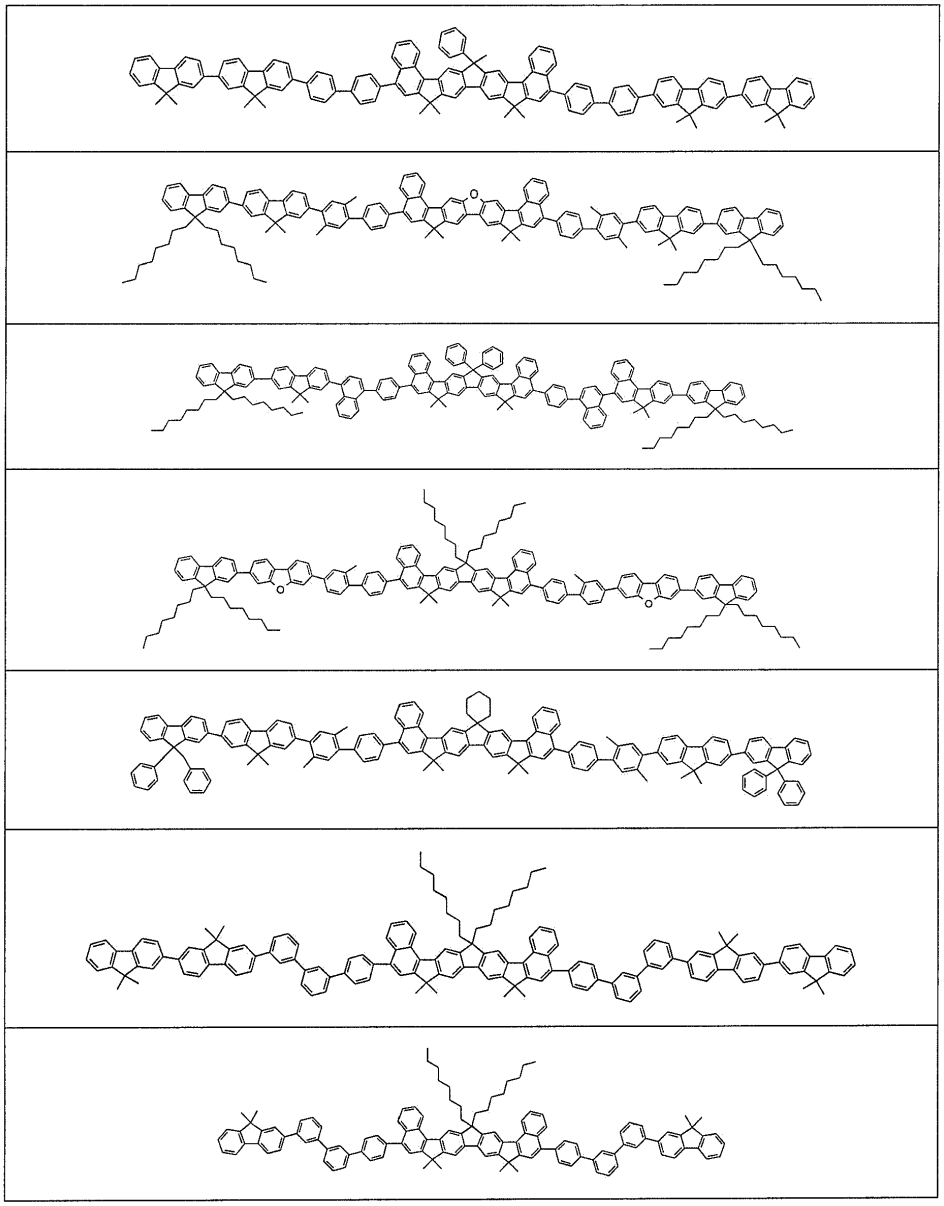
[0263] 

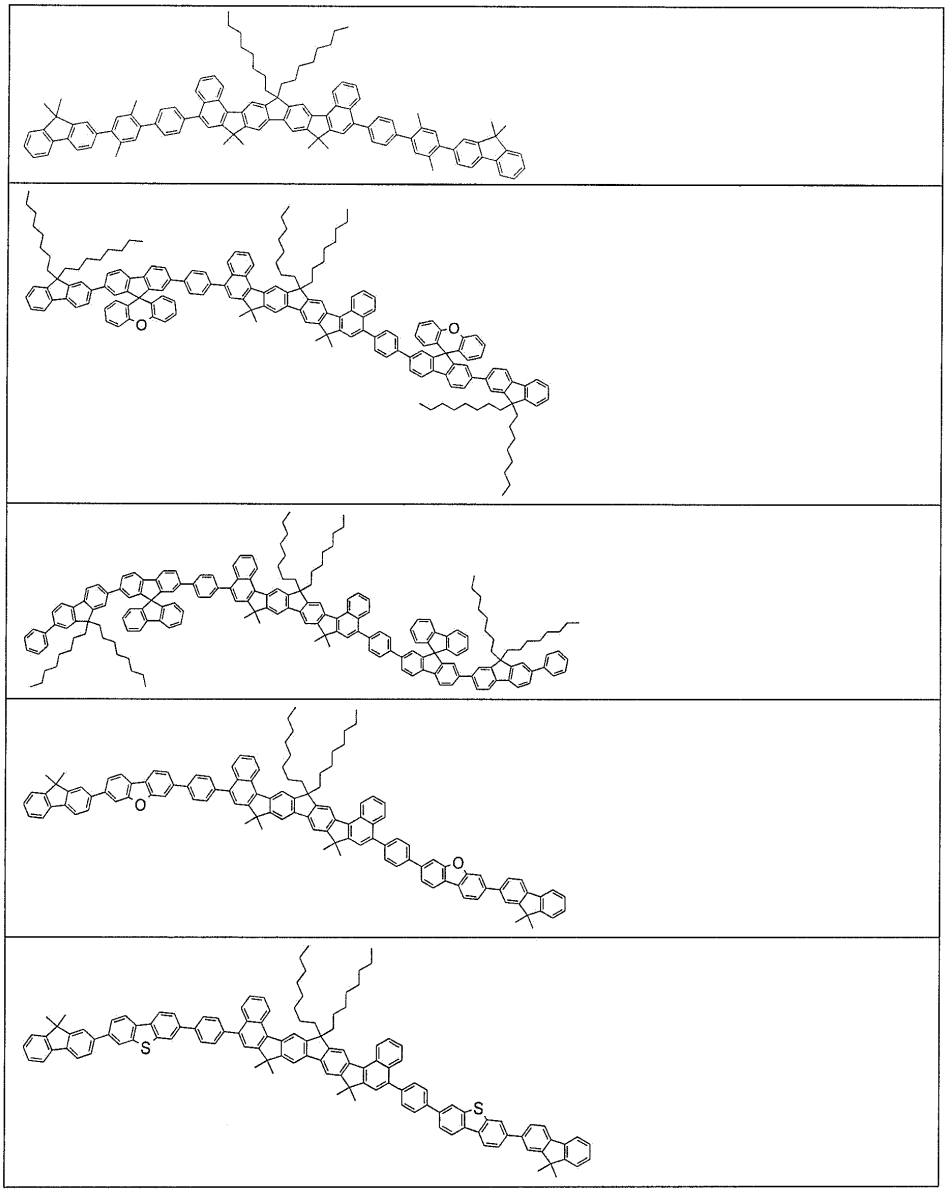
[0264]

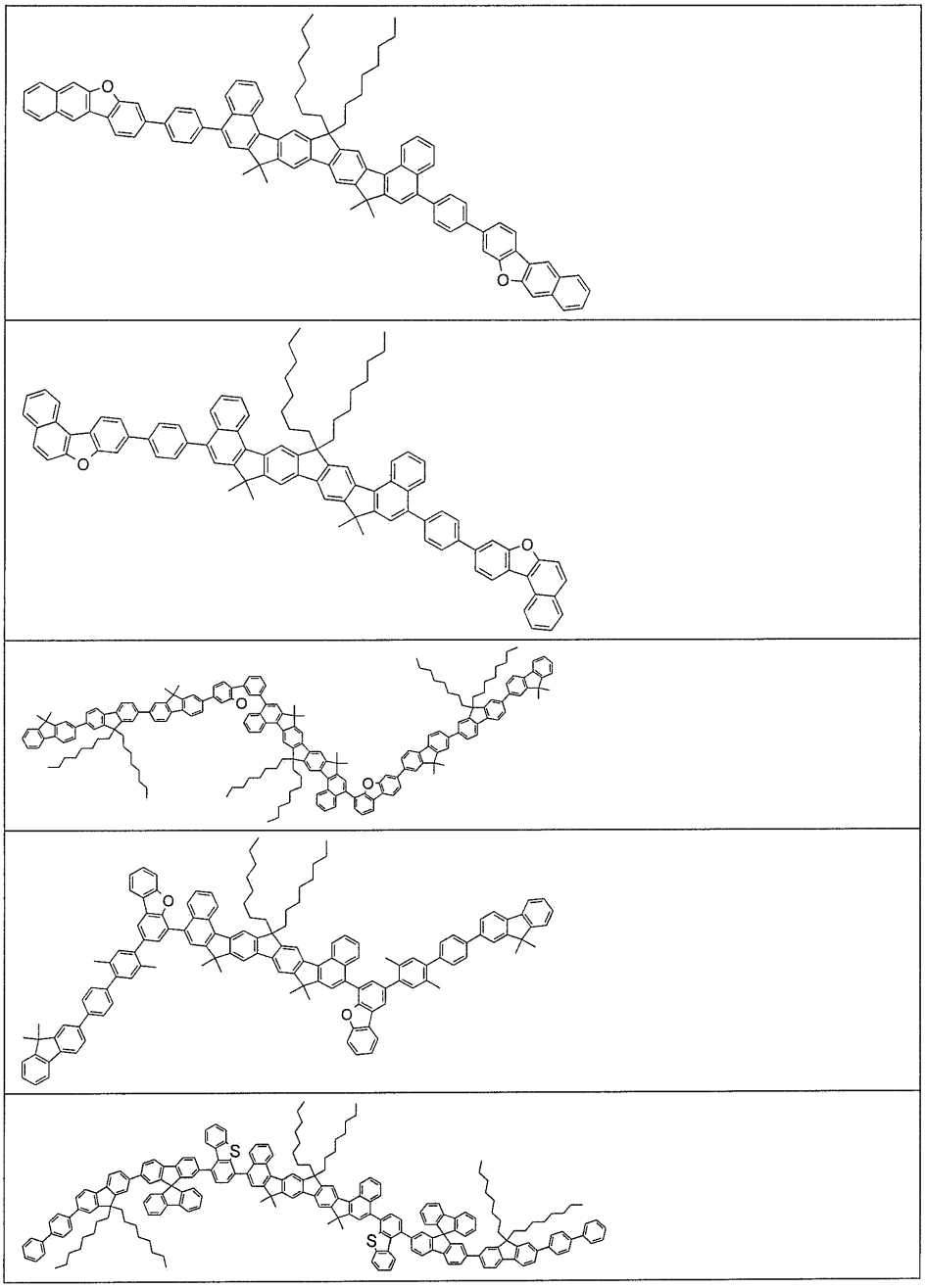




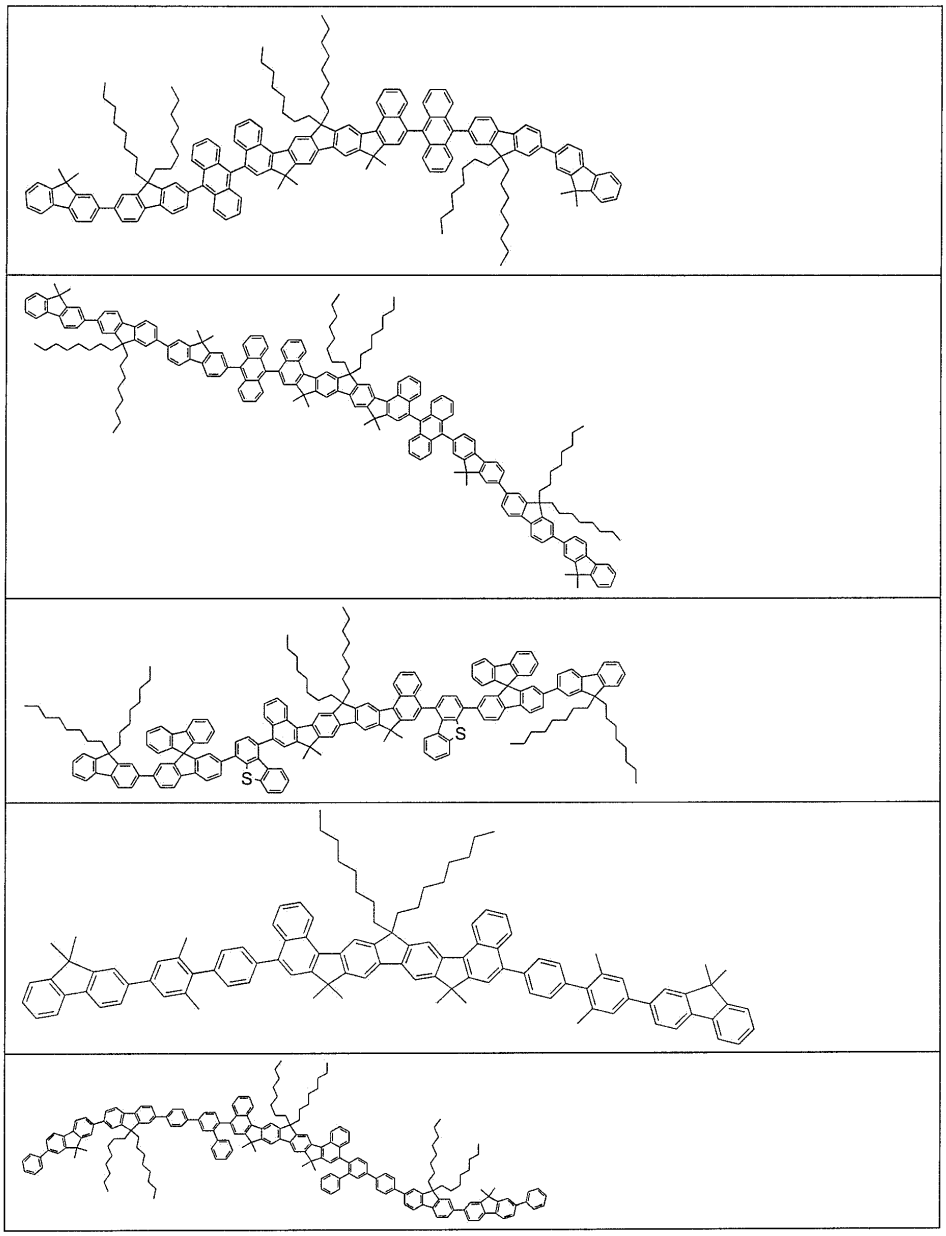
[0265]

[0266] 

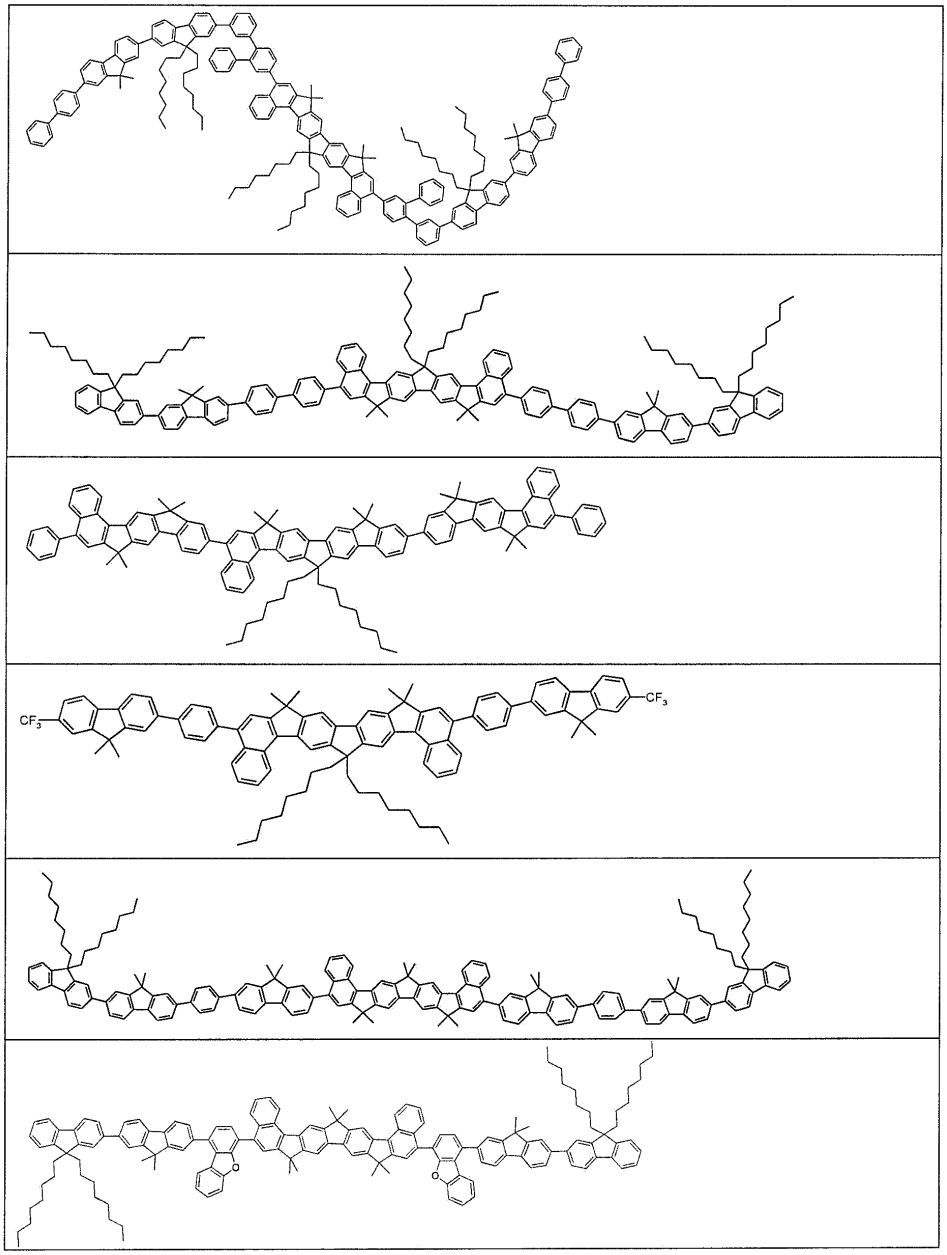
[0267] 

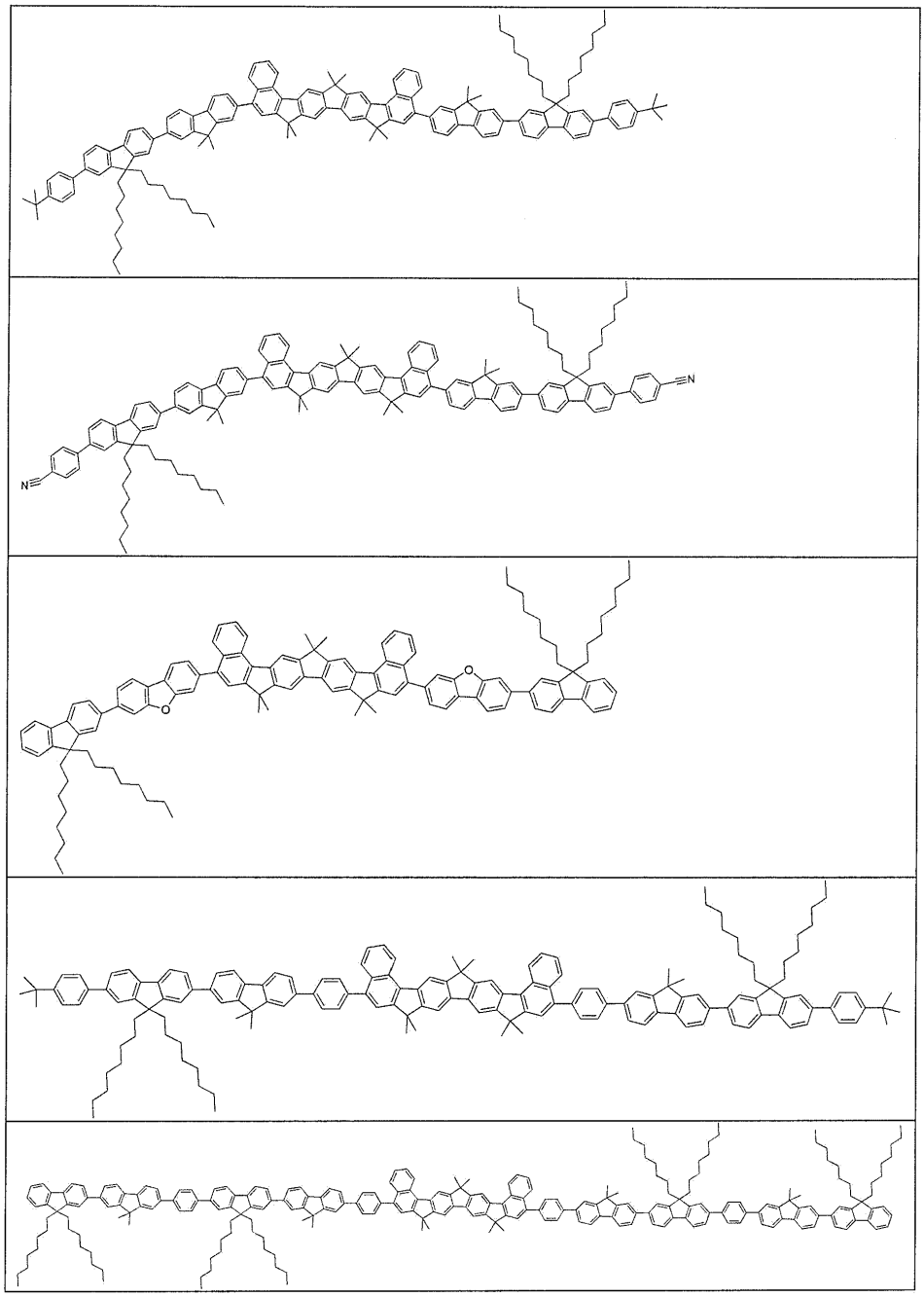
[0268] 

[0269]

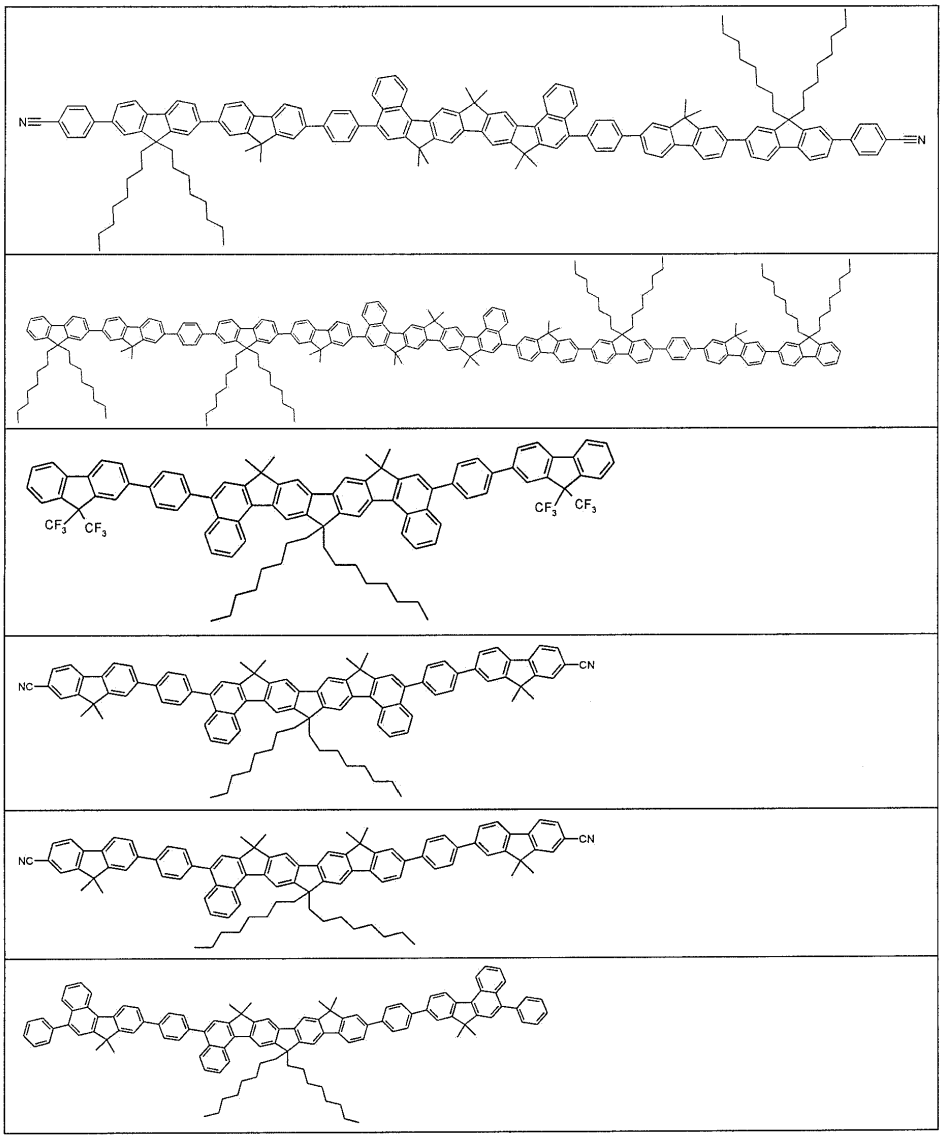


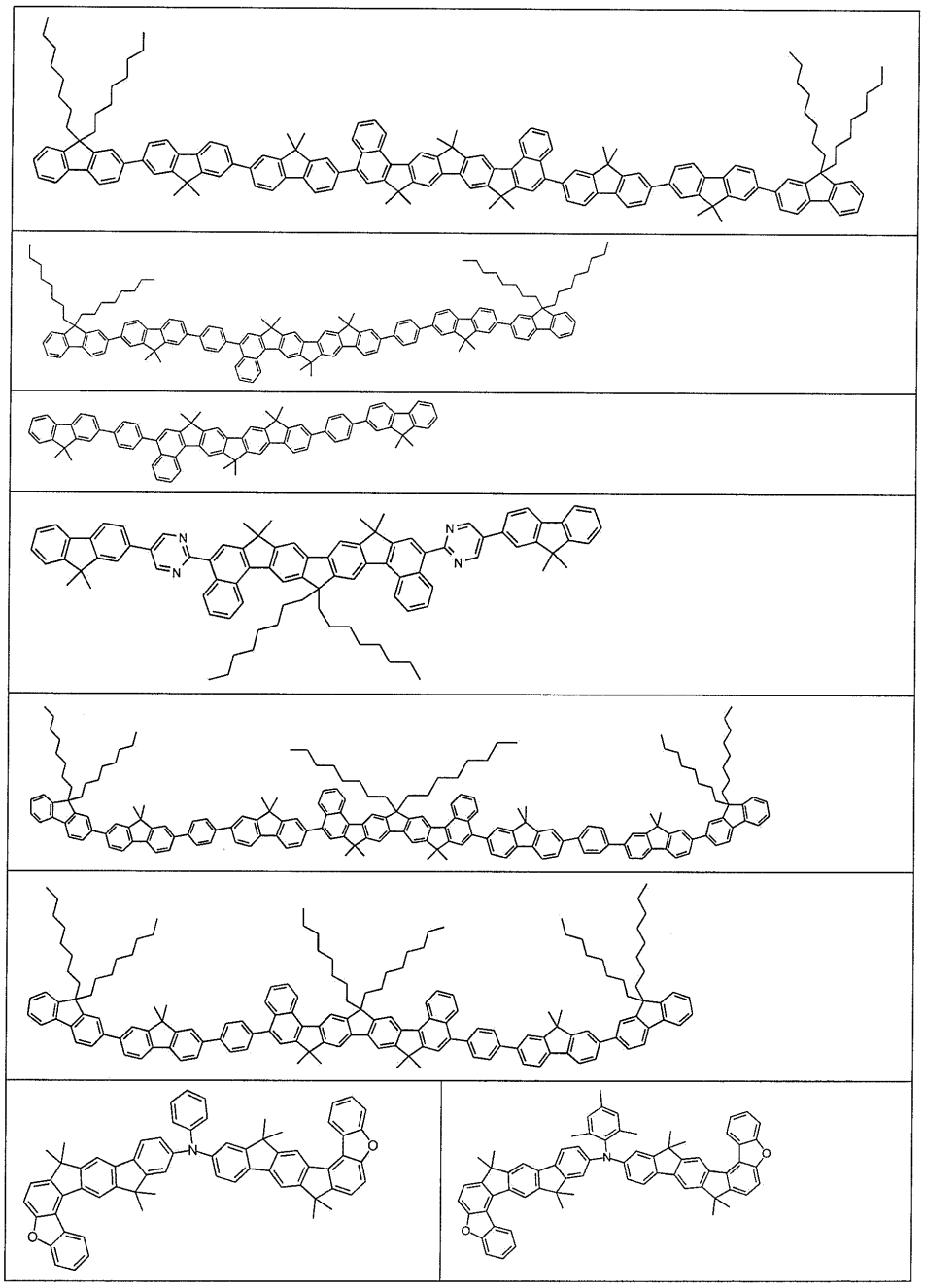
[0270]



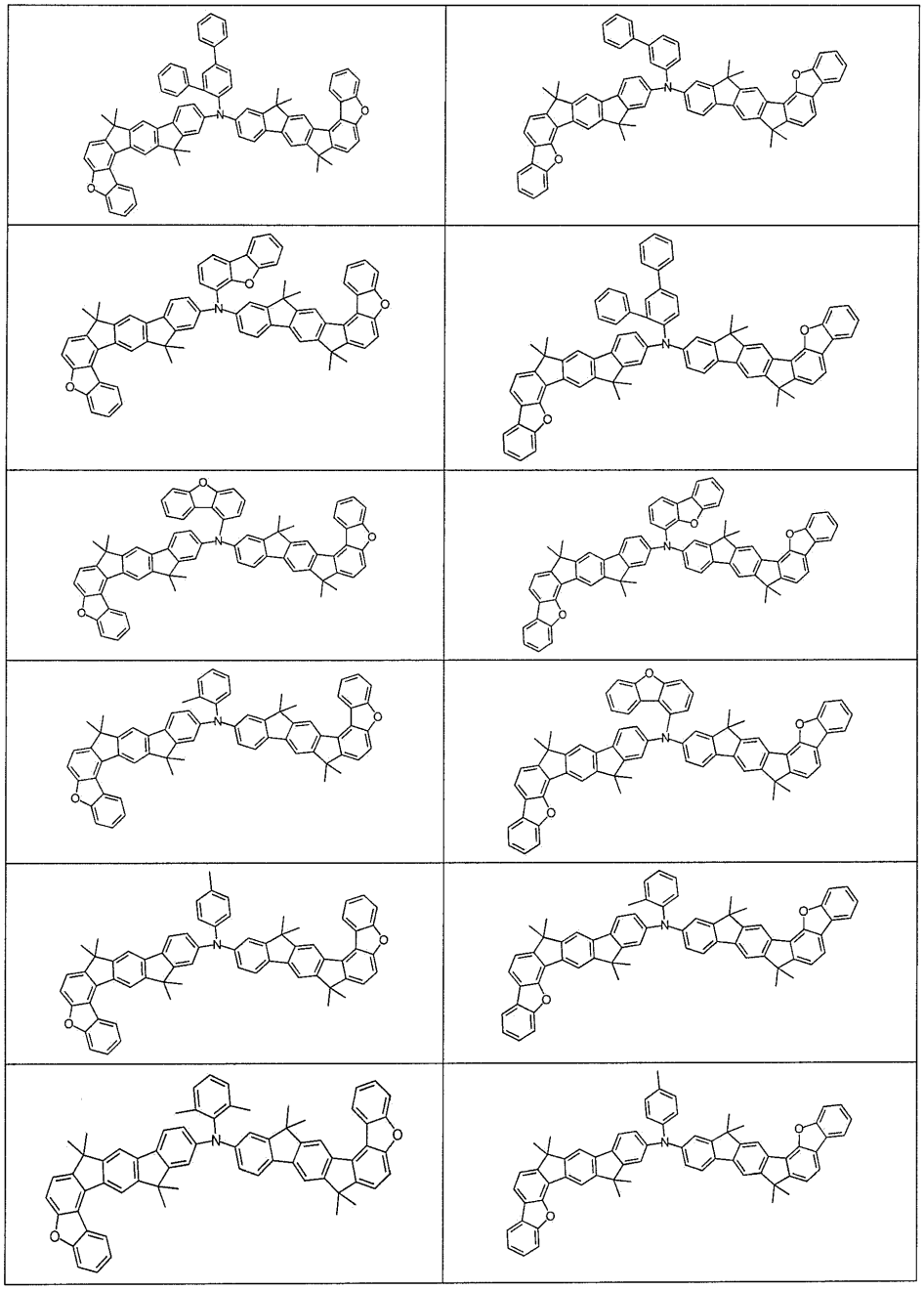
[0271] 

[0272]

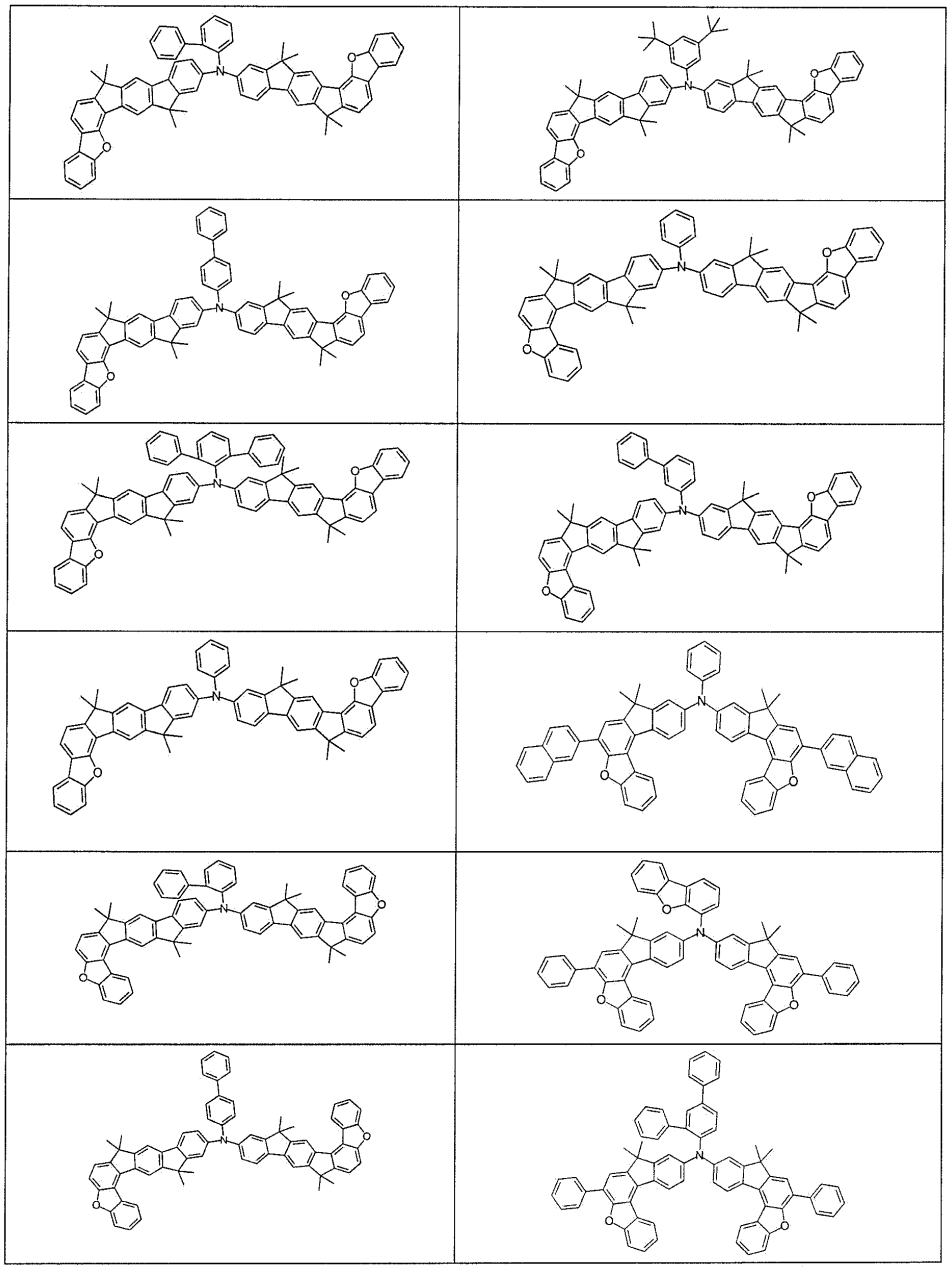


[0273] 

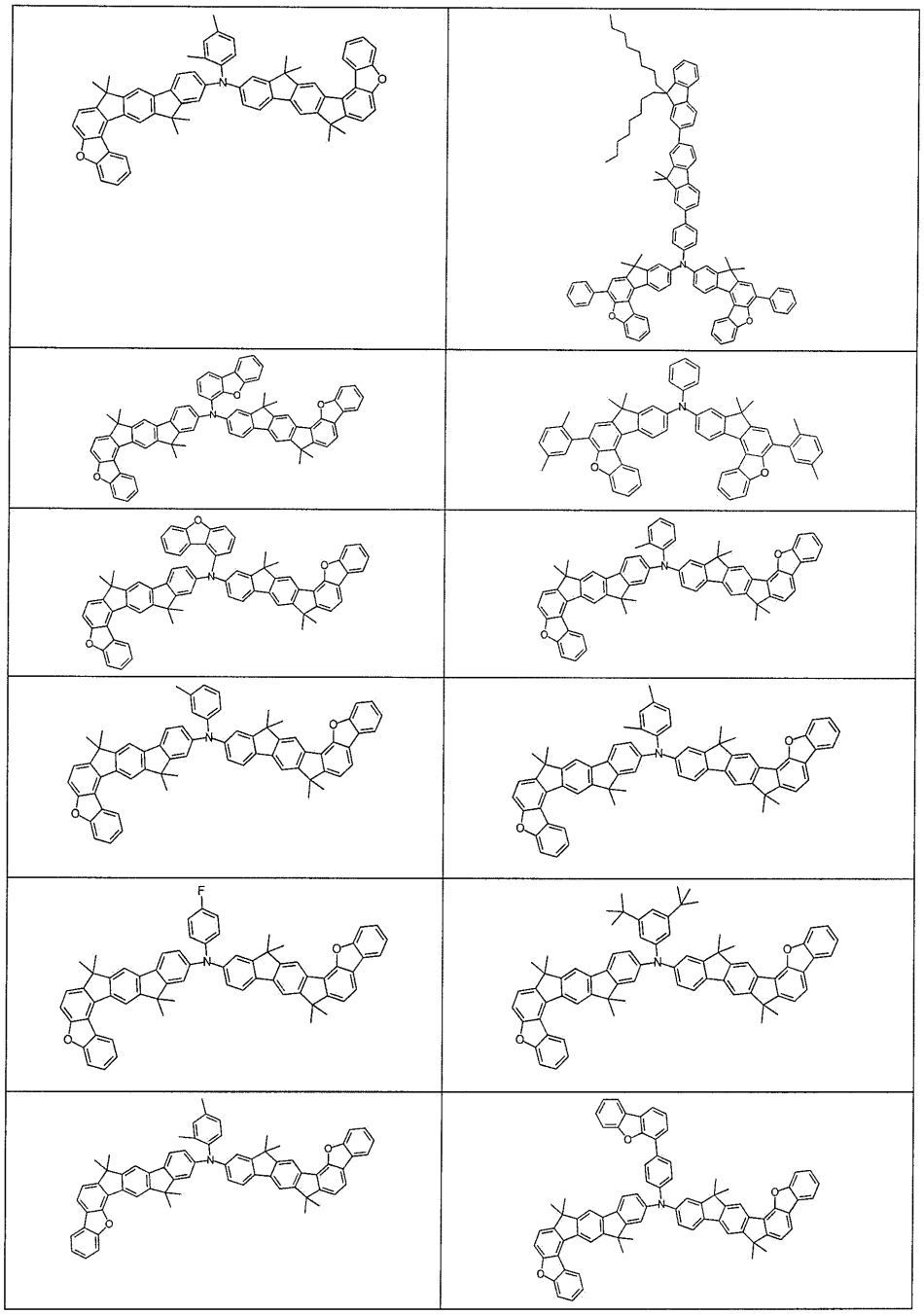
[0274]



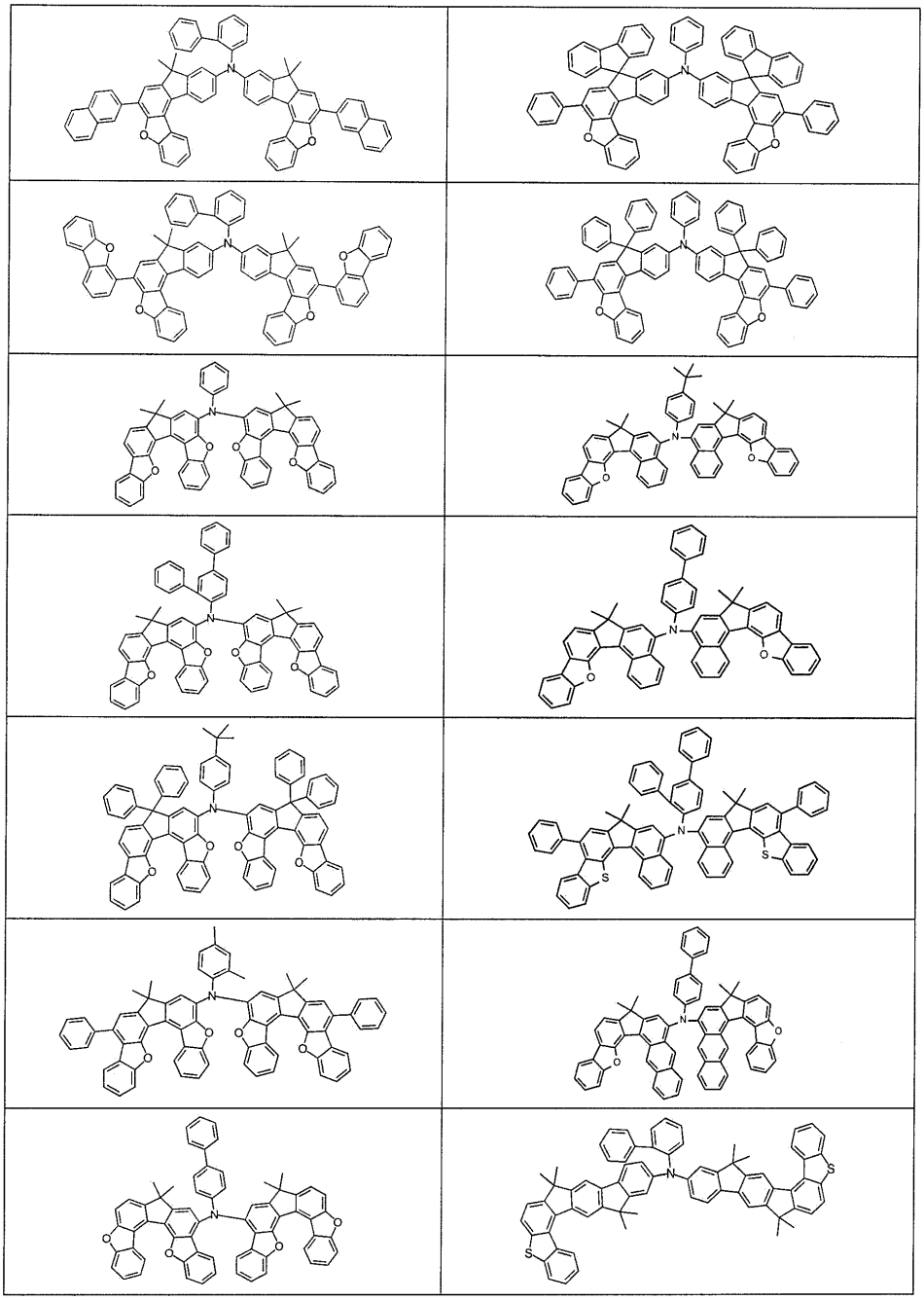
[0275]



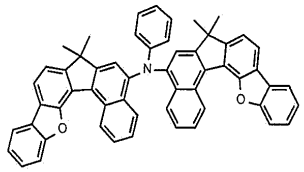
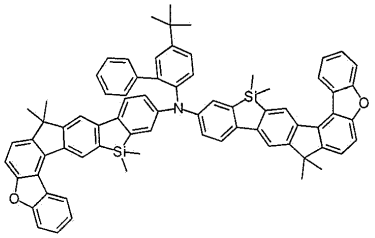
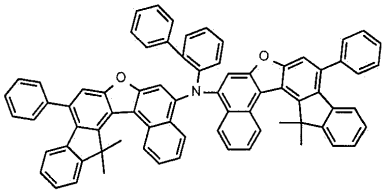
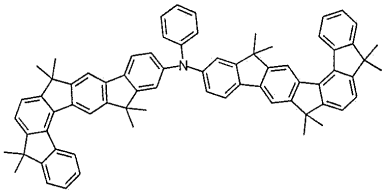
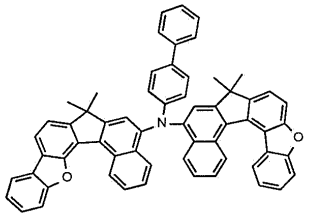
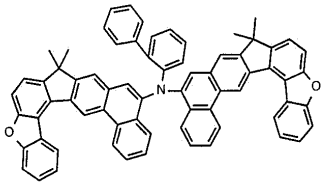
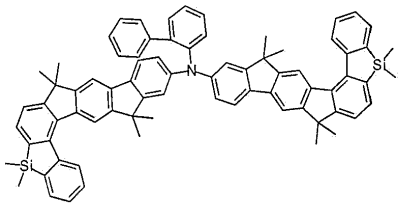
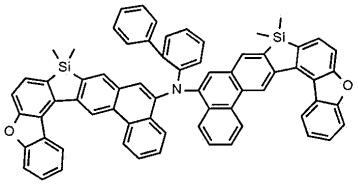
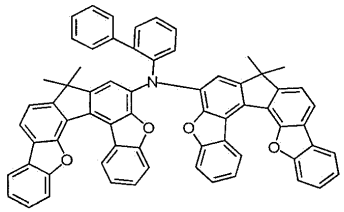
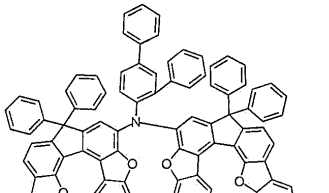
[0276]



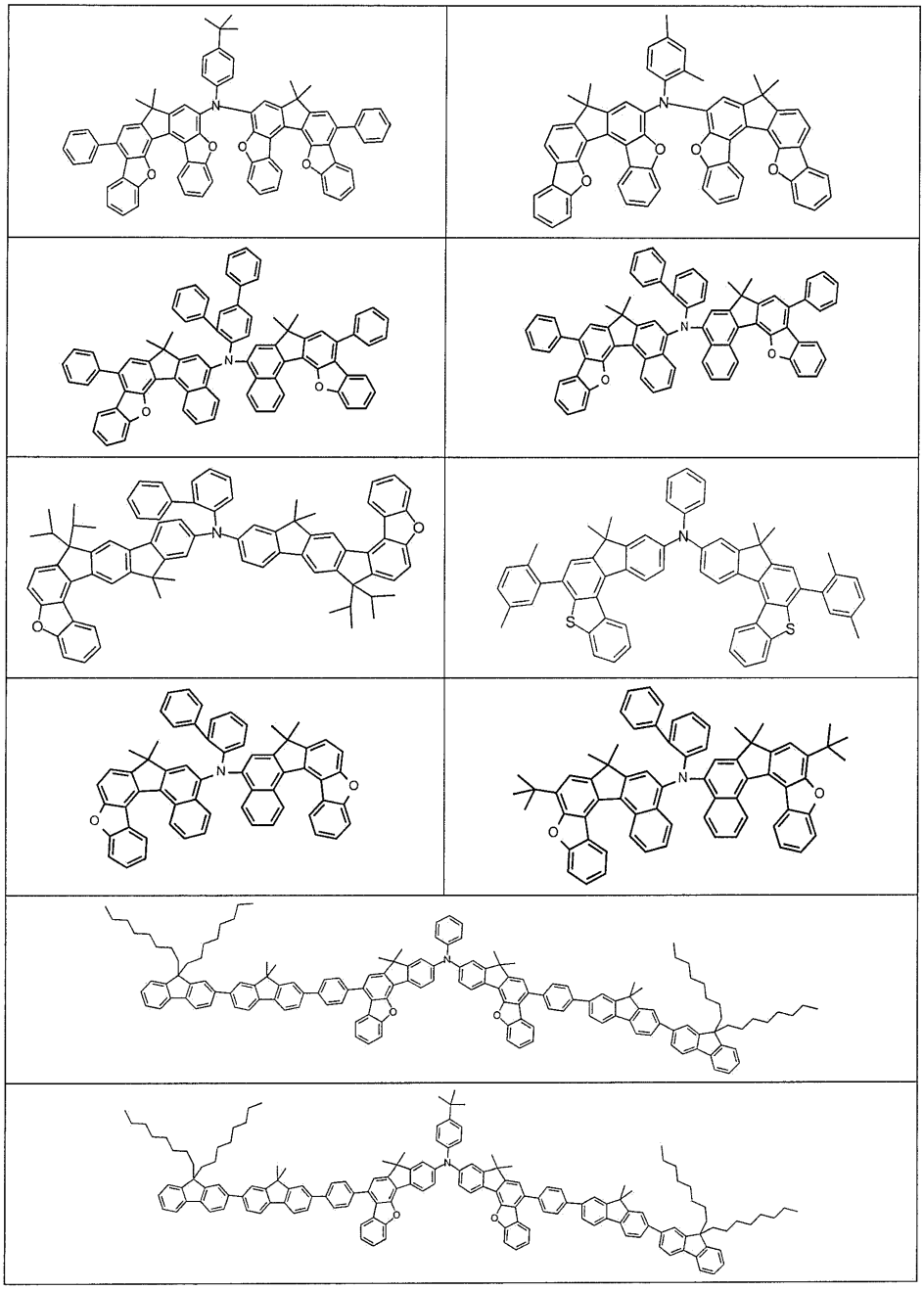
[0277]



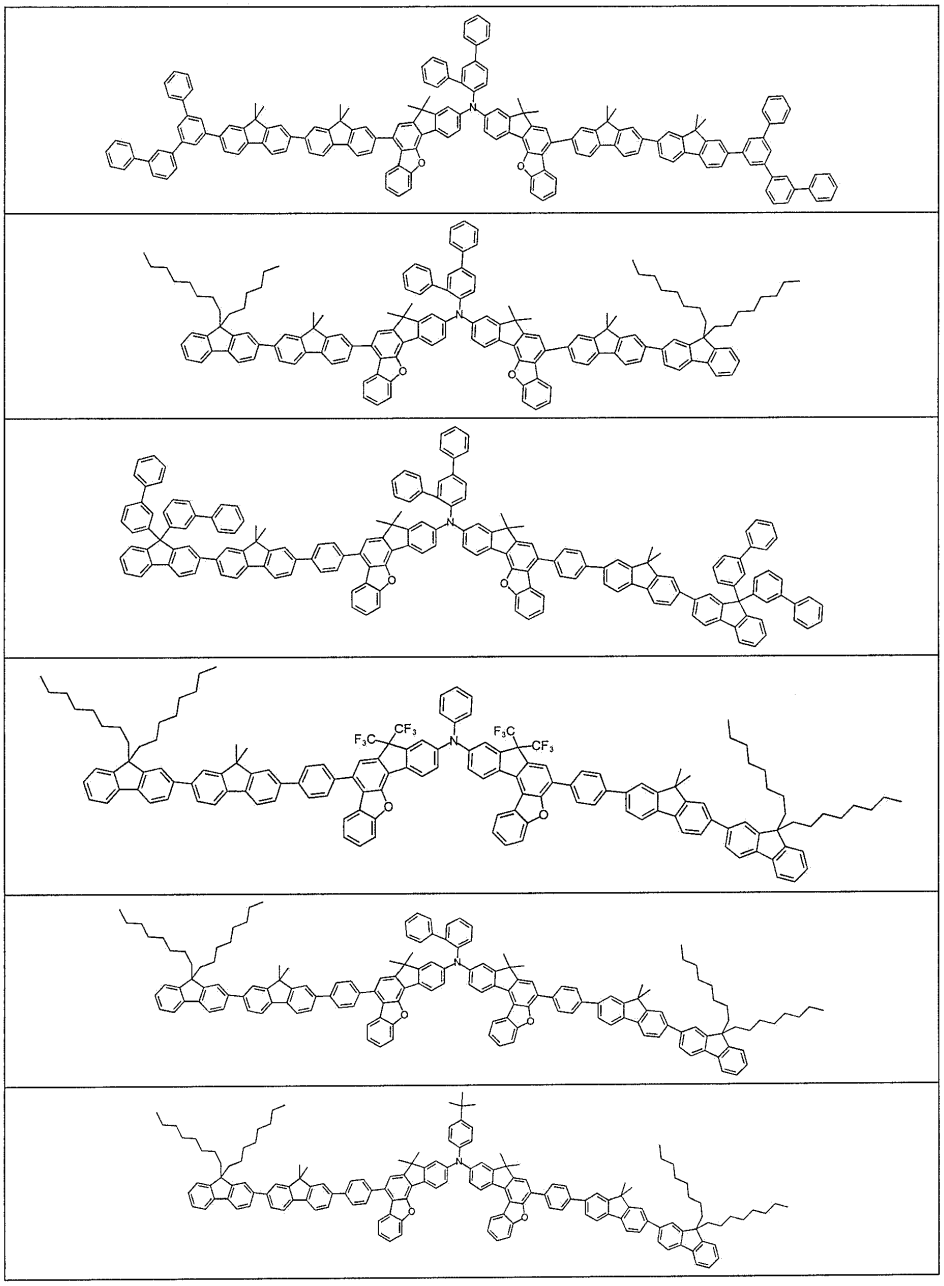
[0278]

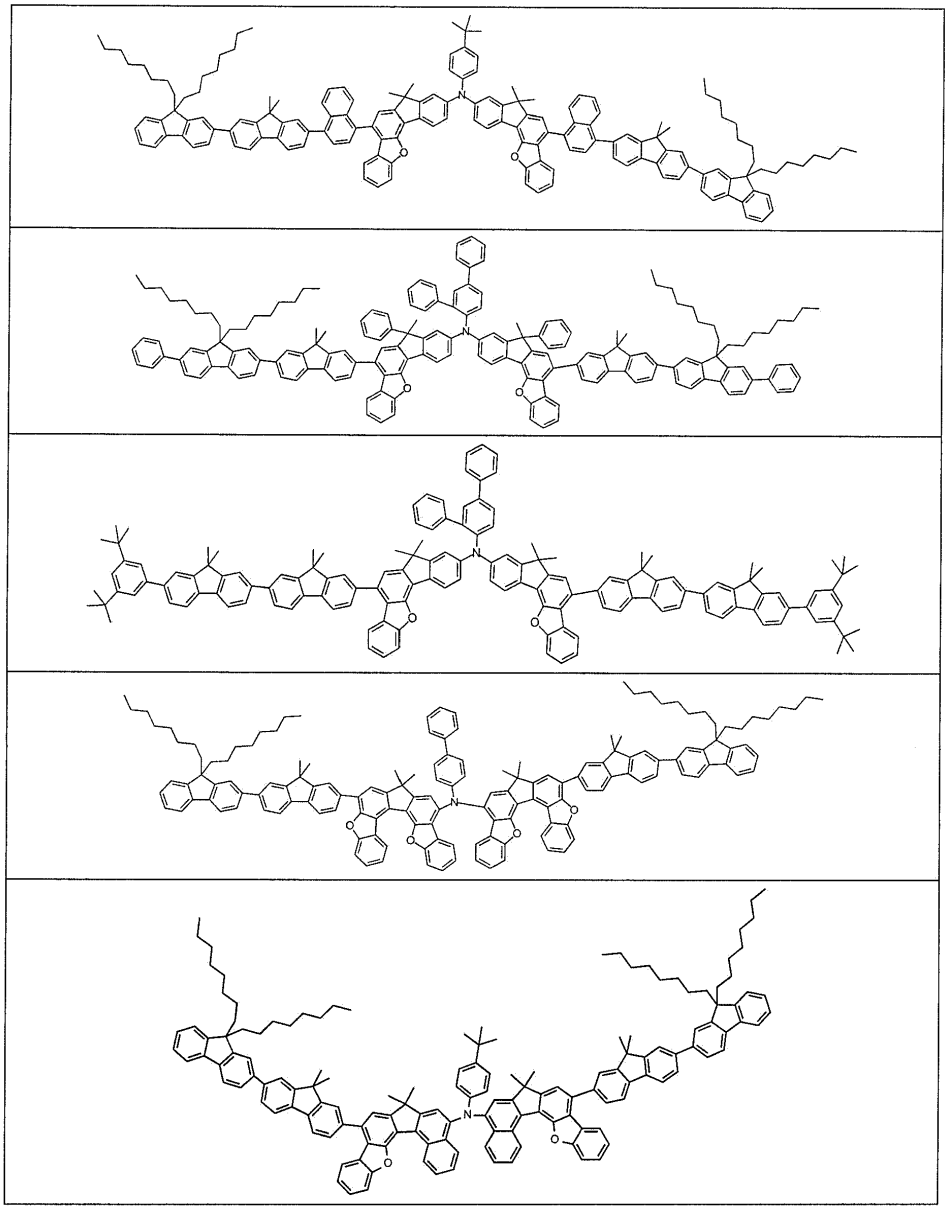
	
	
	
	
	

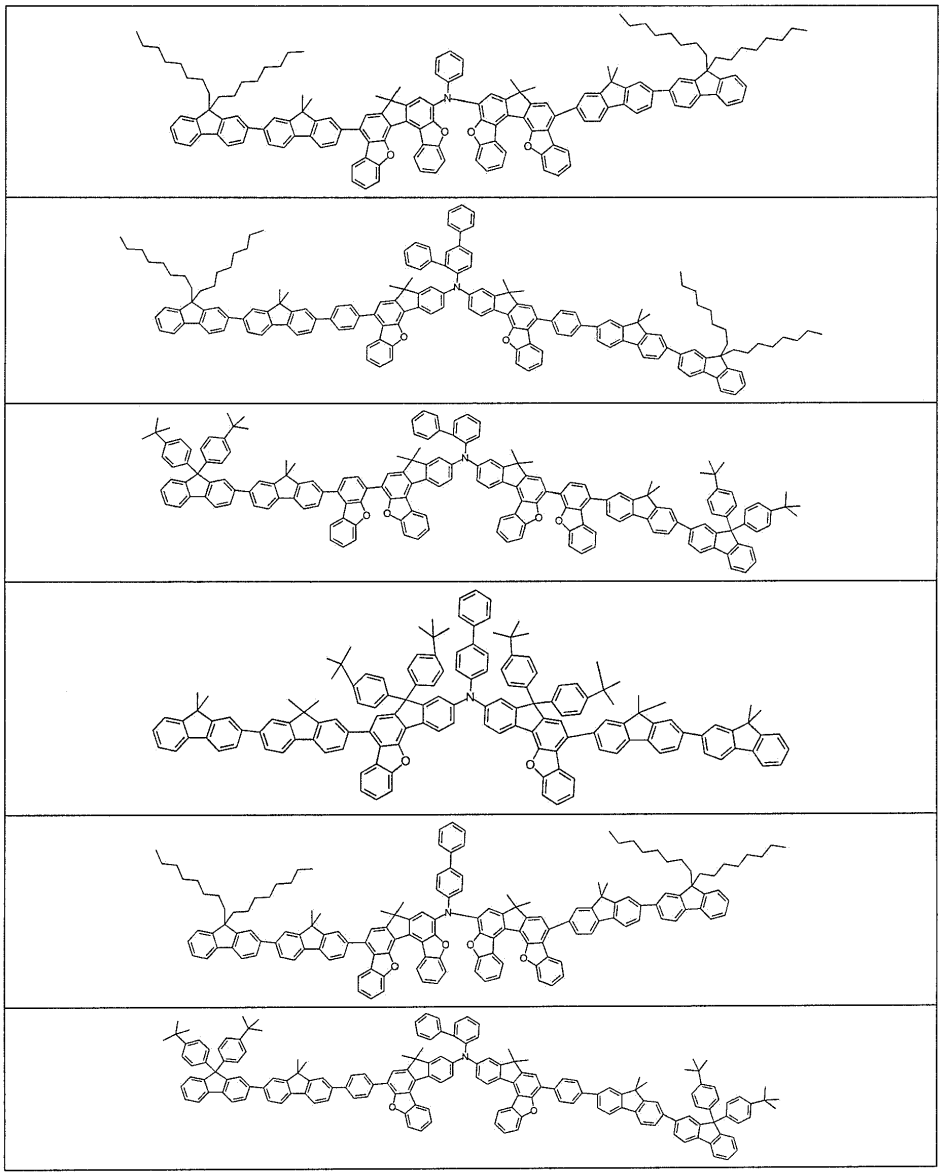
[0279]



[0280]

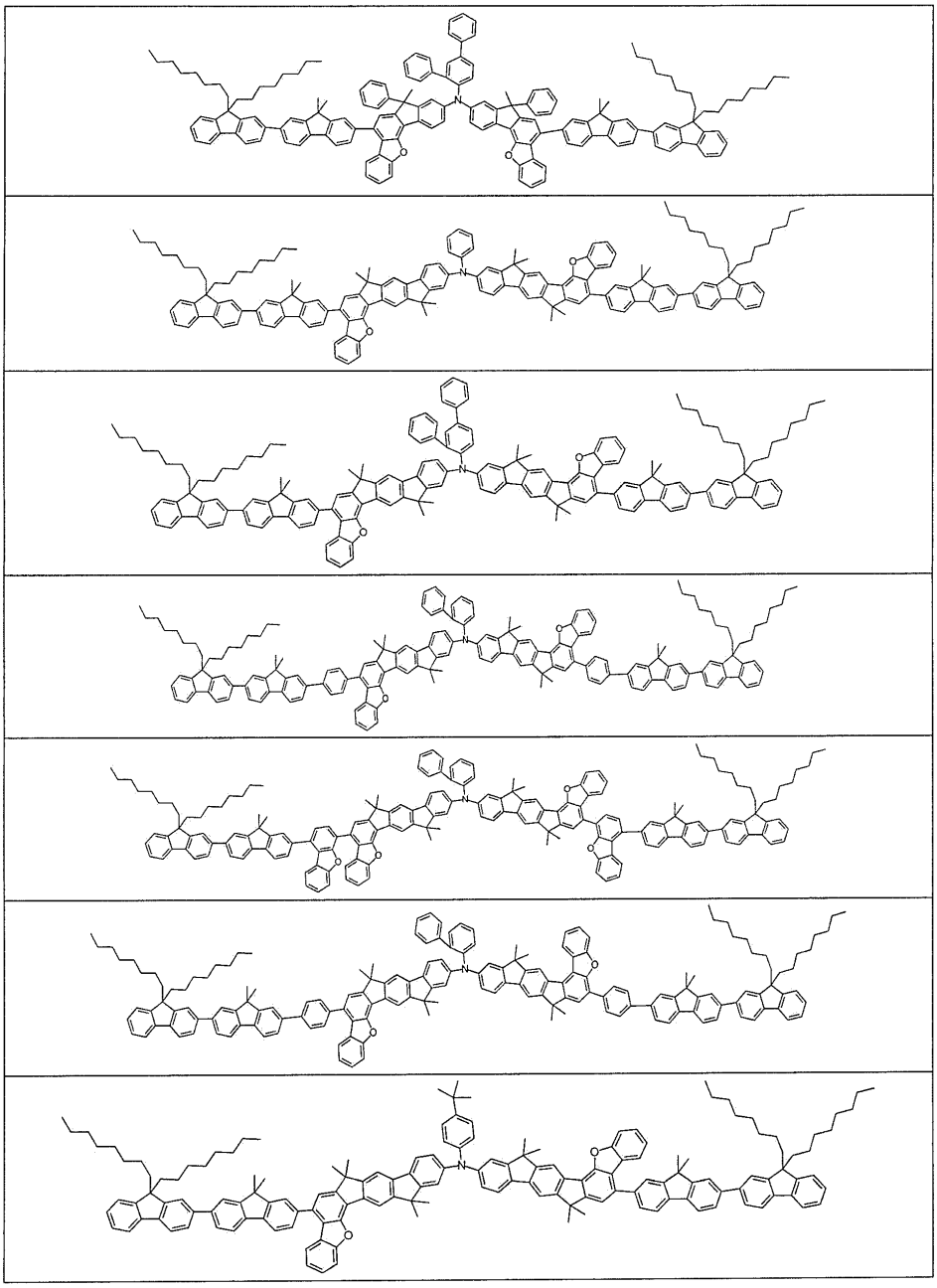


[0281] 

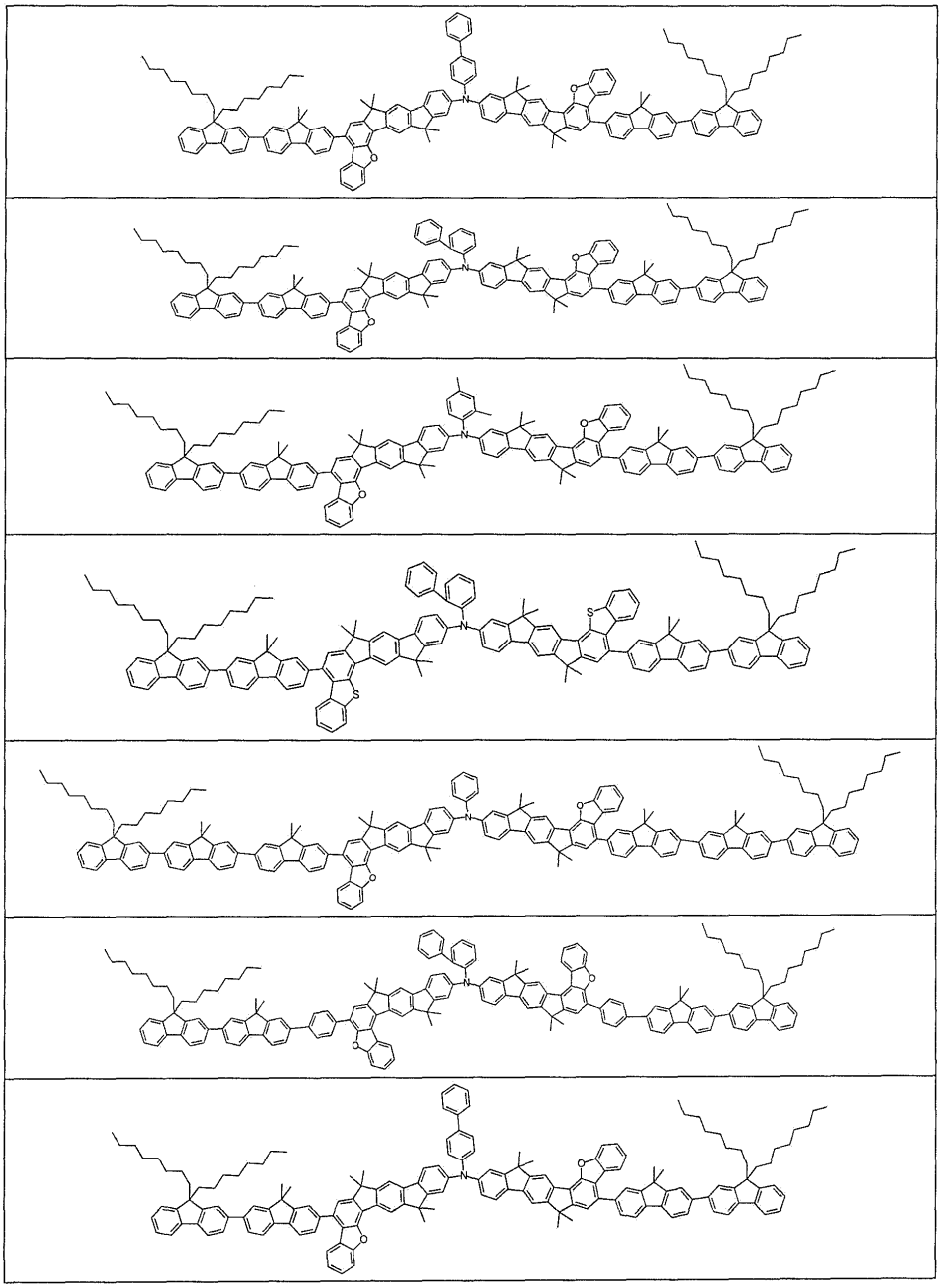


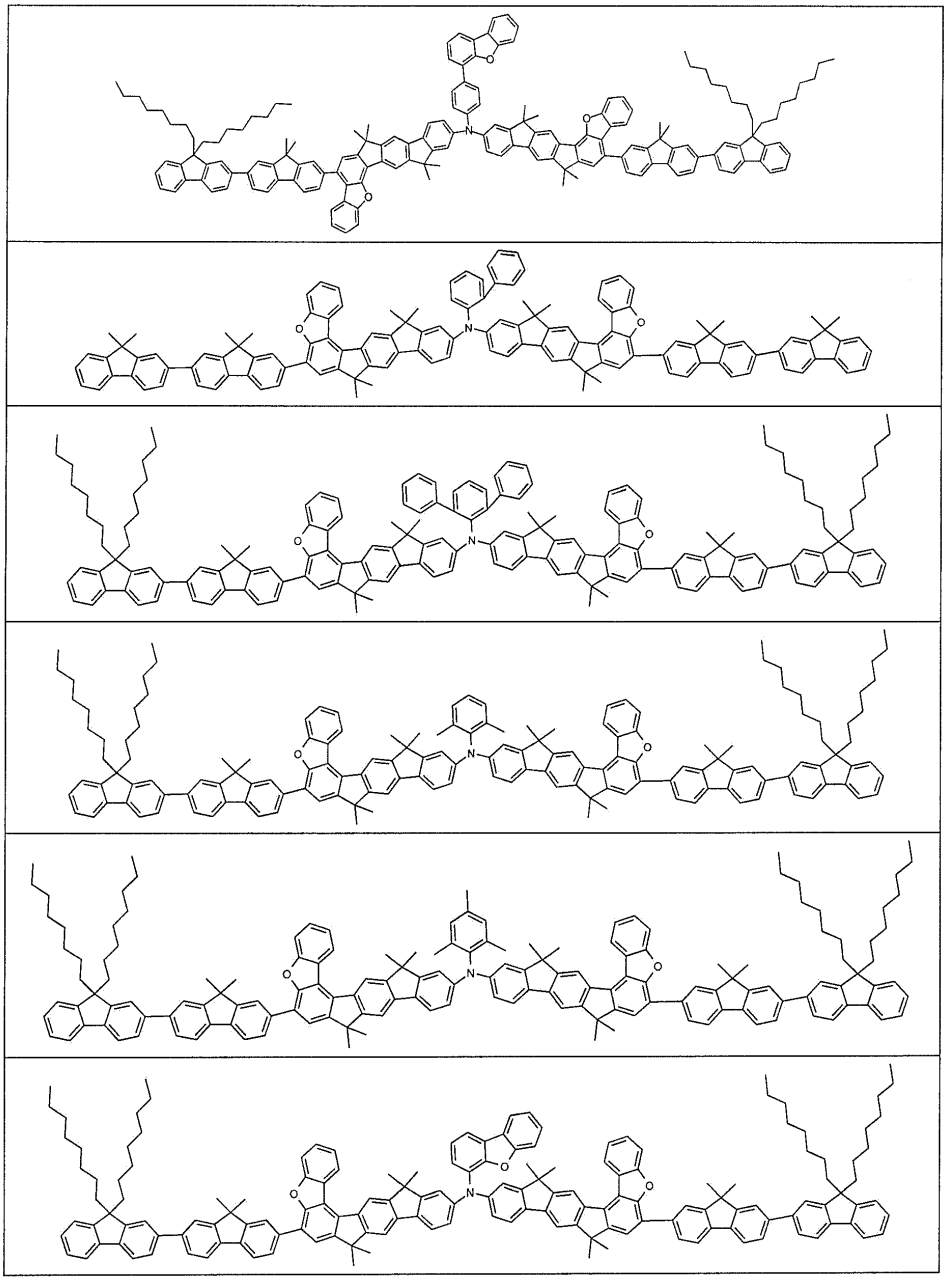
[0282]

[0283]

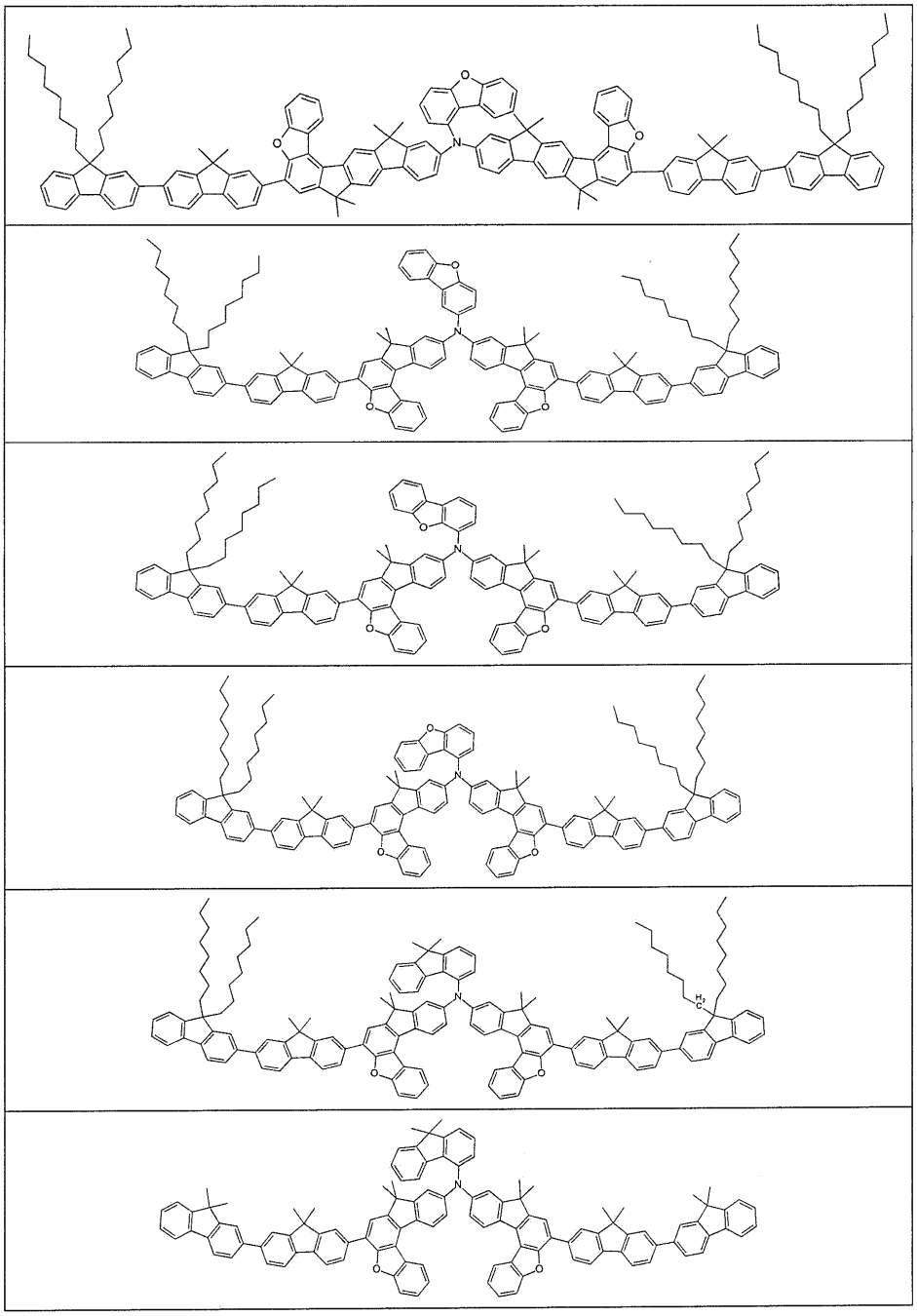


[0284]

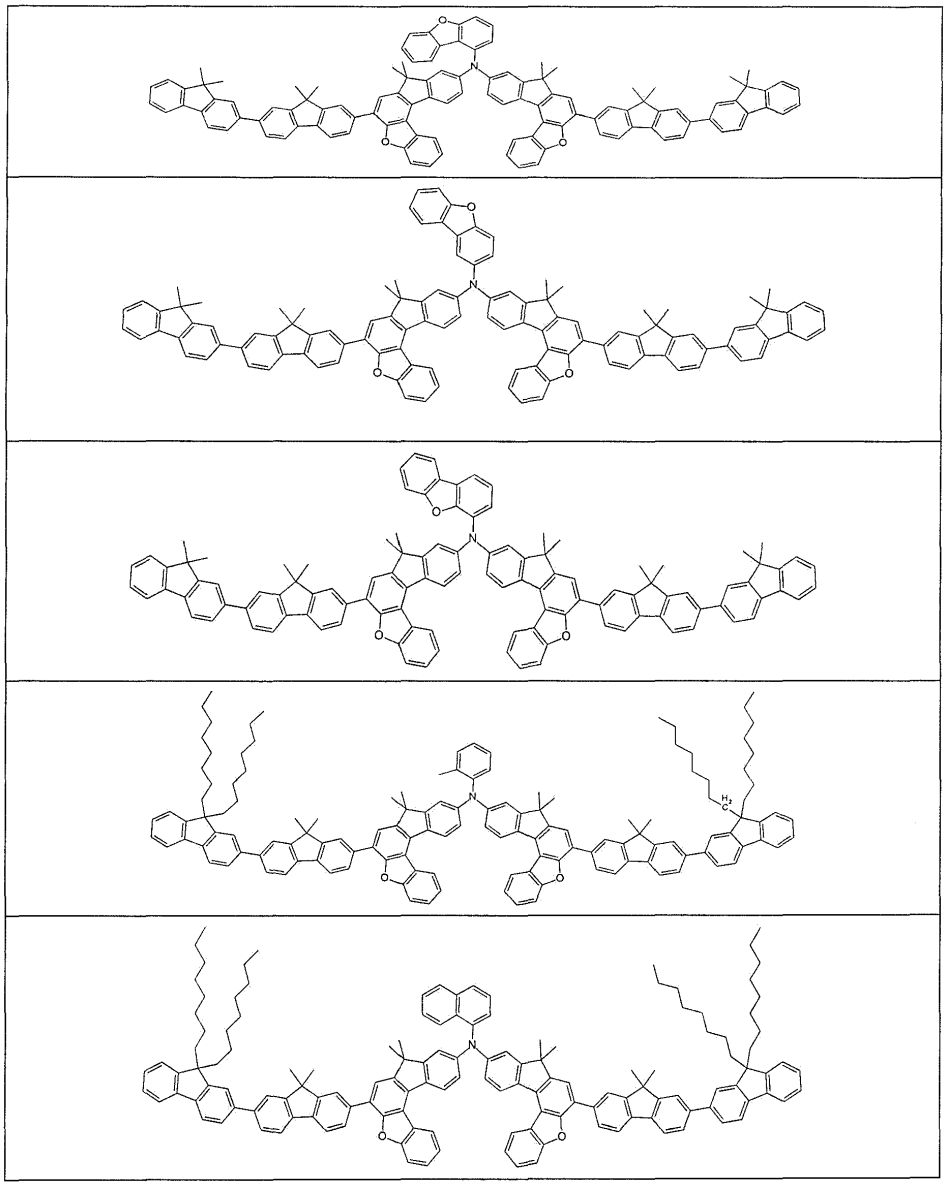


[0285] 

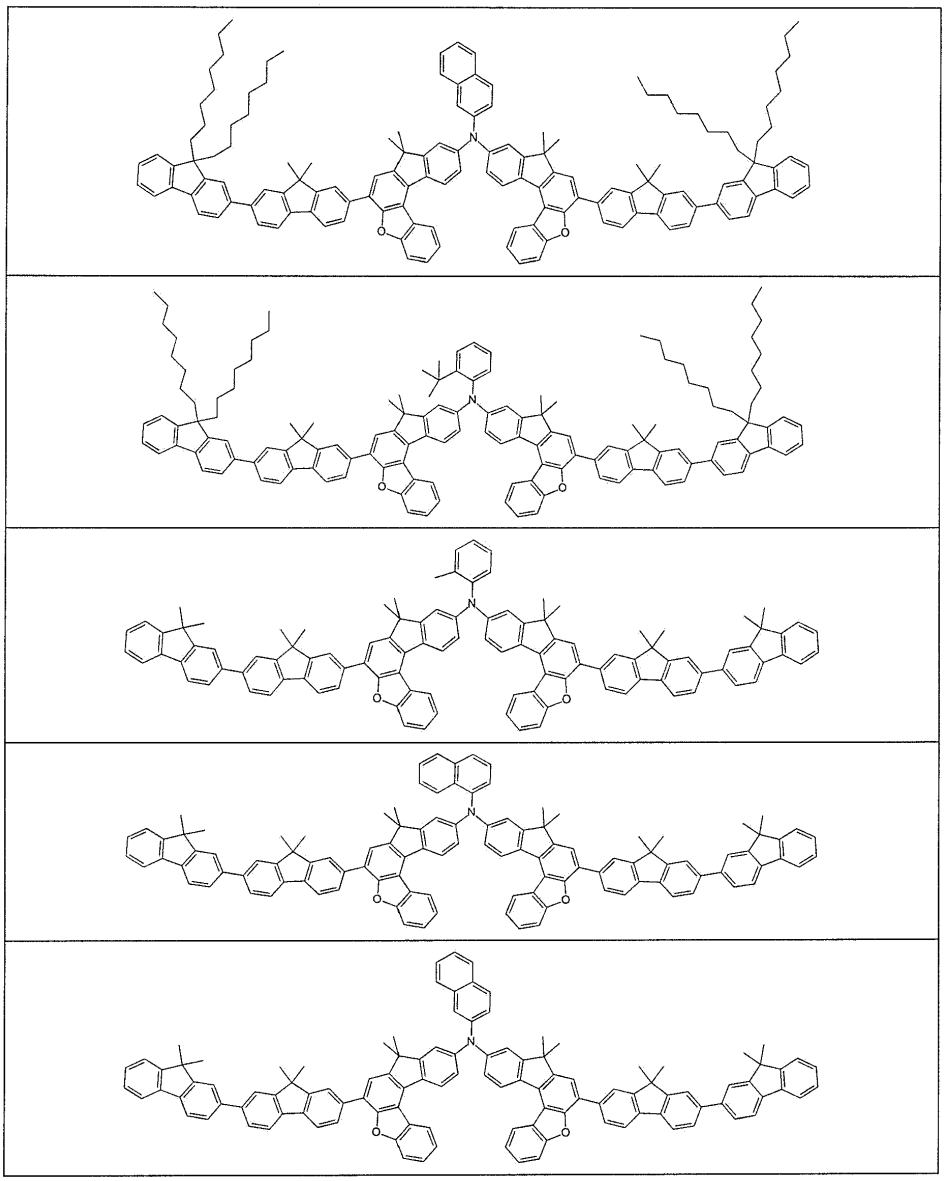
[0286]



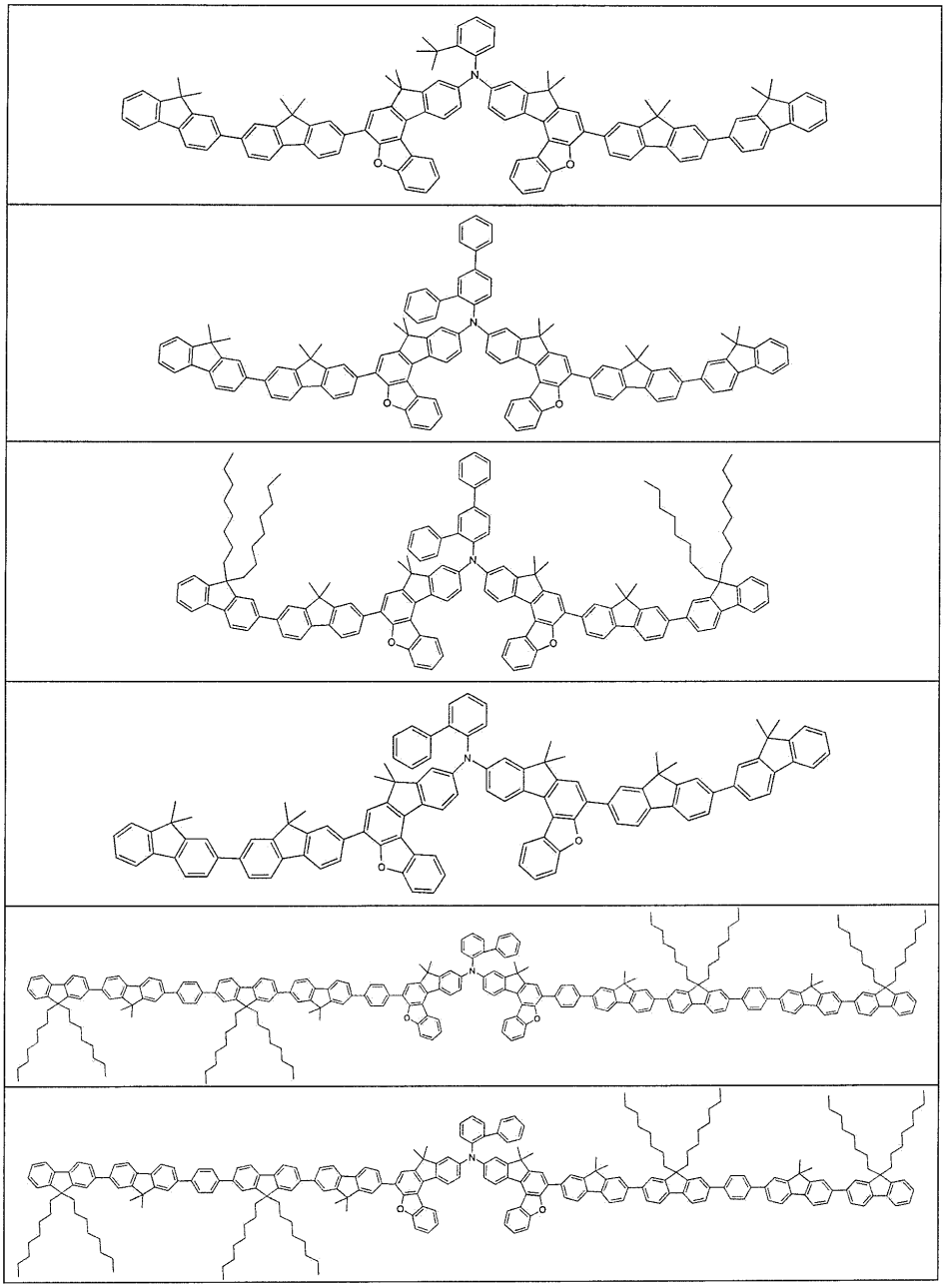
[0287]



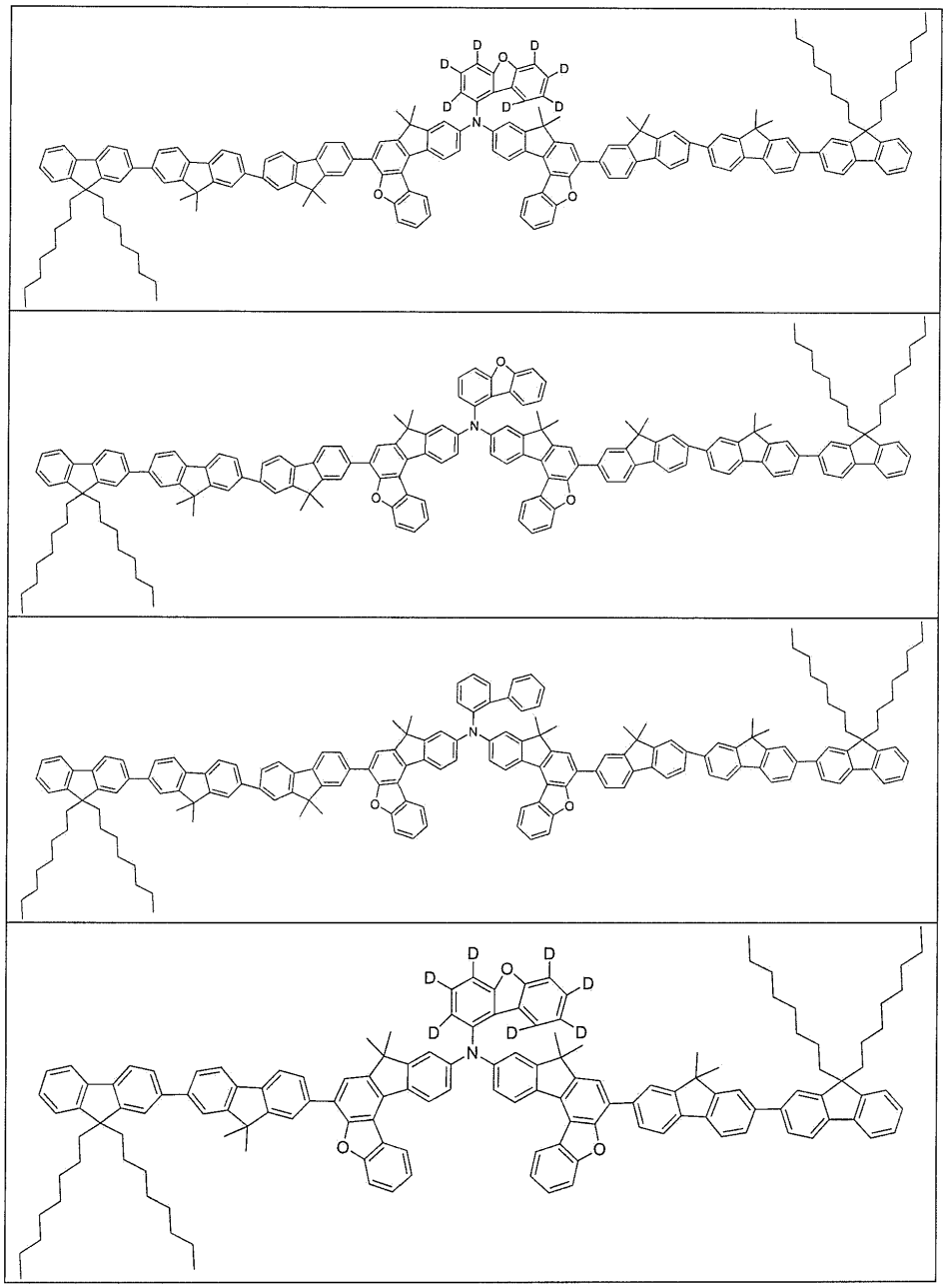
[0288]



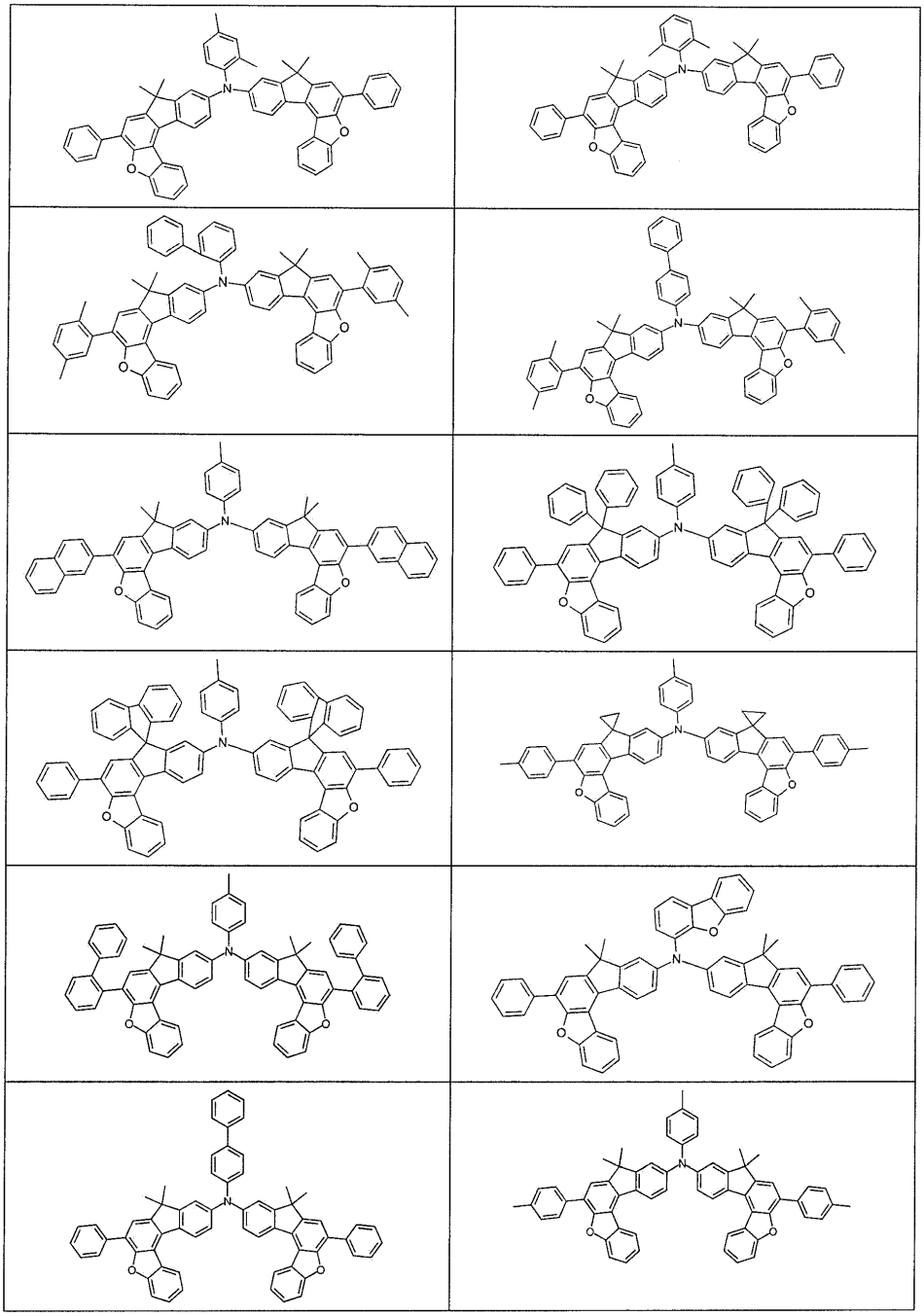
[0289]

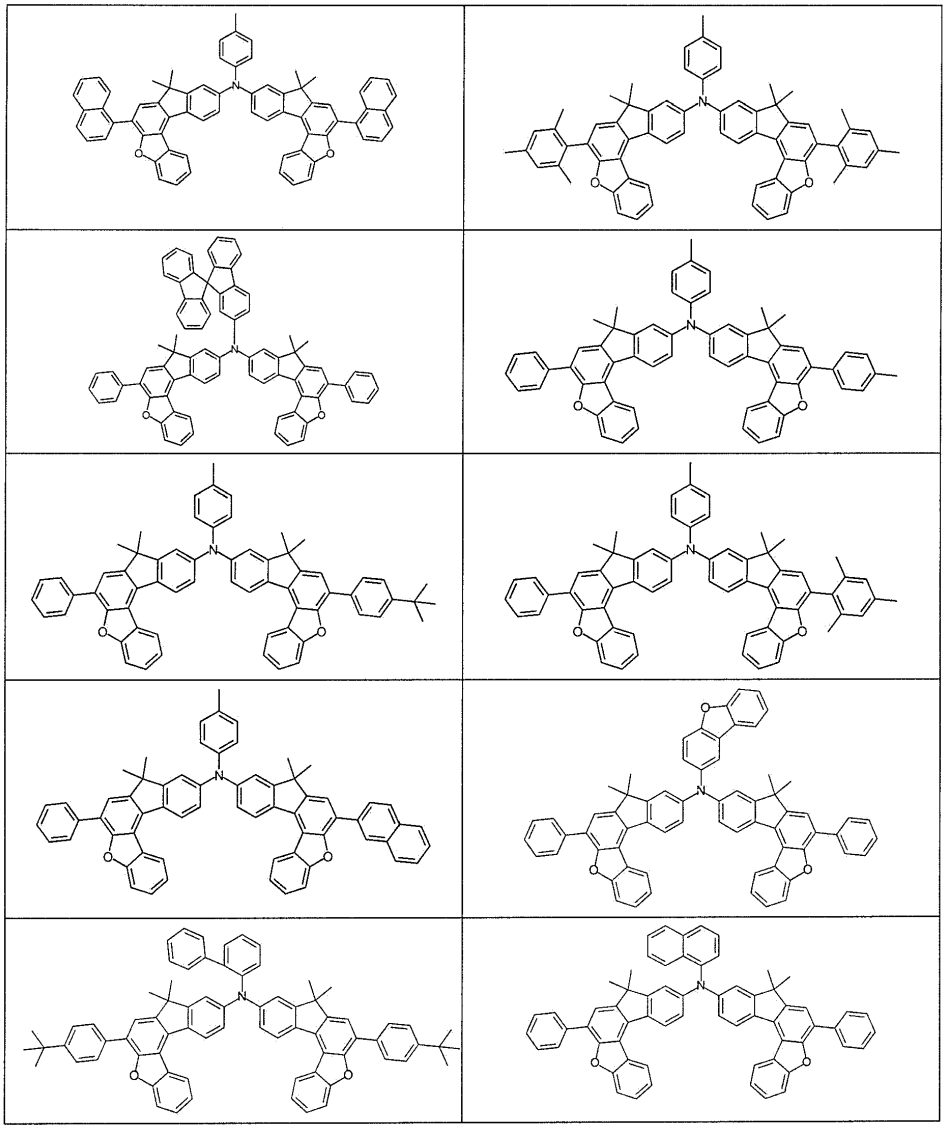


[0290]



[0291]





[0292]

[0293] 본 발명에 따르면, 식 (H1)의 화합물 및 식 (H2)의 화합물은 조성물에, 바람직하게는 균일한 혼합물에 함께 존재한다.

[0294] 바람직하게는, 식 (H1) 의 화합물은 본 발명에 따른 조성물에 1 내지 60%, 바람직하게는 5 내지 50%, 더욱 바람직하게는 10 내지 50%, 특히 바람직하게는 5 내지 40%, 더욱 특히 바람직하게는 10 내지 40%, 그리고 매우 보다 특히 바람직하게는 20 내지 40% 의 비율로 존재한다.

[0295] 바람직하게는, 식 (H2) 의 화합물은 조성물에 30 내지 99 %, 바람직하게는 50 내지 95 %, 더욱 바람직하게는 50 내지 90 %, 특히 바람직하게는 60 내지 95%, 더욱 특히 바람직하게는 60 내지 90 %, 그리고 매우 보다 특히 바람직하게는 60 내지 80 % 의 비율로 존재한다.

[0296] 바람직한 실시형태에 따르면, 본 발명에 따른 조성물은 적어도 하나의 형광 방출체를 더 포함한다. 이 경우, 형광 방출체는 0.1 내지 50.0%, 바람직하게는 0.5 내지 20.0%, 특히 바람직하게는 1.0 내지 10.0%의 비율로 조성물에 존재하는 것이 바람직하다.

[0297] % 단위 비율의 상세는, 본 출원의 목적을 위해, 화합물이 기상으로부터 적용될 경우에는 부피% 를 의미하고, 화합물이 용액으로부터 도포될 경우에는 중량% 를 의미하는 것으로 여겨진다.

[0298] 예를 들어 스핀 코팅과 같은 코팅 공정에 의해 또는 인쇄 공정에 의해, 액체 상으로부터 본 발명에 따른 화합물을 처리하기 위해, 본 발명에 따른 조성물의 포뮬레이션 (formulation) 이 필요하다. 이들 포뮬레이션은, 예를 들어, 용액, 분산액 또는 유화액일 수 있다. 이 목적을 위해, 둘 이상의 용매의 혼합물을 사용하는 것이 바람직할 수 있다. 용매는 바람직하게는 유기 및 무기 용매, 더 바람직하게는 유기 용매로부터 선택된다. 용매는 탄화수소, 알코올, 에스테르, 에테르, 케톤 및 아민으로부터 매우 바람직하게 선택된다.

적합하고 바람직한 용매는, 예를 들어 톨루엔, 아니솔, o-, m- 또는 p-크실렌, 메틸 벤조에이트, 메시틸렌, 테트랄린, 베라트롤, THF, 메틸-THF, THP, 클로로벤젠, 디옥산, 페녹시톨루엔, 특히 3-페녹시톨루엔, (-)-펜촌, 1,2,3,5-테트라메틸벤젠, 1,2,4,5-테트라메틸벤젠, 1-메틸나프타렌, 1-에틸나프탈렌, 데실벤젠, 페닐 나프탈렌, 멘틸 이소발레레이트, 파라 톨릴 이소부티레이트, 시클로헥살 헥사노에이트, 에틸 파라 톨루에이트, 에틸 오르토 톨루에이트, 에틸 메타 톨루에이트, 데카히드로나프탈렌, 에틸 2-메톡시벤조에이트, 디부틸아닐린, 디시클로헥실케톤, 이소소르비드 디메틸 에테르, 데카히드로나프탈렌, 2-메틸바이페닐, 에틸 옥타노에이트, 옥틸 옥타노에이트, 디에틸 세바케이트, 3,3-디메틸바이페닐, 1,4-디메틸나프탈렌, 2,2´-디메틸바이페닐, 2-메틸벤조티아졸, 2-페녹시에탄올, 2-피롤리디논, 3-메틸아니솔, 4-메틸아니솔, 3,4-디메틸아니솔, 3,5-디메틸아니솔, 아세토페논, α-테르피네올, 벤조티아졸, 부틸 벤조에이트, 쿠멘, 시클로헥사놀, 시클로헥사논, 시클로헥실벤젠, 데칼린, 도데실벤젠, 에틸 벤조에이트, 인단, NMP, p-시멘, 페네톨, 1,4-디이소프로필벤젠, 디벤질 에테르, 디에틸렌 글리콜 부틸 메틸 에테르, 트리에틸렌 글리콜 부틸 메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디부틸 에테르, 트리에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르, 트리프로필렌 글리콜 디메틸 에테르, 테트라에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 2-이소프로필나프탈렌, 펜틸벤젠, 헥실벤젠, 헵틸벤젠, 옥틸벤젠, 1,1-비스(3,4-디메틸페닐)에탄 또는 이들 용매의 혼합물이다.

[0299] 따라서, 본 발명은 또한, 본 발명에 따른 식 (H1) 의 화합물 및 식 (H2) 의 화합물 및 적어도 하나의 용매를 포함하는 포뮬레이션에 관한 것이다. 용매는 위에 언급된 용매 또는 이들 용매의 혼합물 중 하나일 수도 있다.

[0300] 본 발명에 따른 포뮬레이션에서 유기 용매의 비율은 포뮬레이션의 총 중량을 기준으로 바람직하게는 적어도 60 중량%, 바람직하게는 적어도 70 중량%, 그리고 더 바람직하게는 적어도 80 중량% 이다.

[0301] 본 발명에 따른 포뮬레이션은 바람직한 전자적 또는 광전자적 컴포넌트, 예컨대 OLED 의 제조에 요구되는 바와 같이, 유기 기능성 재료가 층에 존재하는, 층 또는 다층 구조의 제조에 이용될 수 있다.

[0302] 본 발명의 포뮬레이션은 바람직하게는 본 발명에 따른 조성물을 포함하는 기능성 층을 기판 상에 또는 기판에 적용된 층들 중 하나 상에 형성하는 데 사용될 수 있다.

[0303] 본 발명의 또 다른 목적은 전자 디바이스의 제조 방법이며, 여기서 적어도 하나의 층이 본 발명의 포뮬레이션의 도포로부터 수득된다. 바람직하게는, 본 발명에 따른 포뮬레이션은 기판에 또는 다른 층에 도포되고 다음으로 건조된다.

[0304] 본 발명에 따른 포뮬레이션으로부터 수득된 기능성 층은 기판 또는 기판에 적용된 층 중 하나 상에, 예를 들어, 플러드(flood) 코팅, 딥 코팅, 스프레이 코팅, 스핀 코팅, 스크린 인쇄, 릴리프 인쇄, 그라비어 인쇄, 로타리 인쇄, 롤러 코팅, 플렉소그래픽 인쇄, 오프셋 인쇄 또는 노즐 인쇄, 바람직하게는 잉크-젯 인쇄에 의해 생성될 수 있다.

[0305] 본 발명에 따른 포뮬레이션을 이미 적용된 기판 또는 기능성 층에 도포한 후, 용매를 제거하기 위해 건조 단계를 수행할 수 있다. 바람직하게 건조는, 버블 형성을 방지하고, 균일한 코팅을 수득하기 위하여, 바람직하게는 비교적 저온에서 그리고 비교적 장기간에 걸쳐 수행될 수 있다. 건조는 바람직하게는 80 내지 300℃, 특히 바람직하게는 150 내지 250℃ 그리고 특히 바람직하게는 180 내지 200℃ 범위의 온도에서 수행될 수 있다.

여기서 건조는 바람직하게는 10^{-6} mbar 내지 2 bar 의 범위, 특히 바람직하게는 10^{-2} mbar 내지 1 bar 의 범위, 그리고 특히 바람직하게는 10^{-1} mbar 내지 100 mbar 의 범위의 압력에서 실시될 수 있다. 건조의 지속 시간은 달성하고자 하는 건조 정도에 따라 달라지며, 여기서 소량의 물이 선택적으로, 비교적 고온에서, 그리고 바람직하게는 수행되는 소결 (sintering) 과 조합하여 제거될 수 있다.

[0306] 따라서, 본 발명은 본 발명에 따른 조성물을 포함하는 적어도 하나의 층을 포함하는 전자 디바이스의 제조 방법에 관한 것으로, 상기 방법은 하기 단계를 포함한다:

[0307] a) 본 발명에 따른 포뮬레이션의 제조;

[0308] b) 본 발명에 따른 조성물을 포함하는 층을 형성하기 위해 기판 상에 또는 다른 층 상에 단계 a)에서 제조된 포뮬레이션의 도포;

[0309] c) 용매를 제거하기 위한 층의 건조.

[0310] 바람직하게는, 단계 b) 에서, 포뮬레이션은 액상으로부터의 처리에 의해, 보다 바람직하게는 코팅 방법 또는 인

쇄 방법을 통해, 매우 더 바람직하게는 인쇄 방법, 특히 바람직하게는 잉크젯 인쇄 방법에 의해 도포된다.

[0311] 본 발명의 다른 목적은 애노드, 캐소드 및 그 사이에 적어도 하나의 기능성 층을 포함하는 디바이스이며, 여기서 이 기능성 층은 본 발명에 따른 조성물을 포함한다. 바람직하게는, 본 발명에 따른 조성물을 포함하는 적어도 하나의 기능층은 방출층이다.

[0312] 전자 디바이스는 바람직하게, 유기 전계발광 디바이스 (OLED), 유기 집적 회로, 유기 전계-효과 트랜지스터, 유기 박막 트랜지스터, 유기 발광 트랜지스터, 유기 태양 전지, 염료-감응형 유기 태양 전지, 유기 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 필드-켄치 디바이스, 발광 전기화학 전지, 유기 레이저 다이오드 및 유기 플라스몬 방출 디바이스로부터 선택된다. 더욱 바람직하게, 전자 디바이스는 유기 전계 발광 디바이스 (OLED) 이다.

[0313] 유기 전계 발광 디바이스는 캐소드, 애노드 및, 본 발명에 따른 조성물을 포함하는, 적어도 하나의 방출 층을 포함한다. 이들 층 외에도, 이는 또한 추가의 층, 예를 들어 각 경우에 하나 이상의 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 차단층, 전자 수송층, 전자 주입층, 여기자 차단층, 전자 차단층 및/또는 전하 생성층을 포함할 수 있다. 예를 들어 여기자 차단 기능을 갖는, 중간층이, 2 개의 방출층 사이에 도입되는 것이 마찬가지로 가능하다. 그러나, 이들 층 각각이 반드시 존재할 필요는 없다는 것이 지적되어야만 한다. 여기서 유기 전계 발광 디바이스는 하나의 방출 층 또는 복수의 방출 층을 포함할 수 있다. 복수의 방출 층이 존재하는 경우, 이들은 바람직하게는 전체로서 380 nm 내지 750 nm 의 복수의 방출 최대를 가져서, 전체적으로 백색 방출을 초래하며, 즉 형광 또는 인광을 낼 수 있는 다양한 방출 화합물이 방출층에서 사용된다. 3 개의 방출층을 갖는 시스템이 특히 바람직하며, 여기서 3 개의 층은 청색, 녹색 및 오렌지색 또는 적색 방출을 나타낸다 (기본 구조에 대해서는, 예를 들어 WO 2005/011013 참조). 이들은 형광 또는 인광 방출층이거나 또는 형광 및 인광 방출 층이 서로 조합된 혼성 시스템일 수 있다.

[0314] 관련된 전자 디바이스는 본 발명에 따른 조성물을 포함하는 단일 방출층을 포함할 수도 있거나 또는 둘 이상의 방출 층을 포함할 수도 있다.

[0315] 본 발명에 따른 조성물은 하나 이상의 추가의 매트릭스 재료를 포함할 수도 있다.

[0316] 바람직한 추가의 매트릭스 재료는 올리고아릴렌 (예를 들어, EP 676461 에 따른 2,2‘,7,7‘-테트라페닐스피로바이플루오렌, 또는 디나프틸안트라센), 특히 축합 방향족 기를 함유하는 올리고아릴렌, 올리고아릴렌비닐렌 (예를 들어, EP 676461 에 따른 DPVBi 또는 스피로-DPVBi), 폴리포달 (polypodal) 금속 착물 (예를 들어, WO 2004/081017 에 따름), 정공 전도 화합물 (예를 들어, WO 2004/058911 에 따름), 전자 전도 화합물, 특히 케톤, 포스핀 옥사이드, 술폭사이드 등 (예를 들어, WO 2005/084081 및 WO 2005/084082 에 따름), 회전장애 이성질체 (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) 의 부류에서 선택된다. 특히 바람직한 매트릭스 재료는 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센 및/또는 피렌 또는 이들 화합물의 아트로프이성질체를 포함하는 올리고아릴렌, 올리고아릴렌비닐렌, 케톤, 포스핀 옥사이드 및 술폭사이드의 부류로부터 선택된다. 매우 특히 바람직한 매트릭스 재료는 안트라센, 벤즈안트라센, 벤조페난트렌 및/또는 피렌 또는 이들 화합물의 아트로프이성질체를 포함하는 올리고아릴렌의 부류로부터 선택된다. 본 발명의 의미에서 올리고아릴렌은 적어도 3 개의 아릴 또는 아릴렌 기가 서로 결합되어 있는 화합물을 의미하는 것으로 여겨진다.

[0317] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 디바이스에서의 대응하는 기능성 재료로서 사용하기 위한 재료의 일반적으로 바람직한 부류는 이하에서 나타내어 진다.

[0318] 본 발명에 따른 전자 디바이스의 정공 주입 또는 정공 수송 층 또는 전자 차단층에서 또는 전자 수송층에서 이용될 수 있는 바와 같은 적합한 전하 수송 재료는, 예를 들어 Y. Shirota 등의, Chem. Rev. 2007, 107(4), 953- 1010 에 개시되어 있는 화합물, 또는 종래 기술에 따라 이들 층에서 사용되는 다른 재료이다.

[0319] 전자 수송 층에 사용될 수 있는 재료들은, 전자 수송 층에서 전자 수송 재료로서 종래 기술에 따라 사용되는 모든 재료이다. 특히, 알루미늄 착물, 예를 들어 Alq_3, 지르코늄 착물, 예를 들어 Zrq_4, 리튬 착물, 예를 들어 LiQ, 벤즈이미다졸 유도체, 트리아진 유도체, 피리미딘 유도체, 피리딘 유도체, 피라진 유도체, 퀴녹살린 유도체, 퀴놀린 유도체, 옥사디아졸 유도체, 방향족 케톤, 락탐, 보란, 디아자포스폴 유도체 및 포스핀 옥사이드 유도체가 적합하다. 또한, 적합한 재료는, JP 2000/053957, WO 2003/060956, WO 2004/028217, WO 2004/080975 및 WO 2010/072300 에 개시되어 있는 바처럼, 위에 언급한 화합물의 유도체이다.

[0320] 본 발명에 따른 전계 발광 디바이스에서의 정공 수송, 정공 주입 또는 전자 차단층에서 사용될 수 있는 바람직

한 정공 수송 재료는 인데노플루오렌아민 유도체 (예를 들어, WO 06/122630 또는 WO 06/100896 에 따름), EP 1661888 에 개시되어 있는 아민 유도체, 헥사아자트리페닐렌 유도체 (예를 들어, WO 01/049806 에 따름), 축합 방향족 고리를 함유하는 아민 유도체 (예를 들어, US 5,061,569 에 따름), WO 95/09147 에 개시되어 있는 아민 유도체, 모노벤조인데노플루오렌아민 (예를 들어, WO 08/006449 에 따름), 디벤조인데노플루오렌아민 (예를 들어, WO 07/140847 에 따름), 스피로바이플루오렌아민 (예를 들어, WO 2012/034627 또는 WO 2013/120577 에 따름), 플루오렌아민 (예를 들어, 출원 EP 2875092, EP 2875699 및 EP 2875004 에 따름), 스피로디벤조피란아민 (예를 들어, WO 2013/083216 에 따름) 및 디히드로아크리딘 유도체 (예를 들어, WO 2012/150001 에 따름) 이다. 본 발명에 따른 화합물은 또한 정공 수송 재료로 사용될 수 있다.

[0321] 유기 전계 발광 디바이스의 캐소드는 바람직하게는 낮은 일 함수를 갖는 금속, 예를 들어, 알칼리 토금속, 알칼리 금속, 주족 금속, 또는 란타노이드 (예를 들어, Ca, Ba, Mg, Al, In, Mg, Yb, Sm 등) 과 같은 다양한 금속을 포함하는 금속 합금 또는 다층 구조를 포함한다. 또한, 알칼리 금속 또는 알칼리 토금속 및 은을 포함하는 합금, 예를 들어 마그네슘 및 은을 포함하는 합금이 적합하다. 다층 구조의 경우, 상대적으로 높은 일 함수를 갖는 추가의 금속, 예컨대, 예를 들어, Ag 또는 Al 이 또한 상기 금속이외에 사용될 수 있고, 이 경우 예를 들어, Ca/Ag, Mg/Ag 또는 Ag/Ag 와 같은 금속의 조합이 일반적으로 사용된다. 또한 금속 캐소드와 유기 반도체 사이에 높은 유전 상수를 갖는 재료의 얇은 중간층을 도입하는 것이 바람직할 수도 있다. 이 목적으로, 예를 들어, 알칼리 금속 플루오라이드 또는 알칼리 토금속 플루오라이드 뿐만 아니라, 대응하는 산화물 또는 탄산염 (예를 들어 LiF, Li_2O, BaF_2, MgO, NaF, CsF, Cs_2CO_3 등) 도 적합하다. 또한, 리튬 퀴놀리네이트 (LiQ) 가 이러한 목적으로 사용될 수 있다. 이러한 층의 층 두께는 바람직하게는 0.5 내지 5 nm 이다.

[0322] 애노드는 바람직하게는 높은 일 함수를 갖는 재료를 포함한다. 애노드는 바람직하게는 진공 대비 4.5 eV 초과의 일함수를 갖는다. 한편, 이 목적으로, 예를 들면 Ag, Pt 또는 Au 와 같은 높은 산화환원 전위 (redox potential) 를 갖는 금속이 적합하다. 다른 한편, 금속/금속 산화물 전극 (예를 들어 Al/Ni/NiO_x, Al/PtO_x) 가 또한 바람직할 수 있다. 일부 응용의 경우, 유기 재료 (유기 태양 전지) 의 조사 또는 광의 커플링-아웃 (coupling-out) (OLED, O-레이저) 을 용이하게 하기 위해, 전극 중 적어도 하나는 투명하거나 또는 부분적으로 투명해야 한다. 여기서 바람직한 애노드 재료는 전도성 혼합 금속 산화물이다. 인듐 주석 산화물 (ITO) 또는 인듐 아연 산화물 (IZO) 이 특히 바람직하다. 전도성 도핑된 유기 재료, 특히 전도성 도핑된 중합체가 또한 바람직하다.

[0323] 디바이스는 적절하게 (응용에 따라) 구조화되고, 접점들이 제공되고, 마지막으로 밀봉되는데, 이는 본 발명에 따른 디바이스의 수명이 물 및/또는 공기의 존재 하에 단축되기 때문이다.

[0324] 바람직한 실시형태에서, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 디바이스는 10^{-5} mbar 미만, 바람직하게는 10^{-6} mbar 미만인 초기 압력의 진공 승화 유닛에서 재료가 증착 (vapour deposition) 에 의해 적용되는 승화 공정에 의해 하나 이상의 층이 코팅되는 것을 특징으로 한다. 하지만, 또한 여기에서 초기 압력은 훨씬 더 낮은 것, 예를 들어 10^{-7} mbar 미만인 것이 가능하다.

[0325] 하나 이상의 층이 OVPD (유기 기상 증착) 공정에 의해 또는 캐리어 기체 승화의 도움으로 코팅되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 디바이스가 마찬가지로 바람직하며, 여기서 재료는 10^{-5} mbar 내지 1 bar 의 압력에서 적용된다. 이 공정의 특수한 경우는 OVJP (organic vapour jet printing) 공정이고, 여기서 재료들이 직접 노즐을 통해 도포되고 이렇게 하여 구조화된다 (예를 들어 M. S. Arnold *등의*, *Appl. Phys. Lett.* 2008, *92*, 053301).

[0326] 하나 이상의 층이 예를 들어, 스핀 코팅에 의해, 또는 예를 들어, 스크린 인쇄, 플렉소그래픽 인쇄 (flexographic printing), 노즐 인쇄, 또는 오프셋 인쇄, 그러나 특히 바람직하게는 LITI (광 유도된 열적 이미징, 열전사 인쇄) 또는 잉크젯 인쇄와 같은 임의의 원하는 인쇄 방법에 의한 것과 같이, 용액으로부터 제조되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 디바이스가 또한 바람직하다. 식 (I) 의 가용성 화합물이 이러한 목적을 위해 필요하다. 높은 용해도는 화합물의 적합한 치환을 통해 달성될 수 있다.

[0327] 또한, 예를 들어, 하나 이상의 층이 용액으로부터 도포되고, 하나 이상의 추가 층이 증착에 의해 적용되는 혼성 공정이 가능하다. 따라서, 예를 들어, 방출층을 용액으로부터 도포하고 전자 수송층을 증착에 의해 적용하는 것이 가능하다.

[0328] 이들 공정은 일반적으로 당업자에게 알려져 있고, 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 디바이스

에 진보성 없이 당업자에 의해 적용될 수 있다.

[0329] 본 발명에 따르면, 본 발명에 따른 하나 이상의 화합물을 포함하는 전자 디바이스는 디스플레이에서, 조명 응용의 광원으로서, 그리고 의료 및/또는 미용 응용 (예를 들어, 광 요법) 에서의 광원으로서 사용될 수 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

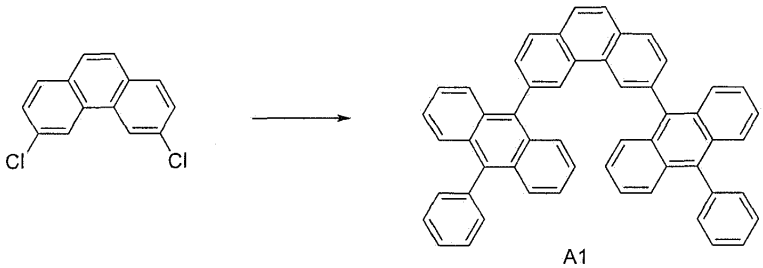
[0330] 본 발명은 이제 하기 실시예에 의해 더욱 상세히 설명될 것이며, 이에 의해 본 발명을 제한하기를 바라지 않는다.

[0331] **작업예**

[0332] **합성예**

[0333] a) 호스트 H1

[0334] 화합물 A1 의 합성:



A1

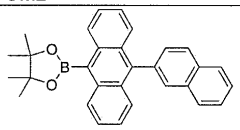
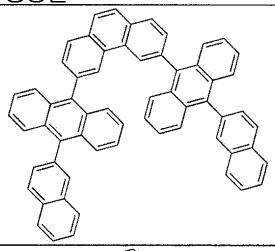
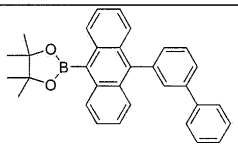
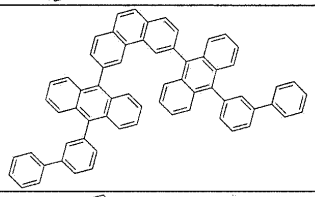
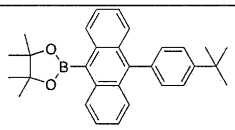
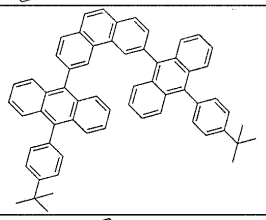
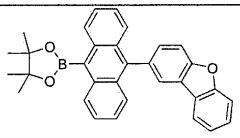
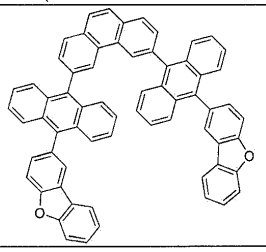
[0335]

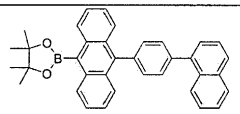
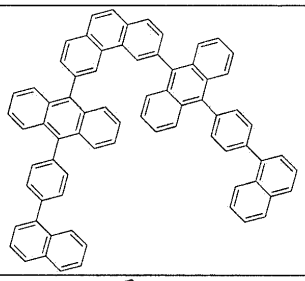
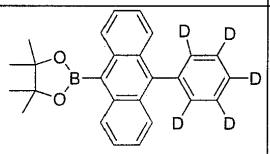
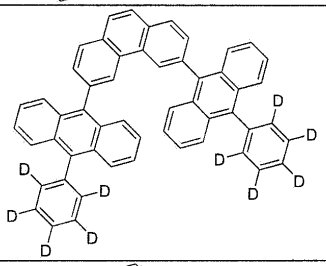
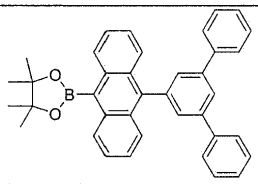
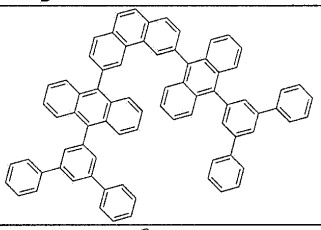
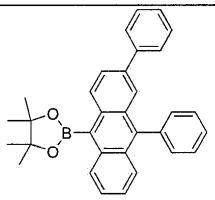
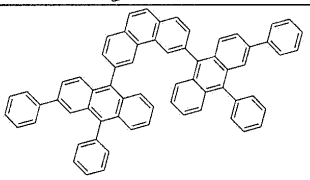
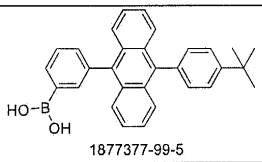
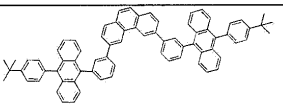
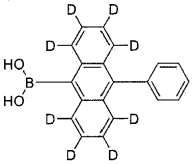
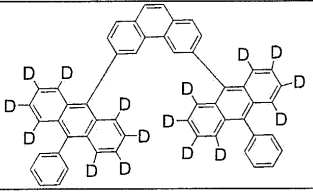
[0336] 7.9g (32mmol) 3,6-디클로로-페난트렌(20851-90-5), 30.4g (80mmol) 4,4,5,5-테트라메틸-2-(10-페닐-9-안트라세닐)-1,3,2-디옥사보롤란 (460347-59-5), 29.5g(128mmol) 인산칼륨 일수화물을 750 ml THF/물 (2:1) 에 용해시킨다. 813mg (0.96mmol) XPhos Paladacycle Gen. 3을 첨가하고 혼합물을 65℃에서 교반한다. 16 시간 후 반응 혼합물을 실온이 되게 한다. 반응 혼합물을 여과하고 냉 THF 로 세척한다. 침전물은 산화알루미늄(톨루엔) 상에서 고온 추출에 의해 정제되고, HPLC에 의해 순도 >99.9 에 이르기까지 톨루엔/에탄올 및 톨루엔/헵탄으로부터 결정화에 의해 추가로 정제된다. 나머지 용매는 2시간 동안 10^{-5} bar 에서 300 ℃ 에서 템퍼링(tempering)하여 제거된다.

[0337] 수율: 4.9 g (7.2 mmol; 23%) 의 옅은 황색 고체

[0338] 하기 화합물을 유사한 방식으로 합성할 수 있다:

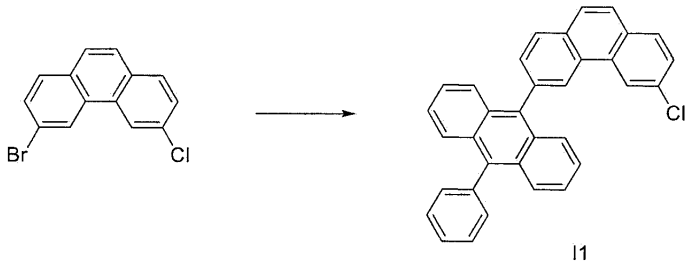
[0339]

화합물	SM1	SM2	생성물
A2	CAS 20851-90-5	 922518-84-1	
A3	CAS 20851-90-5	 1510788-38-1	
A4	CAS 20851-90-5	 1374785-59-7	
A5	CAS 20851-90-5	 2100281-97-6	

A6	CAS 20851-90-5	 1016653-37-4	
A7	CAS 20851-90-5	 1450898-41-5	
A8	CAS 20851-90-5	 1016653-38-5	
A9	CAS 20851-90-5	 1510788-96-1	
A10	CAS 20851-90-5	 1877377-99-5	
A11	CAS 20851-90-5	 2414494-83-8	

[0340]

[0341] 화합물 I1 의 합성:



I1

[0342]

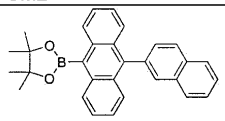
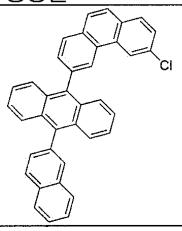
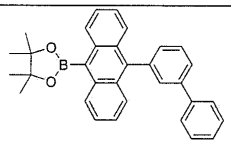
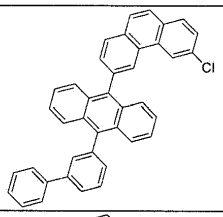
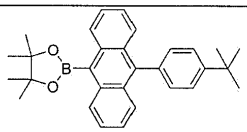
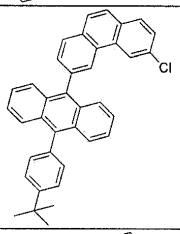
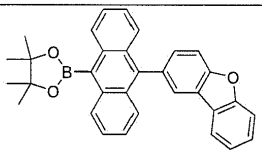
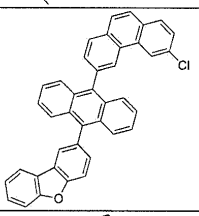
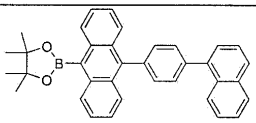
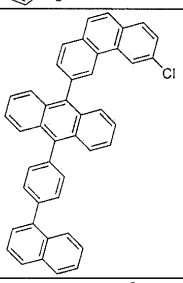
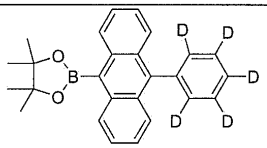
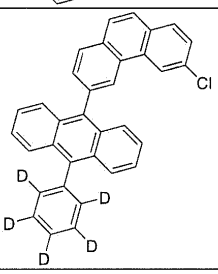
[0343] 9.3 g (32mmol) 3-브로모-6-클로로-페난트렌(892550-44-6), 13.3 g (35 mmol) 4,4,5,5-테트라메틸-2-(10-페닐-9-안트라세닐)-1,3,2-디옥사보롤란 (460347-59-5), 11.5 g(50mmol)의 인산칼륨 일수화물을 750 ml THF/물 (2:1) 에 용해시킨다. 813mg (0.96mmol) XPhos Paladacycle Gen. 3을 첨가하고 혼합물을 65℃에서 교반한다. 16 시간 후 반응 혼합물을 실온이 되게 한다. 혼합물을 300 ml 톨루엔으로 희석한다. 수성상을 톨루엔(2x200ml)으로 추출하고 조합된 유기상을 물(2x200ml)로 세척하고 황산마그네슘 상에서 건조시키고 여과

하고 감압하에 감소시킨다(reducing). 나머지 고체를 실리카(톨루엔) 상에서 여과하고 톨루엔/에탄올로부터 HPLC에 의한 순도 98%에 이르기까지 결정화하였다.

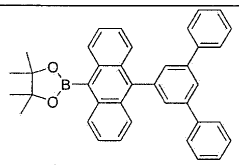
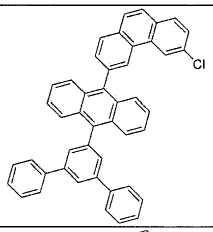
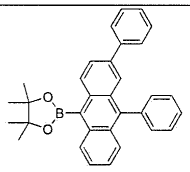
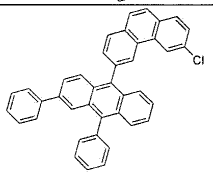
[0344] 수율 10.7 g (23 mmol, 72%)

[0345] 하기 화합물을 유사한 방식으로 합성할 수 있다:

[0346]

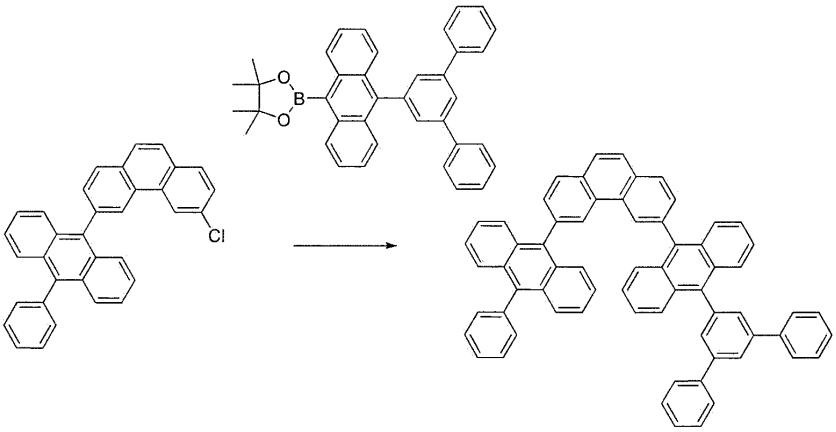
화합물	SM1	SM2	생성물
I2	892550-44-6	 922518-84-1	
I3	892550-44-6	 1510788-38-1	
I4	892550-44-6	 1374785-59-7	
I5	892550-44-6	 2100281-97-6	
I6	892550-44-6	 1016653-37-4	
I7	892550-44-6	 1450898-41-5	

[0347]

I8	892550-44-6	 1016653-38-5	
I9	892550-44-6	 1510788-96-1	

[0348]

[0349] 화합물 B1 의 합성:

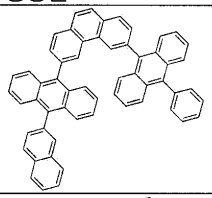
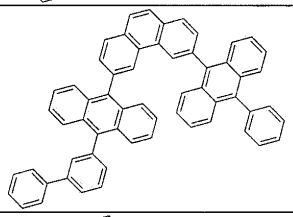
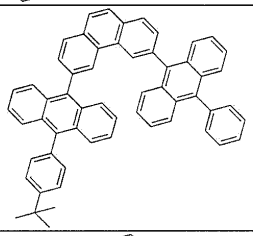
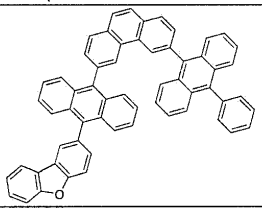


[0350]

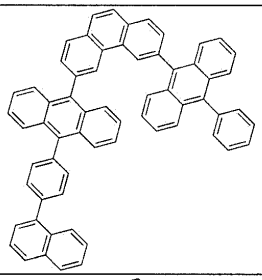
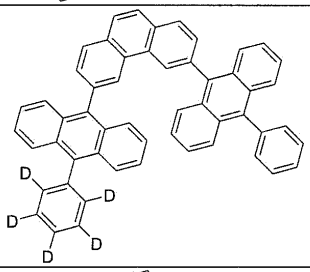
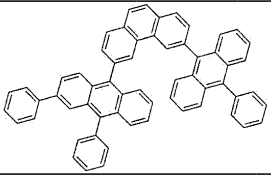
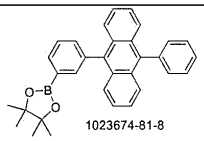
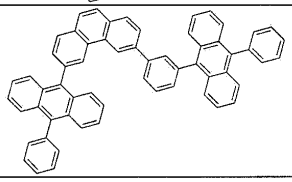
[0351] 9.3g(20mmol) I1, 16.0g(30mmol) 4,4,5,5-테트라메틸-2-(10-{5-페닐-[1,1'-바이페닐]-3-일}안트라센-9-일)-1,3,2-디옥사보롤란(1016653-38-5), 11.5g(50mmol) 인산칼륨 일수화물을 750 ml THF/물 (2:1) 에서 용해시킨다. 813mg (0.96mmol) XPhos Paladacycle Gen. 3을 첨가하고 혼합물을 65℃에서 교반한다. 16 시간 후 반응 혼합물을 실온이 되게 한다. 혼합물을 300 ml 톨루엔으로 희석한다. 수성상을 톨루엔 (2x200ml)으로 추출하고 조합된 유기상을 물(2x200ml)로 세척하고 황산마그네슘 상에서 건조시키고 여과하고 감압하에 감소시킨다. 나머지 고체는 산화알루미늄(톨루엔) 상에서 고온 추출에 의해 정제되고, HPLC에 의해 순도 >99.9% 에 이르기까지 톨루엔/에탄올 및 톨루엔/헵탄으로부터 결정화된다. 나머지 용매는 2시간 동안 10^{-5} bar 및 300℃ 에서 템퍼링하여 제거된다.

[0352] 수율: 7.5 g (9 mmol, 45%)

[0353] 하기 화합물을 유사한 방식으로 합성할 수 있다:

화합물	SM1	SM2	생성물
B1	I2	CAS 460347-59-5	
B2	I3	CAS 460347-59-5	
B3	I4	CAS 460347-59-5	
B4	I5	CAS 460347-59-5	

[0354]

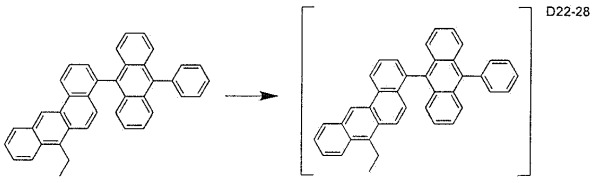
B5	I6	CAS 460347-59-5	
B6	I7	CAS 460347-59-5	
B7	I9	CAS 460347-59-5	
B8	I1		

[0355]

[0356] b) 호스트 H2

[0357] 식 (H2) 의 호스트의 합성은 당업자에게 알려져 있고, 예를 들어, WO 2008/145239 및 WO 2015/158409 에서 설명되어 있다. 추가의 합성예들이 아래에서 설명된다:

[0358] C-1 의 합성

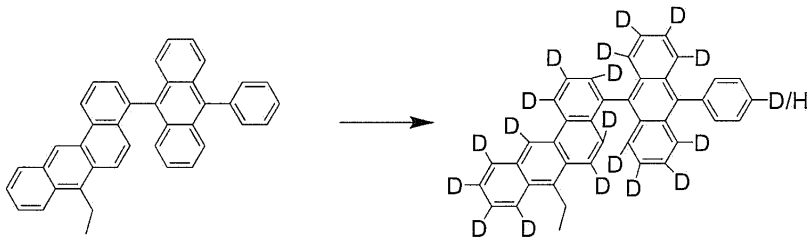


C-I1 C1

[0359]

[0360] 오토클레이브에서 C-I1(1818872-84-2; 10g, 19.5mmol)을 700ml의 톨루엔-d8 과 D_2O (5:2) 의 혼합물에 용해시키고 탈기하고 질소로 플러싱하고, 20g Pt-C 5%를 첨가하고 혼합물을 165℃에서 교반한다. 11일 후, 혼합물을 실온으로 냉각시키고 촉매를 여과하고 2개의 상을 분리한다. 유기상을 감압 하에 감소시킨다. 나머지 고체를 실리카(3회, 용리액으로서 톨루엔) 상에서 여과 및 99.9% 의 HPLC 순도에 이르기까지 디클로로메탄:시클로헥산 및 톨루엔:n-헵탄으로부터 여러번 결정화하여 정제하였다. 나머지 고체는 10^{-5} bar 에서 250℃ 에서 템퍼링하여 건조되었다. 중수소화 생성물(D22-28) 이 무색 분말로서 수득된다. 중수소화 등급은 ASAP-MS, ^{1}H-NMR, ^{13}C-NMR 및 2D-NMR 에 의해 획득된다. 수율: 5.4 g (10.5 mmol; 54 %).

[0361] D1 의 합성



D1

[0362]

[0363] 10g(19.7mmol) 7-에틸-4-(10-페닐안트라센-9-일)테트라펜을 230mL 톨루엔-D8에 용해시킨다. 10.4 ml (0.12 mol) 트리플루오로메탄술폰산을 적가하고, 혼합물을 실온에서 교반한다. 2시간 후 47 ml D_2O 을 첨가하고 혼합물을 인산칼륨 수용액에 첨가될 때까지 10분 동안 교반한다. 혼합물을 톨루엔으로 추출하고, 조합된 유기상을 황산나트륨 상에서 건조시킨다. 유기상을 감압 하에 감소시킨다. 나머지 고체를 컬럼 크로마토그래피 및 99.9% 의 HPLC 순도에 이르기까지 디클로로메탄:시클로헥산 및 톨루엔:n-헵탄으로부터 여러번 결정화하여 정제한다. 수율 5.7g (10.8 mmol, 55%)

[0364] **디바이스 예**

[0365] **a)필름 및 디바이스의 제조**

[0366] 사전 구조화된 ITO(50nm) 및 뱅크 재료로 덮인 유리 기판은 탈이온수 중 초음파 처리를 사용하여 세정된다. 다음에서, 기판은 에어건을 사용하여 건조되고 후속적으로 230℃에서 2시간 동안 핫 플레이트상에서 어닐링된다.

[0367] 모든 다음 공정 단계는 황색광 중에서 수행된다.

[0368] 다음 층 시퀀스는 도 4a와 4b에 도시되어 있다.

[0369] 정공 주입층 (HIL) 을 기판 상에 20nm 의 두께로 잉크젯 인쇄하고 진공에서 건조시킨다. 이를 위해 HIL 잉크의 고체 농도는 6 g/l 이다. 다음으로, HIL 을 200℃ 에서 30 분 동안 어닐링한다. HIL의 잉크젯 인쇄 및 어닐링은 공기 중에서 수행된다. HIL 재료로서, 정공 수송, 가교성 중합체 및 p-도핑 염을 3-페녹시톨루엔에 용해시킨다. 재료는 즉, WO2016/107668, WO2013/081052 및 EP2325190 에 기재되어 있다.

[0370] HIL 의 상단에, 정공 수송 층을 주위 조건하 잉크젯 인쇄하고, 진공에서 건조시키고, 아르곤 분위기에서 210℃

로 30 분 동안 어닐링한다. 정공 수송층은 WO2013156130에 따라 합성된 표 1에 나타낸 구조의 중합체 (HTM1) 또는 WO2018/114882에 따라 합성된 중합체 HTM2 (표 1) 중 어느 하나이다.

[0371] 중합체는, 여기서처럼, 디바이스에 전형적인 20nm 층 두께가 잉크젯 인쇄에 의해 달성되어야 하는 경우, 용액은 전형적으로 고체 함량이 대략 5 g/l 가 되도록, 3-페녹시 톨루엔에 용해된다. 층은 주변 분위기에서 잉크젯 인쇄에 의해 적용되고, 진공에서 건조되고, 아르곤 분위기에서 30분 동안 210℃에서 가열하여 어닐링된다.

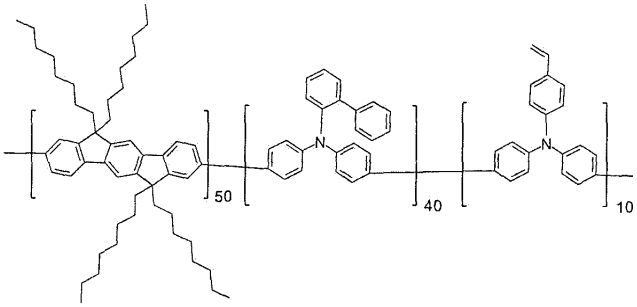
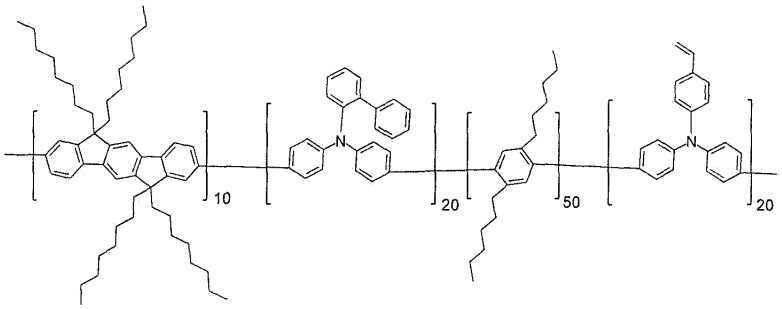
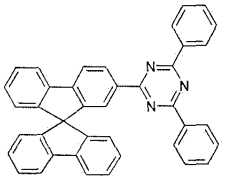
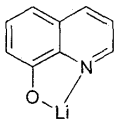
[0372] 방출 층은 하기 표 2에 기재된 바와 같이 매트릭스 재료(하나의 호스트 화합물 또는 2개의 호스트 화합물) 및 도펀트를 포함한다. 방출 층을 위한 혼합물은 3-페녹시 톨루엔에 용해된다. 그러한 용액의 고체 함량은, 여기서처럼, 디바이스에 전형적인 30nm 의 층 두께가 잉크젯 인쇄에 의해 달성되어야 하는 경우, 약 10 mg/ml 이다. 청색 방출층 (B-EML) 을 또한 잉크젯 인쇄하고, 다음으로 진공 건조시키고, 150℃ 에서 10 분 동안 어닐링한다. 잉크젯 인쇄는 주변 분위기에서 수행되는 반면, 어닐링은 아르곤 분위기에서 수행된다.

[0373] EML 필름 균일성을 평가하기 위해 도 4a에 따라 제조된 디바이스가 사용된다.

[0374] 전기 광학 특성화에 사용되는 도 4b에 따른 디바이스의 제조를 위해, 샘플은 다음으로 진공 증착 챔버로 옮겨지고 여기서 두 개의 전자 수송층(ETL1, ETL2), 전자 주입층(EIL) 및 캐소드 (Al) 의 증착이 열 증발을 사용하여 수행된다. 이로써 ETL1은 ETM1(10nm 필름 두께)으로 이루어지는 반면, ETL2 는 ETM1과 ETM2 의 1:1 부피% 혼합물 (40nm 필름 두께) 로 이루어진다. 전자 주입층은 ETM2 (3nm)로 이루어지고, 캐소드는 알루미늄 (100nm)이다. 구조들은 표 1에 나타나 있다.

[0375] 증발 후, 디바이스는 아르곤 분위기의 글로브박스에서 캡슐화된다.

표 1: 용액 처리된 층의 재료의 구조.

HTM1	
	
HTM2	
	
ETM1	**ETM2**
	

[0376]

[0377] **b) 방출 필름 균일성 평가**

[0378] 디스플레이 생산을 위해서는, 동시에 우수한 디바이스 성능을 가지면서 매우 우수한 픽셀 균일성을 얻는 것이 매우 중요하다. 층 두께 불균일성은 더 얇은 필름 두께의 영역이 증가된 휘도를 나타내고 더 두꺼운 영역은 휘도가 감소하는 고르지 않은 휘도 분포를 유발한다. 이러한 불균일성은 픽셀마다 다르므로 픽셀간에 재현 가능한 외관을 방해한다. 결합하여, 이것은 그러한 디스플레이의 품질에 대해 부정적인 인식으로 이어질 것이다. 따라서, 본 발명은 EML 필름 균일성 및 디바이스 성능의 주제를 다룬다. 이에 따라 평가를 위한 첫 번째 단계는 필름 균일성의 검사이다. 이를 위해 도 4a에 도시된 스택이 사용되며 EML 성막 후에 처리가 중지된다. 필름들은 파트 a) 에 기재된 바처럼 제조된다. EML 의 조성은 표 2-A 및 표 2-B에 나타나 있다.

[0379] 인쇄된 필름의 균일성을 평가하기 위해, 프로파일로미터로 8㎛ 프로파일을 따라 그의 토포그래피를 특성화하고 Rp-v (peak-to-valley) 값과 거칠기의 평균 제곱근 편차(root mean square deviation) 를 계산한다. 2 ㎛ 스타일러스가 있는 KLA-Tencor Corporation 의 프로파일-미터 Alpha-스텝 D120 을 사용하여 필름 프로파일을 측정한다. Rp-v 값은 측정된 프로파일 내에서 측정된 최대치(Rp)와 최소치 피크(Rv)의 높이 차이에 대응한다. 가시성의 용이를 위해, 최소 피크가 0nm 의 높이에 대응하고 축 눈금이 모든 다이어그램에 대해 동일하도록 필름 프로파일의 베이스라인이 빼진다.

[0380] 필름 균일성을 결정하기 위해 다음 두 공식이 사용된다: 층 내 최대 높이 차이를 나타내는 피크-투-밸리 Rp-v (식 1)와 평균선 z_i 에 대한 높이 차이의 평균 제곱 근 값을 사용하는 평균 제곱근 거칠기 RMS (식 2).

$$R(p-v) = Rp - Rv \qquad \text{식 1}$$

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} z_i^2} \qquad \text{식 2}$$

[0381]

표 2-A. 필름 프로파일 및 대응하는 도면.

프로파일 예	EML 조성물			Rp-v [nm]	RMS [nm]	도면
	H2 유형	H1 유형	방출체			
PR1		A1 (99%)	E4 (1%)	4.62	1.02	1
PR2	H2-4 (99%)		E4 (1%)	26.33	7.66	2
PE1	H2-4 (69%)	A1 (30%)	E4 (1%)	4.18	1.01	3

[0382]

[0383] 본 발명에 따른 호스트 혼합물을 포함하는 예 PE1은 PR2에 비해 현저히 감소된 Rp-v 및 RMS를 나타내고 훨씬 더 매끄러운 필름에 대응한다 (도 2 및 3).

[0384] 또한, 예 PE1는 또한 PR1과 비교하여 유사한 Rp-v 및 RMS를 보여주는 한편, 하기에 나타낸 바와 같이 더 나은 OLED 성능으로 이어진다 (표 5f, 참고예 11 및 실시예 14 참조).

[0385] 추가 방출 층(EML)의 추가 필름 균일성이 하기 표 2-B에 나타나 있고, 대응하는 EML을 포함하는 OLED의 성능이 표 5a 내지 5k에 나타나 있다.

표 2-B. 추가 필름 프로파일

프로파일	EML 조성물			Rp-v [nm]	RMS [nm]
예	H2 유형	H1 유형	방출체		
PR3		B2 (99%)	E1 (1%)	5.01	1.12
PR4	H2-1 (99%)		E1 (1%)	21.64	7.01
PE2	H2-1 (79%)	B2 (20%)	E1 (1%)	3.65	1.06
PE3	H2-4 (49%)	A1 (50%)	E4 (1%)	3.31	1.04
PR5		A10 (97%)	E1 (3%)	3.02	0.99
PR6	H2-41 (97%)		E1 (3%)	12.52	5.25
PE4	H2-41 (67%)	A10 (30%)	E1 (3%)	4.94	1.08
PR7-5		A1 (95%)	E2 (5%)	2.83	0.67
PR8-6	H2-49 (95%)		E2 (5%)	42.36	9.42
PE5-4	H2-49 (45%)	A1 (50%)	E2 (5%)	3.95	1.26
PR9-7	A4 (99%)		E3 (1%)	4.24	1.12
PR10-8	H2-49 (99%)		E3 (1%)	30.42	7.86
PE6-5	H2-49 (69%)	A4 (30%)	E3 (1%)	4.27	1.18
PR11-9		B2 (99%)	E3 (1%)	4.65	1.14
PR12-10	H2-2 (99%)		E3 (1%)	25.98	7.54
PE7-6	H2-2 (89%)	B2 (30%)	E3 (1%)	3.72	0.81
PR13-11		B8 (97%)	E4 (3%)	2.99	0.89
PR14-12	H2-4 (97%)		E4 (3%)	23.11	6.84
PE8-7	H2-4 (57%)	B8 (40%)	E4 (3%)	3.71	1.21
PR15-13		A11 (95%)	E2 (5%)	4.24	0.97
PR16-14	H2-4 (95%)		E2 (5%)	24.82	8.20
PE9-8	H2-4 (55%)	A11 (40%)	E2 (5%)	3.57	0.96
PR17-15		A11 (97%)	E3 (3%)	2.98	1.14
PR18-16	D1 (97%)		E3 (3%)	26.89	5.66
PE10-9	D1 (67%)	A11 (30%)	E3 (3%)	3.01	1.23
PR19-17		C3 (99%)	E4 (1%)	4.16	0.92
PR20-18	C1 (99%)		E4 (1%)	25.28	6.06
PE11-10	C1 (69%)	C3 (30%)	E4 (1%)	3.61	1.05
PR21		B8 (97%)	E4 (3%)	3.25	0.69
PR22	H2-15 (97%)		E4 (3%)	24.99	7.10
PE12	H2-15 (67%)	B8 (30%)	E4 (3%)	3.34	0.92

[0386]

[0387] 프로파일 PE1, PE2, PE3, PE4, PE5, PE6, PE7, PE8, PE9, PE11 및 PE12를 갖는 발광층에 대해, 위의 PE1에 대한 것과 동일한 논의가 유효하다.

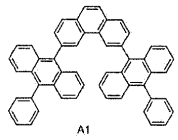
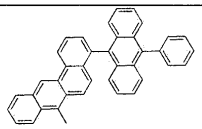
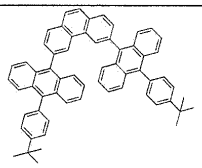
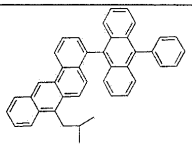
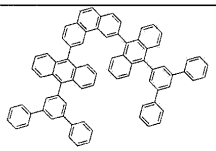
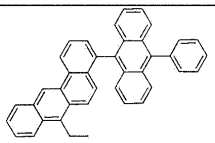
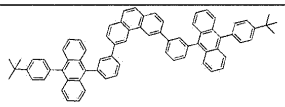
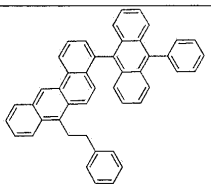
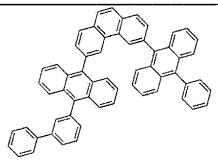
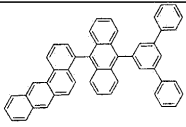
[0388] 프로파일 PE1 내지 PE12를 갖는 혼합 호스트 EML을 사용하는 디바이스의 성능은 다른 디바이스와 비교될 수 있다(표 5a 내지 5k 참조).

[0389] **c) 디바이스 결과**

[0390] 도 4b에 도시된 것과 같은 디바이스가 파트 a) 에 설명된 대로 제조된다. 호스트 재료는 표 3에 그리고 방출체는 표 4 에 나타나 있다. 청색 EML 잉크는 표 5a-k에 나타낸 대로 혼합되며, 여기서 또한 1000 cd/m^2 에서의 상대 외부 양자 효율(rel. EQE) 및 상대 디바이스 수명 (1000 cd/m^2 에서의 rel. LT90) 이 각각의 예에 대해 나타나 있다.

표 3: 구조 호스트

[0391]

H1 유형		H2 유형	
A1	 A1	H2-1	 CAS 1818872-74-0
A4		H2-2	 CAS 1818872-85-3
A8		H2-4	 CAS 1818872-84-2
A10		H2-15	 CAS 1818872-89-7
B2		H2-41	 CAS 1273319-88-2

[0392]

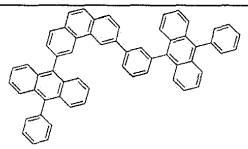
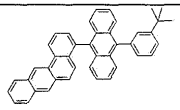
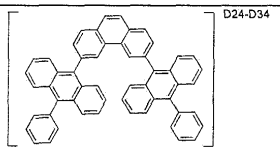
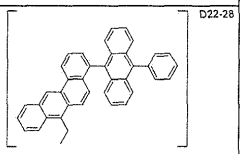
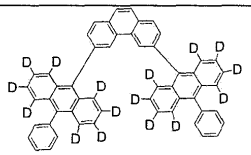
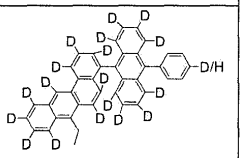
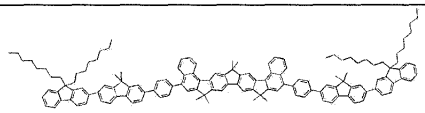
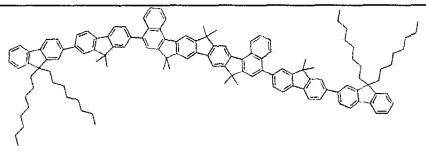
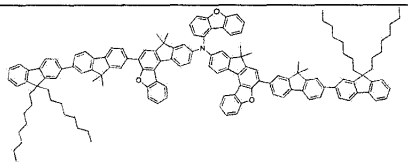
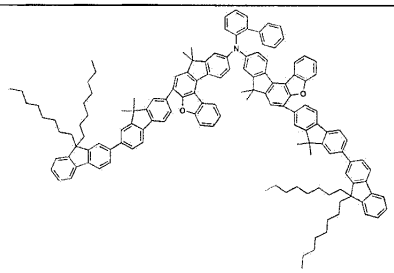
B8		H2-49	
C3	 D24-D34	C1	 D22-28
A11		D1	 D/H

표 4: 구조 방출체

방출체	구조
E1	
E2	
E3	
E4	

[0393]

[0394] 글로브박스에서의 캡슐화 후에, OLED는 표준 방법에 의해 특성화된다. 이러한 목적을 위해, 전계 발광 스펙트럼, 전류/전압/휘도 특성 곡선 (IUL 특성 곡선) (램버트 (Lambert) 방출 특성을 가정함) 및 (동작) 수명이 결정된다. IUL 특성 곡선을 사용하여, 특성 성능 지수(figures of merit), 예컨대 특정 휘도에서의 외부 양자 효율 (% 단위) 을 결정한다. 디바이스는 적용된 전압 램프의 각 단계에서 일정한 전압으로 구동된다. 디바이스 수명은 초기 휘도를 갖는 주어진 전류 하에서 측정한다. 그후, 휘도를 보정된 광다이오드로 시간에 따라 측정한다.

[0395] **표 5a:** 1% E1을 갖는 디바이스 예에 사용할 청색 EML 혼합물

디바이스 예	HTM	H2 유형	%	H1 유형	%	D	%	프로파일 예	1000cd/m² 에서의 rel. EQE	1000cd/m² 에서의 rel. LT90
참고예 1	HTM1			B2	99	E1	1	PR3	0.89	0.68
참고예 2	HTM1	H2-1	99			E1	1	PR4	1.00	1.00
실시예 1	HTM1	H2-1	79	B2	20	E1	1	PE2	0.98	1.44
실시예 2	HTM1	H2-1	69	B2	30	E1	1		0.98	1.26
실시예 3	HTM1	H2-1	59	B2	40	E1	1		1.01	1.31

[0396]

[0397] **표 5b:** 3% E1을 갖는 디바이스 예에 사용할 청색 EML 혼합물

디바이스 예	HTM	H2 유형	%	H1 유형	%	D	%	프로파일 예	1000cd/m² 에서의 rel. EQE	1000cd/m² 에서의 rel. LT90
참고예 3	HTM1			A10	97	E1	3	PR5	0.81	0.59
참고예 4	HTM1	H2-41	97			E1	3	PR6	1.00	1.00
실시예 4	HTM1	H2-41	67	A10	30	E1	3	PE4	0.96	1.07
실시예 5	HTM1	H2-41	47	A10	50	E1	3		0.95	1.09

[0398]

[0399] **표 5c**: 5% E2를 갖는 디바이스 예에 사용할 청색 EML 혼합물

디바이스 예	HTM	H2 유형	%	H1 유형	%	D	%	프로파일 예	1000cd/m² 에서의 rel. EQE	1000cd/m² 에서의 rel. LT90
참고예 5	HTM2			A1	95	E2	5	PR7	1.00	1.20
참고예 6	HTM2	H2-49	95			E2	5	PR8	1.00	1.00
실시예 6	HTM2	H2-49	65	A1	30	E2	5		0.98	1.42
실시예 7	HTM2	H2-49	45	A1	50	E2	5	PE5	1.03	1.51

[0400]

[0401] **표 5d**: 1% E3를 갖는 디바이스 예에 사용할 청색 EML 혼합물

디바이스 예	HTM	H2 유형	%	H1 유형	%	D	%	프로파일 예	1000cd/m² 에서의 rel. EQE	1000cd/m² 에서의 rel. LT90
참고예 7	HTM1			A4	99	E3	1	PR9	1.00	1.64
참고예 8	HTM1	H2-49	99			E3	1	PR10	1.00	1.00
실시예 8	HTM1	H2-49	69	A4	30	E3	1	PE6	1.15	1.79
실시예 9	HTM1	H2-49	49	A4	50	E3	1		1.13	2.12

[0402]

[0403] **표 5e**: 1% E3를 갖는 디바이스 예에 사용할 청색 EML 혼합물

디바이스 예	HTM	H2 유형	%	H1 유형	%	D	%	프로파일 예	1000cd/m² 에서의 rel. EQE	1000cd/m² 에서의 rel. LT90
참고예 9	HTM2			B2	99	E3	1	PR11	0.93	0.98
참고예 10	HTM2	H2-2	99			E3	1	PR12	1.00	1.00
실시예 10	HTM2	H2-2	89	B2	10	E3	1	PE7	1.03	0.98
실시예 11	HTM2	H2-2	69	B2	30	E3	1		0.98	1.30
실시예 12	HTM2	H2-2	49	B2	50	E3	1		1.05	1.25

[0404]

[0405] **표 5f**: 1% E4를 갖는 디바이스 예에 사용할 청색 EML 혼합물

디바이스 예	HTM	H2 유형	%	H1 유형	%	D	%	프로파일 예	1000cd/m² 에서의 rel. EQE	1000cd/m² 에서의 rel. LT90
참고예 11	HTM2			A1	99	E4	1	PR1	0.85	0.80
참고예 12	HTM2	H2-4	99			E4	1	PR2	1.00	1.00
실시예 13	HTM2	H2-4	89	A1	10	E4	1		0.95	1.10
실시예 14	HTM2	H2-4	69	A1	30	E4	1	PE1	1.01	1.12
실시예 15	HTM2	H2-4	49	A1	50	E4	1	PE3	0.93	1.23

[0406]

[0407] **표 5g**: 3% E4를 갖는 디바이스 예에 사용할 청색 EML 혼합물

디바이스 예	HTM	H2 유형	%	H1 유형	%	D	%	프로파일 예	1000cd/m² 에서의 rel. EQE	1000cd/m² 에서의 rel. LT90
참고예 13	HTM2			B8	97	E4	3	PR13	0.79	0.82
참고예 14	HTM2	H2-4	97			E4	3	PR14	1.00	1.00
실시예 16	HTM2	H2-4	57	B8	40	E4	3	PE8	1.02	1.02

[0408]

[0409] **표 5h**: 5% E2를 갖는 디바이스 예에 사용할 청색 EML 혼합물

디바이스 예	HTM	H2 유형	%	H1 유형	%	D	%	프로파일 예	1000cd/m² 에서의 rel. EQE	1000cd/m² 에서의 rel. LT90
참고예 15	HTM1			A11	95	E2	5	PR15	0.78	0.84
참고예 16	HTM1	H2-4	95			E2	5	PR16	1.00	1.00
실시예 17	HTM1	H2-4	55	A11	40	E2	5	PE9	0.98	1.01

[0410]

[0411] **표 5i**: 3% E3를 갖는 디바이스 예에 사용할 청색 EML 혼합물

디바이스 예	HTM	H2 유형	%	H1 유형	%	D	%	프로파일 예	1000cd/m² 에서의 rel. EQE	1000cd/m² 에서의 rel. LT90
참고예 17	HTM2			A11	97	E3	3	PR17	0.92	0.79
참고예 18	HTM2	D1	97			E3	3	PR18	1.00	1.00
실시예 18	HTM2	D1	67	A11	30	E3	3	PE10	0.98	1.02

[0412]

[0413] **표 5j:** 1% E4를 갖는 디바이스 예에 사용할 청색 EML 혼합물

디바이스 예	HTM	H2 유형	%	H1 유형	%	D	%	프로파일 예	1000cd/m² 에서의 rel. EQE	1000cd/m² 에서의 rel. LT90
참고예 19	HTM2			C3	99	E4	1	PR19	0.94	0.84
참고예 20	HTM2	C1	99			E4	1	PR20	1.00	1.00
실시예 19	HTM2	C1	69	C3	30	E4	1	PE11	1.00	1.01
실시예 20	HTM2	C1	49	C3	50	E4	1		1.05	1.02

[0414]

[0415] **표 5k:** 3% E4를 갖는 디바이스 예에 사용할 청색 EML 혼합물

디바이스 예	HTM	H2 유형	%	H1 유형	%	D	%	프로파일 예	1000cd/m² 에서의 rel. EQE	1000cd/m² 에서의 rel. LT90
참고예 21	HTM1			B8	97	E4	3	PR21	0.78	0.72
참고예 22	HTM1	H2-15	97			E4	3	PR22	1.00	1.00
실시예 20	HTM1	H2-15	67	B8	30	E4	3	PE12	0.98	0.98

[0416]

[0417] 혼합 호스트 시스템의 표시된 모든 예는 단일 호스트 유형 H1에 비해 향상된 디바이스 성능을 보여주지만, 호스트 유형 H2에서와 유사한 성능에 도달될 수 있다.

[0418] 이것은 사용된 방출체 및 사용된 방출체 농도와 무관하다.

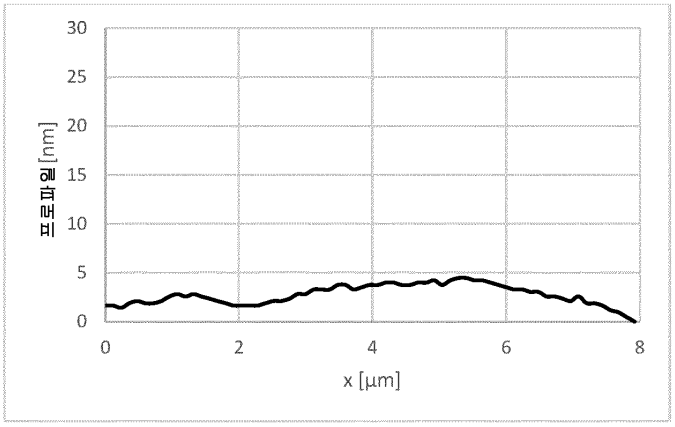
[0419] 위에서 논의된 바와 같이, 프로파일은 표 5f로부터의 참고예 11 및 12, 실시예 14 및 실시예 15에 대해 표시된다(도 1 내지 3 참조). 참고예 11과 비교하여, 본 발명에 따른 실시예 13, 14 및 15는 증가된 효율 및 증가된 수명에서 가시적인, 개선된 디바이스 성능을 보여준다. 고도로 불균일한 필름을 보여주는 참고예 12와 비교하여, 본 발명에 따른 필름은 유사한 디바이스 성능을 나타내면서 매우 균일하다.

[0420] 동일한 논의가 표 5a 내지 5k에 나타낸 본 발명에 따른 디바이스에 대해 유효하다.

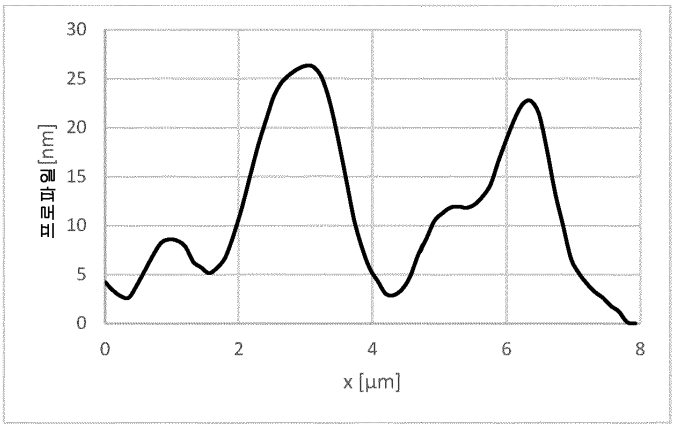
[0421] 본 발명의 내용의 도움으로, 균일한 필름 품질을 보장하는 동시에 양호한 OLED 디바이스 성능을 달성하는 것이 가능하다.

도면

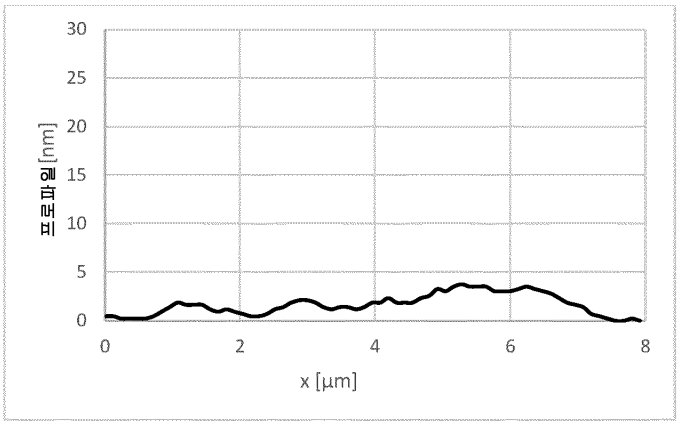
도면1



도면2



도면3



도면4a

B-EML
HTL
HIL
ITO 애노드
기판

도면4b

Al 캐소드
EIL
ETL2
ETL1
B-EML
HTL
HIL
ITO 애노드
기판