(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2017년08월29일
(11) 등록번호 10-1772371
(24) 등록일자 2017년08월23일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07C 211/61 (2006.01) *C07D 209/88* (2006.01)
C07D 307/81 (2006.01) *C07D 307/91* (2006.01)
C07D 333/76 (2006.01) *C09K 11/06* (2006.01)
H01L 51/00 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
(52) CPC특허분류
C07C 211/61 (2013.01)
C07D 209/88 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2016-7016183
(22) 출원일자(국제) 2014년11월26일
심사청구일자 2016년06월17일
(85) 번역문제출일자 2016년06월17일
(65) 공개번호 10-2016-0078506
(43) 공개일자 2016년07월04일
(86) 국제출원번호 PCT/EP2014/003148
(87) 국제공개번호 WO 2015/082056
국제공개일자 2015년06월11일
(30) 우선권주장
13005697.1 2013년12월06일
유럽특허청(EPO)(EP)
(56) 선행기술조사문헌
KR1020110069077 A*
KR1020120066076 A*
WO2013017192 A1*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
메르크 파텐트 게엠베하
독일 64293 다름스타트 프랑크푸르터 스트라세 250
(72) 발명자
피슈터 요헨
독일 64665 알스바흐-헨라인 반호프슈트라쎄 28
슈티버 프랑크
독일 64683 아인하우젠 리드로더 벡 8
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인코리아나

전체 청구항 수 : 총 20 항 심사관 : 김종호

(54) 발명의 명칭 **화합물 및 유기 전자 소자**

(57) 요 약

본 발명은 특정 플루오렌, 전자 소자에서의 상기 화합물의 용도, 및 하나 이상의 상기 화합물을 포함하는 전자 소자에 관한 것이다. 나아가, 본 발명은 상기 화합물의 제조 방법 및 하나 이상 상기 화합물을 포함하는 제형 및 조성물에 관한 것이다.

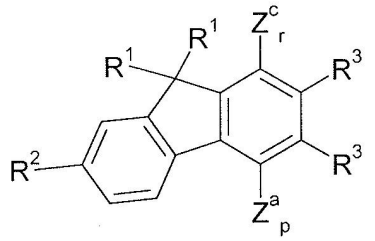
(52) CPC특허분류
C07D 307/81 (2013.01)
C07D 307/91 (2013.01)
C07D 333/76 (2013.01)
C09K 11/06 (2013.01)
H01L 51/006 (2013.01)
H01L 51/0072 (2013.01)
H01L 51/5012 (2013.01)
H01L 51/5072 (2013.01)
C09K 2211/1011 (2013.01)
(72) 발명자
몬테네그로 엘비라
독일 69469 바인하임 호라츠벡 5
뮤히카-페르나우드 테레사
독일 64283 다름슈타트 하인리히슈트라쎄 119
포게스 프랑크
독일 67098 바트 뒤르크하임 바이트플라츠 2

명 세 서

청구범위

청구항 1

일반식 (2a) 의 화합물:



화학식 (2a)

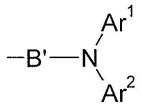
[식 중, 사용된 기호 및 지수에는 하기가 적용됨:

R^1 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템이고;

R^2, R^3 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고;

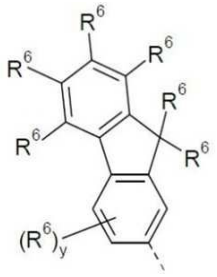
p, r 은 0 또는 1 이고, 여기서 p + r = 1 이고;

Z^a_0, Z^c_0 는, 각각의 경우 동일하거나 상이하게, R^3 이고;

Z^a_1, Z^c_1 는  이고;

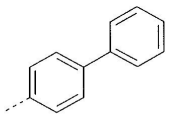
B' 는 페닐렌기이고;

Ar^1 은

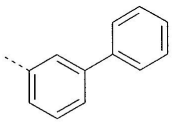


의 기이고, 여기서 y 는 1, 2 또는 3 이고;

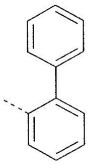
Ar^2 는 하기 화학식 (37) 내지 (122g) 로부터 선택되는 기 (이는 동일하거나 상이한 하나 이상의 라디칼 R^6 으로 치환될 수 있음) 이고:



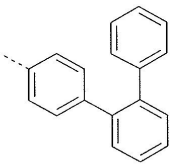
화학식 (37)



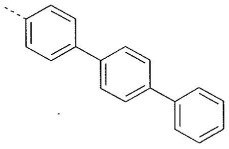
화학식 (38)



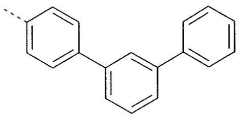
화학식 (39)



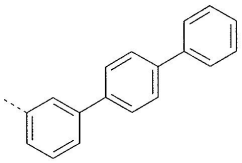
화학식 (40)



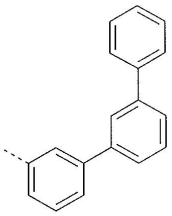
화학식 (41)



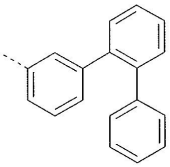
화학식 (42)



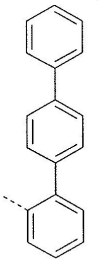
화학식 (43)



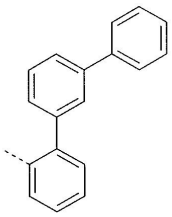
화학식 (44)



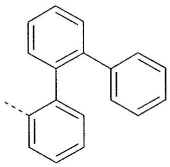
화학식 (45)



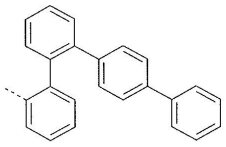
화학식 (46)



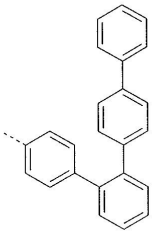
화학식 (47)



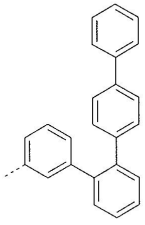
화학식 (48)



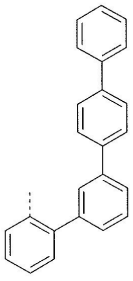
화학식 (49)



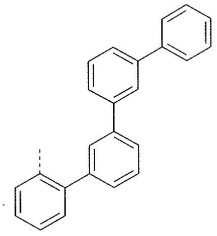
화학식 (50)



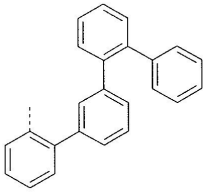
화학식 (51)



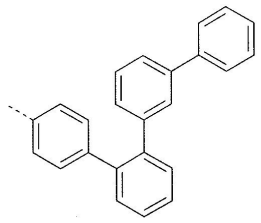
화학식 (52)



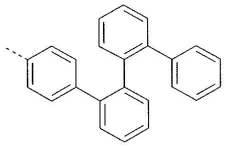
화학식 (53)



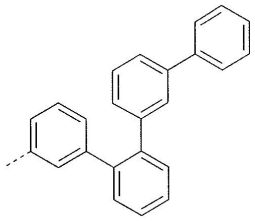
화학식 (54)



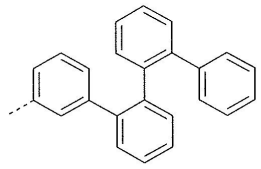
화학식 (55)



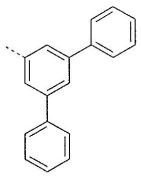
화학식 (56)



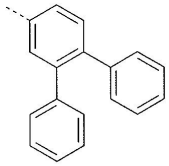
화학식 (57)



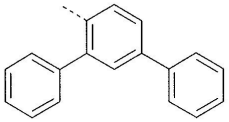
화학식 (58)



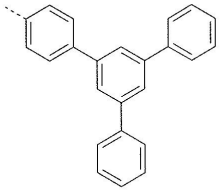
화학식 (59)



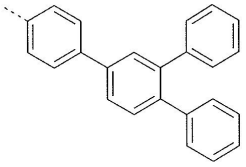
화학식 (60)



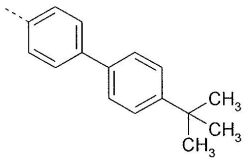
화학식 (61)



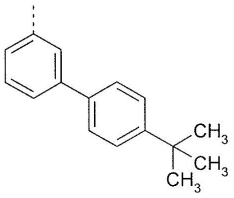
화학식 (62)



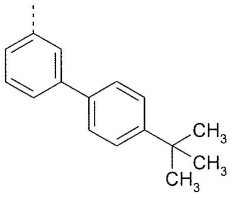
화학식 (63)



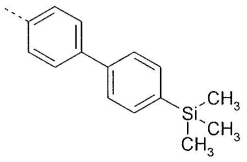
화학식 (64)



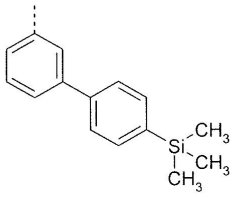
화학식 (65)



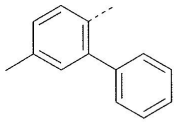
화학식 (66)



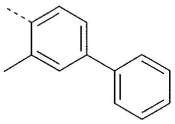
화학식 (67)



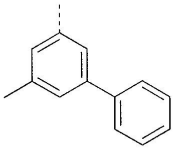
화학식 (68)



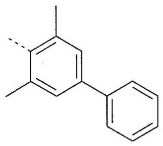
화학식 (69)



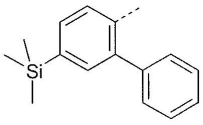
화학식 (70)



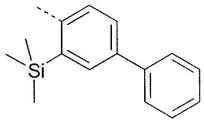
화학식 (71)



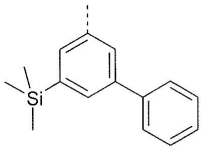
화학식 (72)



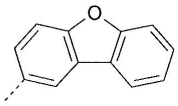
화학식 (73)



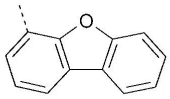
화학식 (74)



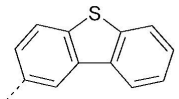
화학식 (75)



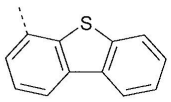
화학식 (76)



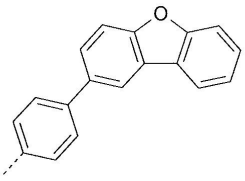
화학식 (77)



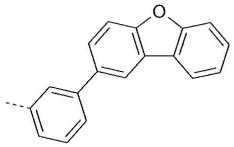
화학식 (78)



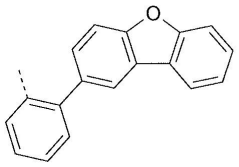
화학식 (79)



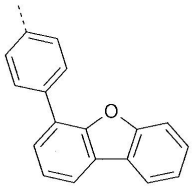
화학식 (80)



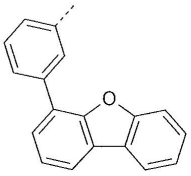
화학식 (81)



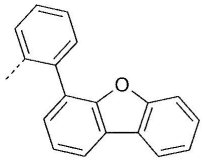
화학식 (82)



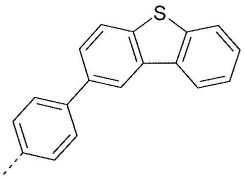
화학식 (83)



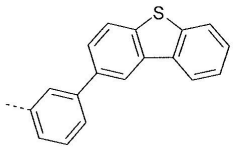
화학식 (84)



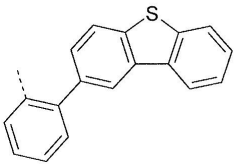
화학식 (85)



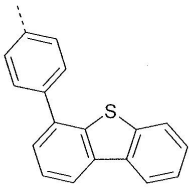
화학식 (86)



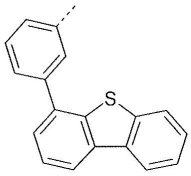
화학식 (87)



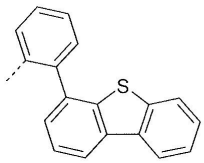
화학식 (88)



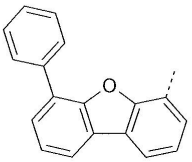
화학식 (89)



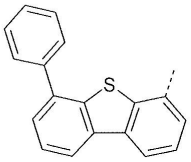
화학식 (90)



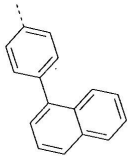
화학식 (91)



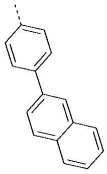
화학식 (92)



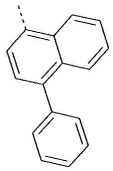
화학식 (93)



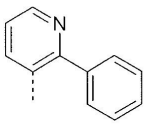
화학식 (94)



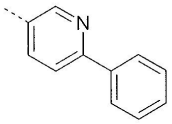
화학식 (95)



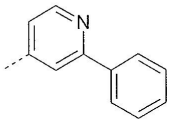
화학식 (96)



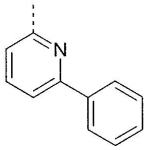
화학식 (97)



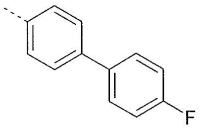
화학식 (98)



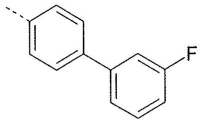
화학식 (99)



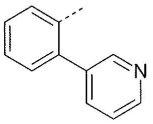
화학식 (100)



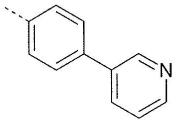
화학식 (101)



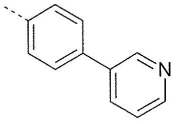
화학식 (102)



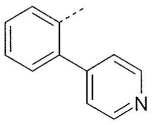
화학식 (103)



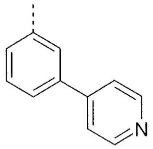
화학식 (104)



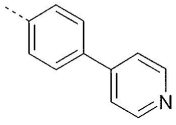
화학식 (105)



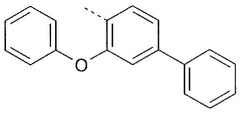
화학식 (106)



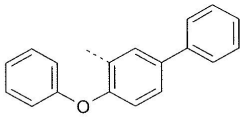
화학식 (107)



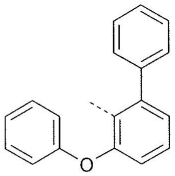
화학식 (108)



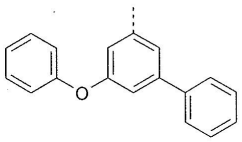
화학식 (109)



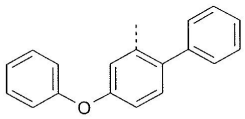
화학식 (110)



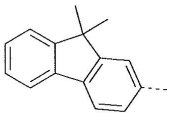
화학식 (111)



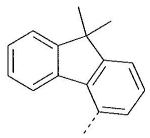
화학식 (112)



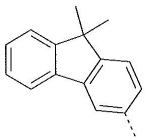
화학식 (113)



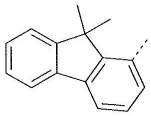
화학식 (114)



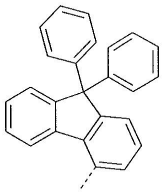
화학식 (115)



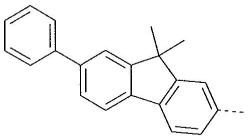
화학식 (116)



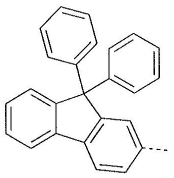
화학식 (117)



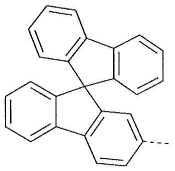
화학식 (118)



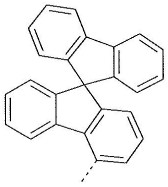
화학식 (119)



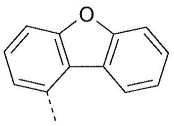
화학식 (120)



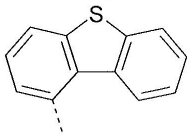
화학식 (121)



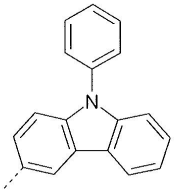
화학식 (122)



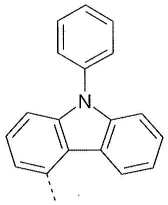
화학식 (122a)



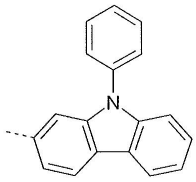
화학식 (122b)



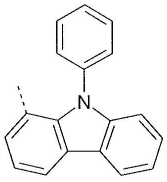
화학식 (122c)



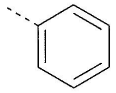
화학식 (122d)



화학식 (122e)



화학식 (122f)



화학식 (122g)

;

R^6 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템임].

청구항 2

삭제

청구항 3

삭제

청구항 4

삭제

청구항 5

삭제

청구항 6

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

청구항 7

삭제

청구항 8

삭제

청구항 9

삭제

청구항 10

삭제

청구항 11

삭제

청구항 12

제 1 항에 있어서, 2 개의 기 Ar^1 및 Ar^2 가 모두 둘 이상의 방향족 또는 헤테로방향족 고리를 함유하는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 13

이탈기 함유 플루오렌 유도체와 Ar^2-NH-Ar^1 의 반응의 1-단계 부흐발트 (Buchwald) 커플링에 의한, 제 1 항, 제 6 항 및 제 12 항 중 어느 한 항에 따른 화합물의 제조 방법.

청구항 14

이탈기 함유 플루오렌 유도체와 (1) Ar^2-NH_2 및 (2) NH_2-Ar^1 의 단계적 반응의 2-단계 부흐발트 커플링에 의한, 제 1 항, 제 6 항 및 제 12 항 중 어느 한 항에 따른 화합물의 제조 방법.

청구항 15

제 1 항, 제 6 항 및 제 12 항 중 어느 한 항에 따른 화합물의 제조 방법으로서, 화합물이 벤조크로멘-6-온으로부터 제조되는 것을 특징으로 하는 방법.

청구항 16

제 15 항에 있어서, 하기 단계를 포함하는 방법:

a) 유기금속 화합물을 벤조크로멘-6-온에 첨가하는 단계, 이어서

b) 산-촉매 고리화반응시켜, 4-히드록시플루오렌 유도체를 수득하는 단계, 이어서

c) 플루오렌의 4 위치의 히드록실기를 이탈기로 전환시키는 단계, 이어서

d) 플루오렌을 목적하는 생성물로 전환시키는 단계.

청구항 17

제 1 항, 제 6 항 및 제 12 항 중 중 어느 한 항에 따른 하나 이상의 화합물을 함유하는 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머로서, 여기서 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머에의 결합(들)이 화학식 (2a) 내 R^1 내지 R^3 및 R^6 으로 치환된 임의의 목적하는 위치에 편재화될 수 있는 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머.

청구항 18

제 1 항, 제 6 항 및 제 12 항 중 어느 한 항에 따른 하나 이상의 화합물, 또는 하나 이상의 상기 화합물을 함유하는 하나 이상의 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머, 및 형광 발광체, 인광 발광체, 호스트 물질, 매트릭스 물질, 전자-수송 물질, 전자-주입 물질, 정공-전도체 물질, 정공-주입 물질, 전자-차단 물질, 정공-차단 물질 및 p-도펀트로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 추가 물질을 포함하는 조성물.

청구항 19

제 1 항, 제 6 항 및 제 12 항 중 어느 한 항에 따른 하나 이상의 화합물, 또는 하나 이상의 상기 화합물을 함유하는 하나 이상의 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머, 또는 하나 이상의 상기 화합물 또는 하나 이상의 상기 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머 및 하나 이상의 추가 물질을 포함하는 하나 이상의 조성물, 및 하나 이상의 용매를 포함하는 제형.

청구항 20

제 1 항, 제 6 항 및 제 12 항 중 어느 한 항에 있어서, 화합물이 전자 소자에 사용되는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 21

제 1 항, 제 6 항 및 제 12 항 중 어느 한 항에 따른 하나 이상의 화합물, 또는 하나 이상의 상기 화합물을 함유하는 하나 이상의 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머, 또는 하나 이상의 상기 화합물 또는 하나 이상의 상기 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머 및 하나 이상의 추가 물질을 포함하는 하나 이상의 조성물을 포함하는 전자 소자.

청구항 22

제 21 항에 있어서, 유기 집적 회로 (OIC), 유기 전계-효과 트랜지스터 (OFET), 유기 박막 트랜지스터 (OTFT), 유기 전계발광 소자, 유기 태양 전지 (OSC), 유기 광검출기, 유기 광수용체로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 전자 소자.

청구항 23

제 21 항에 있어서, 또한 유기 발광 트랜지스터 (OLET), 유기 전계-켄치 소자 (OFQD), 유기 발광 전기화학 전지 (OLEC, LEC, LEEC), 유기 레이저 다이오드 (O-laser) 및 유기 발광 다이오드 (OLED) 로 이루어진 군으로부터 선택되는 유기 전계발광 소자인 것을 특징으로 하는 전자 소자.

청구항 24

제 21 항에 있어서, 상기 화합물, 또는 상기 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머, 또는 상기 조성물이

- 정공-수송 또는 정공-주입층에서 정공-수송 물질로서,
- 발광층에서 매트릭스 물질로서,
- 전자-차단 물질로서,
- 여기자-차단 물질로서

의 기능 중 하나 이상에 사용되는 것을 특징으로 하는 전자 소자.

청구항 25

제 21 항에 따른 전자 소자의 제조 방법으로서, 하나 이상의 유기층이 기체상 증착에 의해 또는 용액으로부터 적용되는 것을 특징으로 하는 방법.

청구항 26

제 23 항에 있어서, 의료용 광선요법에 사용되는 전자 소자.

청구항 27

제 23 항에 있어서, 미용 분야에 사용되는 전자 소자.

청구항 28

제 23 항에 있어서, 디스플레이 또는 조명에 사용되는 전자 소자.

청구항 29

제 17 항에 있어서, 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머가 전자 소자에 사용되는 것을 특징으로 하는 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머.

발명의 설명

기 술 분 야

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

배 경 기 술

[0002] 전자 소자에 사용되는 기능성 화합물의 개발은 현재 주요 연구 대상이다. 여기서 목적은, 특히, 이러한 화합물을 이용하여, 예를 들어 전력 효율, 수명 또는 발광된 광의 색좌표와 같은 하나 이상의 관련 측면에서, 전자 소자의 개선된 특성을 달성할 수 있는 화합물을 개발하는 것이다.

[0003] 본 발명에 있어서 용어 전자 소자는, 특히, 유기 집적 회로 (OIC), 유기 전계-효과 트랜지스터 (OFET), 유기 박막 트랜지스터 (OTFT), 유기 발광 트랜지스터 (OLET), 유기 태양 전지 (OSC), 유기 광검출기, 유기 광수용체, 유기 전계-켄치 소자 (OFQD), 유기 발광 전기화학 전지 (OLEC), 유기 레이저 다이오드 (O-laser) 및 유기 전계 발광 소자 (OLED) 를 의미하는 것으로 의도된다.

[0004] OLED 로서 지칭되는 마지막에 언급된 전자 소자에 사용되는 화합물을 제공하는 것에 특히 관심이 있다. OLED 의 일반 구조 및 이의 기능적 원리는 당업자에게 널리 공지되어 있고, 특히 US 4539507, US 5151629, EP 0676461 및 WO 1998/27136 에 기재되어 있다.

[0005] 특히 광범위한 상업적 용도를 고려하여, 예를 들어 디스플레이 소자에서 또는 광원으로서의, OLED 의 성능 데이터에 대한 추가적인 개선이 여전히 요구되고 있다. 이러한 측면에서 특히 중요한 것은, OLED 의 수명, 효율 및 작동 전압 및 달성되는 색도 (colour value) 이다. 또한, 전자 소자에서 기능성 물질로서 사용되는 화합물로는 높은 열 안정성 및 높은 유리 전이 온도를 갖고, 분해되지 않으면서 승화될 수 있는 것이 바람직하다.

[0006] 이러한 측면에서, 특히, 대안적인 정공-수송 물질이 요구된다. 선행 기술에 따른 정공-수송 물질의 경우, 전압은 일반적으로 정공-수송층의 층 두께가 증가함에 따라 증가한다. 실질적으로, 정공-수송층의 층 두께가 두꺼울수록 흔히 바람직하지만, 이는 종종 보다 높은 작동 전압 및 보다 저하된 성능 데이터의 결과를 초래한다. 이러한 측면에서, 작동 전압은 단지 약간 증가하면서 보다 두꺼운 정공-수송층의 달성을 가능하게 하는, 높은 전하-캐리어 이동도를 갖는 신규한 정공-수송 물질이 요구된다.

[0007] 선행 기술에는 전자 소자 및 전계발광 소자에서 전하-수송 물질로서의 각종 플루오렌의 용도가 기재되어 있다.

[0008] WO 2011/055493 에는 3 위치에서 플루오렌으로 다중치환된 2차 아민이 개시되어 있다.

[0009] JP 2008-34701 및 WO 2007/072952 에는 4 위치에서 아민기로 치환된 플루오렌으로서, 여기서 아민기 그 자체가 마찬가지로 다수의 플루오렌을 함유하는 플루오렌이 개시되어 있다.

[0010] WO 2010/110553 에는 2, 3 또는 4 위치에서 아민기로 치환된 플루오렌으로서, 여기서 아민기가 카르바졸기를 함유하는 플루오렌이 개시되어 있다.

[0011] JP 05303221 에는 2 또는 4 위치에서 아민기로 치환될 수 있는 플루오렌이 개시되어 있다. 플루오렌의 4 위치에서 아민기를 함유하는 화합물은 페닐 라디칼을 함유한다. 상기 화합물은 광수용체로서 이용된다.

[0012] 이러한 널리 공지된 화합물에도 불구하고, OLED 에 사용되는 신규한 정공-수송 및 정공-주입 물질이 지속적으로 요구되고 있다. 특히, OLED 의 성능 데이터 및 특성에 있어서 상기 언급된 매우 바람직한 개선을 달성할 수 있는 물질이 요구되고 있다.

[0013] 마찬가지로, OLED 및 기타 전자 소자에 사용되는 신규한 매트릭스 물질이 요구되고 있다. 특히, 바람직하게는 전자 소자의 우수한 효율, 긴 수명 및 낮은 작동 전압을 유도하는, 인광 도펀트용 매트릭스 물질 및 혼합-매트릭스 시스템용 매트릭스 물질이 요구되고 있다.

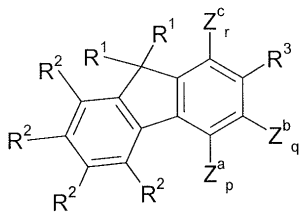
발명의 내용

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0014] 따라서, 본 발명은 전계발광 소자, 및 전계발광 소자, 예를 들어 형광 또는 인광 OLED 에 사용하기에 적합하고, 특히, 정공-수송 또는 여기자-차단층에서 정공-수송 물질 및/또는 정공-주입 물질로서 또는 발광층에서 매트릭스 물질로서 이용될 수 있는 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.

[0015] 본 발명을 통해, 놀랍게도, 하기 제시되는 화학식 (1) 의 화합물이 전자 소자 및 특히 전계발광 소자에서 상기 언급된 용도로서 매우 적합하다는 것을 발견하였다.

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



화학식 (1)

[0017]

[0018] [식 중, 사용된 기호 및 지수에는 하기가 적용됨:

[0019] R^1 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 바람직하게는 동일하게, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, NO_2, $P(=O)(R^4)_2$, $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 2 내지 20 개의 C 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (여기서 상기 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, C=O, C=S, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, $P(=O)(R^4)$, -O-, -S-, SO 또는 SO_2 로 대체될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 로 대체될 수 있음), 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬기 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 2 개의 라디칼 R^1 은 서로 연결되어 고리를 형성하여, 플루오렌의 9 위치에 스피로 화합물을 형성할 수 있고, 단 스피로바이플루오렌은 제외되고;

[0020] R^2, R^3 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 바람직하게는 동일하게, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, NO_2, $P(=O)(R^4)_2$, $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, $N(R^4)_2$, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 2 내지 20 개의 C 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (여기서 상기 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, C=O, C=S, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$

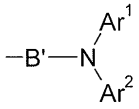
, $-C(=O)NR^4-$, $P(=O)(R^4)$, -O-, -S-, SO 또는 SO_2 로 대체될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 로 대체될 수 있음), 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬기 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 둘 이상의 라디칼 R^2 또는 둘 이상의 라디칼 R^3 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고;

[0021] R^4 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^5$, CN, $Si(R^5)_3$, NO_2, $P(=O)(R^5)_2$, $S(=O)R^5$, $S(=O)_2R^5$, $N(R^5)_2$, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 2 내지 20 개의 C 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (여기서 상기 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼 R^5 로 치환될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^5C=CR^5-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^5)_2$, C=O, C=S, $C=NR^5$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^5-$, $P(=O)(R^5)$, -O-, -S-, SO 또는 SO_2 로 대체될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 로 대체될 수 있음), 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^5 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^5 로 치환될 수 있음) 이고;

[0022] R^5 는 H, D, F, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 지방족 탄화수소 라디칼 또는 5 내지 30 개의 C 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (여기서 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 로 대체될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기 R^5 는 서로 함께 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 고리 시스템을 형성할 수 있고;

[0023] p, q, r 은 0 또는 1 이고, 여기서 p + q + r = 1 이고, 바람직하게는 p = 1 또는 r = 1 이고, 매우 바람직하게는 p = 1 이고;

[0024] Z^a_0, Z^b_0, Z^c_0 는, 각각의 경우 동일하거나 상이하게, R^3 이고;

[0025] Z^a_1, Z^b_1, Z^c_1 는  이고;

[0026] B' 는 6 내지 30 개의 고리 원자를 갖는 아릴렌기 또는 5 내지 30 개의 고리 원자를 갖는 헤테로아릴렌기 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고;

[0027] 바람직하게는 B' 는 6 내지 30 개의 고리 원자를 갖는 아릴렌기 또는 5 내지 30 개의 고리 원자를 갖는 모노- 또는 바이시클릭 헤테로아릴렌기 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고,

[0028] 매우 바람직하게는 페닐렌, 바이페닐렌, 테르페닐렌, 나프틸렌, 피리디닐렌, 피리미디닐렌, 피라지닐렌, 피리다지닐렌, 트리아지닐렌, 플루오레닐렌, 디벤조푸라닐렌 또는 디벤조티오페닐렌기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고,

[0029] 특히 바람직하게는 페닐렌, 바이페닐렌, 테르페닐렌, 나프틸렌, 디벤조푸라닐렌 또는 디벤조티오페닐렌기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고,

[0030] 매우 특히 바람직하게는 B' 는 페닐렌기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고,

[0031] 특히 바람직하게는 B' 는 미치환 페닐렌기이고;

[0032] Ar^1, Ar^2 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 6 내지 60 개의 고리 원자를 갖는 방향족기 또는 5 내지 60 개의 고리 원자를 갖는 헤테로방향족기 (이들은 각각 서로 동일하거나 상이한 하나 이상의 라디칼 R^6 으로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 2 개의 기 Ar^1 및 Ar^2 중 하나 이상은 플루오렌기를 함유해야 하고;

[0033] 여기서 Ar^1 내 2 개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리 또는 Ar^2 내 2 개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 부가적으로 축합될 수 있으나, 바람직하게는 부가적인 축합이 존재하지 않고;

[0034] 여기서 Ar^1 내 2 개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 부가적으로 2가 기 -O-, -S-, $C(R^6)_2$ 또는 $-Si(R^6)_2-$ 에 의해 브릿지될 수 있거나 (여기서 -O-, $C(R^6)_2$ 또는 $-Si(R^6)_2-$ 를 통한 브릿징이 바람직함), 또는 Ar^2 내 2 개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 2가 기 -O-, -S-, $C(R^6)_2$ 또는 $-Si(R^6)_2-$ 에 의해 브릿지될 수 있고 (여기서 -O-, $C(R^6)_2$ 또는 $-Si(R^6)_2-$ 를 통한 브릿징이 바람직함), 여기서 Ar^1 내 고리의 부가적인 브릿징이 존재하지 않고, Ar^2 내 고리의 부가적인 브릿징이 존재하지 않는 경우가 매우 바람직하고;

[0035] 여기서 -O- 에 의한 Ar^1 및 Ar^2 내 고리의 브릿징은, 예를 들어, 디벤조푸란이 형성된다는 것을 의미하고; 따라서, -S- 에 의한 브릿징은, 예를 들어, 디벤조티오펜을 형성할 수 있고; $C(R^6)_2$ 에 의한 브릿징은, 예를 들어, 추가의 플루오렌기 또는 인데노플루오렌기의 형성을 유도할 수 있고; 페닐플루오렌이 기 $C(R^6)_2$ 에 의해 브릿지되는 경우 인데노플루오렌기가 형성될 수 있고;

[0036] Ar^1 로부터의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 2가 기 -O-, -S-, $-Si(R^6)_2-$, $-NR^6-$ 또는 $-C(R^6)_2-$ 에 의해 Ar^2 로부터의 방향족 또는 헤테로방향족 고리에 브릿지될 수 있고, 여기서 기 Ar^1 이 기 Ar^2 에 브릿지되지 않는 것이 바람직하고;

[0037] 여기서 Ar^1 및 Ar^2 는 둘 이상의 방향족 또는 헤테로방향족 고리를 함유하는 것이 더욱 바람직하고;

[0038] R^6 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^5$, CN, $Si(R^5)_3$, NO_2, $P(=O)(R^5)_2$, $S(=O)R^5$, $S(=O)_2R^5$, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 2 내지 20 개의 C 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (여기서 상기 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼 R^5 로 치환될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^5C=CR^5-$, -C≡C-, $Si(R^5)_2$, C=O, C=S, $C=NR^5$, -C(=O)O-, $-C(=O)NR^5-$, $P(=O)(R^5)$, -O-, -S-, SO 또는 SO_2 로 대체될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 로 대체될 수 있음), 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^5 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^5 로 치환될 수 있음) 임].

[0039] 상기 정의는, 본 발명에 따른 화학식 (1) 의 화합물이, 각각의 경우, 기 Ar^1 또는 기 Ar^2 내에 하나 이상의 플루오렌기를 함유한다는 것을 명백하게 한다. 따라서, 기 Ar^1 및 Ar^2 의 정의에서 상기 부가 "부가적으로" 는, 기 Ar^1 및 Ar^2 내 필수적인 하나 이상의 플루오렌기가 Ar^1 및 Ar^2 내 브릿지되지 않은 고리의 바람직한 구현예에서 제외되며, 즉, 화학식 (1) 의 화합물이 각각의 경우 Ar^1 또는 Ar^2 내에 하나 이상의 플루오렌기를 함유한다는 것을 분명하게 한다.

[0040] 바람직한 구현예에서, Ar^1 및 Ar^2 는 둘 모두 각각 플루오렌기를 함유한다.

[0041] 일반식 (1) 의 화합물에 있어서, 기 Ar^1 및 Ar^2 내에 카르바졸을 함유하지 않는 것이 매우 바람직하고, 일반식

(1) 의 화합물이 카르바졸을 절대로 함유하지 않는 것이 보다 더욱 바람직하다.

[0042] 본 발명의 매우 바람직한 구현예에서, 2 개의 기 Ar^1 및 Ar^2 중 단지 하나만 플루오렌기를 함유한다.

[0043] 보다 바람직한 구현예에서, 화학식 (1) 의 화합물은 12 개 초과의 연결된 방향족 고리 원자를 갖는 벤즈어닐링된 (benzannelated) 페닐을 함유하지 않는다. 본 출원에서 벤즈어닐링된 페닐은 둘 이상의 벤젠의 축합에 의해 수득되는 기를 의미하는 것으로 의도된다. 이에는, 예를 들어, 나프탈릴, 안트라세닐, 테트라세닐, 펜타세닐 및 피레닐기가 포함된다.

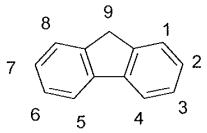
[0044] 보다 바람직한 구현예에서, 화학식 (1) 의 화합물은 13 개 초과의 연결된 고리 원자를 갖는 축합된 방향족기를 함유하지 않는다.

[0045] 화학식 (1) 의 화합물은 13 개 초과의 연결된 고리 원자를 갖는 축합된 방향족기를 함유하지 않고, 13 개 초과의 연결된 고리 원자를 갖는 축합된 헤테로방향족기를 함유하지 않는 것이 더욱 바람직하고, 여기서 일반식 (1) 의 화합물은 축합된 방향족 또는 헤테로방향족기를 절대로 함유하지 않는 것이 보다 더욱 바람직하다.

[0046] 여기서 화학식 (1) 의 화합물 내 플루오렌은 축합된 방향족기 중에 포함되지 않는데, 이는 2 개의 페닐이 하나의 지방족 고리 상에 축합되어 있기 때문이다.

[0047] 본 출원에서 연결된 고리 원자는 고리 결합을 통해 서로 배타적으로 연결된 원자를 의미하는 것으로 의도된다.
이러한 측면에서, 2-페닐나프탈렌은 6 개의 연결된 고리 원자를 갖는 하나의 고리 (페닐 고리) 및 10 개의 연결된 고리 원자를 갖는 하나의 고리를 함유한다. 따라서, 2-페닐나프탈렌은 최대 10 개의 연결된 고리 원자를 함유한다. 따라서, 2-나프틸안트라센은 14 개의 연결된 고리 원자를 함유한다.

[0048] 플루오렌 상의 번호매기기는 하기와 같이 정의된다.

[0049] 

[0050] 본 발명의 의미에서 아릴기 (방향족기) 는 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 함유하고; 본 발명의 의미에서 헤테로아릴기 (헤테로방향족기) 는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자 (이 중 하나 이상은 헤테로원자임) 를 함유한다. 상기 헤테로원자는 바람직하게는 N, O 및 S 로부터 선택된다. 이는 기본적인 정의를 나타낸다.
예를 들어 방향족 고리 원자의 수 또는 헤테로원자의 존재에 관하여, 본 발명의 명세서에서 다른 바람직한 것이 제시되는 경우에는, 이것이 적용된다.

[0051] 여기서, 아릴기 또는 헤테로아릴기는 단순 방향족 고리, 즉 벤젠, 또는 단순 헤테로방향족 고리, 예를 들어 피리딘, 피리미딘 또는 티오펜, 또는 축합된 (애널레이트된) 방향족 또는 헤테로방향족 폴리사이클, 예를 들어 나프탈렌, 페난트렌, 퀴놀린 또는 카르바졸을 의미하는 것으로 의도된다. 본 출원의 의미에서 축합된 (애널레이트된) 방향족 또는 헤테로방향족 폴리사이클은 서로 축합된 둘 이상의 단순 방향족 또는 헤테로방향족 고리로 이루어진다.

[0052] 아릴 또는 헤테로아릴기 (이는 각각의 경우 상기 언급된 라디칼로 치환될 수 있고, 임의의 목적하는 위치를 통해 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템에 연결될 수 있음) 는, 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, 나프티미다졸, 페난트리미다졸, 피리디미다졸, 피라진이미다졸, 퀴녹살린이미다졸, 옥사졸, 벤즈옥사졸, 나프트옥사졸, 안트록사졸, 페난트록사졸, 이속사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴녹살린, 피라진, 페나진, 나프티리딘, 아자카르바졸, 벤조카르볼린, 페난트롤린, 1,2,3-트리아졸, 1,2,4-트리아졸, 벤조트리아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아졸, 1,2,5-옥사디아졸, 1,3,4-옥사디아졸, 1,2,3-티아디아졸, 1,2,4-티아디아졸, 1,2,5-티아디아졸, 1,3,4-티아디아졸, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 1,2,3-트리아진, 테트라졸, 1,2,4,5-테트라진, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,3,5-테트라진, 퓨린, 프테리딘, 인돌리진 및 벤조티아디아졸에서 유래된 기를 의미하는 것으로 의도된다.

[0053] 본 발명의 정의에 따른 아릴옥시기는 산소 원자를 통해 결합된, 상기 정의된 바와 같은, 아릴기를 의미하는 것으로 의도된다. 유사한 정의가 헤테로아릴옥시기에도 적용된다.

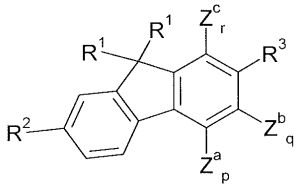
[0054] 본 발명의 의미에서 방향족 고리 시스템은 고리 시스템 내에 6 내지 60 개의 C 원자를 함유한다. 본 발명의 의미에서 헤테로방향족 고리 시스템은 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 함유하고, 상기 고리 원자 중 하나 이상은 헤테로원자이다. 상기 헤테로원자는 바람직하게는 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 본 발명의 의미에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 반드시 아릴 또는 헤테로아릴기만을 함유하는 것이 아니라, 또한, 다수의 아릴 또는 헤테로아릴기가 비(非)방향족 단위 (바람직하게는 10% 미만의 H 이외의 원자), 예를 들어, sp^3-혼성화된 C, Si, N 또는 O 원자, sp^2-혼성화된 C 또는 N 원자 또는 sp-혼성화된 C 원자에 의해 연결될 수 있는 시스템을 의미하는 것으로 의도된다. 따라서, 예를 들어, 9,9'-스피로바이플루오렌, 9,9'-디아릴플루오렌, 트리아릴아민, 디아릴 에테르, 스틸벤 등과 같은 시스템은 또한 본 발명의 의미에서 방향족 고리 시스템을 의미하는 것으로 의도되며, 둘 이상의 아릴기가, 예를 들어 선형 또는 시클릭 알킬, 알케닐 또는 알키닐기 또는 실릴기에 의해 연결되는 시스템도 마찬가지이다. 나아가, 둘 이상의 아릴 또는 헤테로아릴기가 단일 결합을 통해 서로 연결되는 시스템은 또한 본 발명의 의미에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 간주되며, 예를 들어 바이페닐, 테르페닐 또는 디페닐트리아진과 같은 시스템이다.

[0055] 5 - 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 또한 상기 정의된 바와 같은 라디칼로 치환될 수 있고, 임의의 목적하는 위치를 통해 방향족 또는 헤테로방향족기에 연결될 수 있음) 은, 특히, 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센, 페난트렌, 벤조페난트렌, 피렌, 크리센, 페릴렌, 플루오란텐, 나프타센, 펜타센, 벤조피렌, 바이페닐, 바이페닐렌, 테르페닐, 테르페닐렌, 쿼테르페닐, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 디히드로페난트렌, 디히드로피렌, 테트라히드로피렌, 시스- 또는 트랜스-인데노플루오렌, 트룩센, 이소트룩센, 스피로트룩센, 스피로이소트룩센, 푸란, 벤조푸란, 이소벤조푸란, 디벤조푸란, 티오펜, 벤조티오펜, 이소벤조티오펜, 디벤조티오펜, 피롤, 인돌, 이소인돌, 카르바졸, 인돌로카르바졸, 인데노카르바졸, 피리딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 아크리딘, 페난트리딘, 벤조-5,6-퀴놀린, 벤조-6,7-퀴놀린, 벤조-7,8-퀴놀린, 페노티아진, 페녹사진, 피라졸, 인다졸, 이미다졸, 벤즈이미다졸, 나프티미다졸, 페난트리미다졸, 피리디미다졸, 피라진이미다졸, 퀴녹살린이미다졸, 옥사졸, 벤즈옥사졸, 나프톡사졸, 안트록사졸, 페난트록사졸, 이속사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴녹살린, 1,5-디아자안트라센, 2,7-디아자피렌, 2,3-디아자피렌, 1,6-디아자피렌, 1,8-디아자피렌, 4,5-디아자피렌, 4,5,9,10-테트라아자페릴렌, 피라진, 페나진, 페녹사진, 페노티아진, 플루오루빈, 나프티리딘, 아자카르바졸, 벤조카르볼린, 페난트롤린, 1,2,3-트리아졸, 1,2,4-트리아졸, 벤조트리아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아졸, 1,2,5-옥사디아졸, 1,3,4-옥사디아졸, 1,2,3-티아디아졸, 1,2,4-티아디아졸, 1,2,5-티아디아졸, 1,3,4-티아디아졸, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 1,2,3-트리아진, 테트라졸, 1,2,4,5-테트라진, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,3,5-테트라진, 퓨린, 프테리딘, 인돌리진 및 벤조티아디아졸, 또는 상기 기들의 조합에서 유래된 기를 의미하는 것으로 의도된다.

[0056] 본 발명의 목적을 위하여, 1 내지 40 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 40 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 또는 2 내지 40 개의 C 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (여기서, 또한 각각의 H 원자 또는 CH_2 기는 상기 라디칼의 정의 하에서 상기 언급된 기로 치환될 수 있음) 는, 바람직하게는 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 옥티닐 라디칼을 의미하는 것으로 의도된다. 1 내지 40 개의 C 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 의도된다.

[0057] 화학식 (1) 의 화합물에서 B' 는 더욱 바람직하게는 o-페닐렌, m-페닐렌 또는 p-페닐렌기, 1,4-나프틸렌, 2,4-나프틸렌, 1,5-나프틸렌 또는 2,6-나프틸렌기, 2,8-디벤조푸라닐렌기 또는 2,8-디벤조티오페닐렌기, 또는 2,7-플루오렌기이고, B' 는 매우 바람직하게는 o-페닐렌, m-페닐렌 또는 p-페닐렌기이고, B' 는 특히 바람직하게는 p-페닐렌기이고, 여기서 상기 기들은 각각의 경우 동일하거나 상이할 수 있는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있고, 상기 기들은 바람직하게는 미치환된다.

[0058] 본 발명의 목적을 위하여, 일반식 (2) 의 화합물이 바람직한 것으로 제시된다:



화학식 (2)

[0059]

[0060] [식 중, 사용된 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용됨].

[0061] 나아가, R^1 이, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 바람직하게는 동일하게, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시기 (여기서 상기 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬기 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 2 개의 라디칼 R^1 이 서로 연결되어 고리를 형성하여, 플루오렌의 9 위치에 스피로 화합물을 형성할 수 있고, 단 스피로바이플루오렌은 제외되는 것을 특징으로 하는, 일반식 (1) 또는 (2) 의 화합물이 바람직하다.

[0062] 나아가, R^1 이, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 바람직하게는 동일하게, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 (여기서 상기 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 2 개의 라디칼 R^1 이 서로 연결되어 고리를 형성하여, 플루오렌의 9 위치에 스피로 화합물을 형성할 수 있고, 단 스피로바이플루오렌은 제외되는 것을 특징으로 하는, 일반식 (1) 또는 (2) 의 화합물이 특히 바람직하다.

[0063] 나아가, R^1 이, 각각의 경우, 동일하게, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 (여기서 상기 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 인 것을 특징으로 하고, 여기서 특히 바람직하게는 R^1 이 메틸, 에틸, n-/i-프로필 또는 n-/i-/t-부틸기인, 일반식 (1) 또는 (2) 의 화합물이 매우 특히 바람직하다.

[0064] 나아가, 최종적으로, R^1 이, 각각의 경우, 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 인 것을 특징으로 하고, 여기서 고리 시스템은 특히 바람직하게는 페닐, 바이페닐, 테르페닐 또는 피리딜기로 이루어진 군으로부터 선택되는, 일반식 (1) 또는 (2) 의 화합물이 매우 특히 바람직하다.

[0065] 플루오렌의 9 위치에 위치된 2 개의 라디칼 R^1 은 동일하거나 상이할 수 있고, 여기서 이들이 동일한 것이 바람직하다.

[0066] 나아가, R^2 가, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 바람직하게는 동일하게, H, D, F, Cl, Br, I, $N(R^5)_2$, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알

킬 또는 알콕시기 또는 2 내지 20 개의 C 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (여기서 상기 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 로 대체될 수 있음), 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬기 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 라디칼 R^2 가 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있는 것을 특징으로 하는, 일반식 (1) 또는 (2) 의 화합물이 바람직하다.

[0067] 나아가, R^2 가, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 바람직하게는 동일하게, H, D, F, Cl, Br, I, $N(R^5)_2$, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 (여기서 상기 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 로 대체될 수 있음), 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는, 일반식 (1) 또는 (2) 의 화합물이 특히 바람직하다.

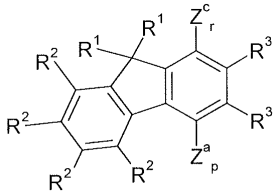
[0068] 매우 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 R^2 가 H 인 것을 특징으로 하는 일반식 (1) 의 화합물에 관한 것이다.

[0069] 보다 매우 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 R^2 가 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기인 것을 특징으로 하는 일반식 (1) 의 화합물에 관한 것이다.

[0070] 보다 더 매우 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 R^2 가 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내는 것을 특징으로 하는 일반식 (1) 의 화합물에 관한 것이다.

[0071] 나아가, R^3 이, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, $N(R^5)_2$, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시기 (여기서 상기 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 로 대체될 수 있음), 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬기 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 라디칼 R^3 이 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있는 것을 특징으로 하는, 일반식 (1) 또는 (2) 의 화합물이 바람직하다.

[0072] 본 발명의 목적을 위하여, 일반식 (1a) 의 화합물이 바람직한 것으로 제시된다:

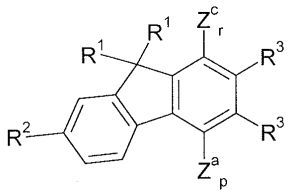


화학식 (1a)

[0073]

[0074] [식 중, 사용된 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용되고, 본원에 기재된 바람직한 구현예가 적용됨].

[0075] 본 발명의 목적을 위하여, 일반식 (2a) 의 화합물이 특히 바람직한 것으로 제시된다:

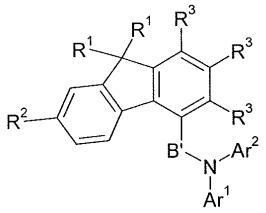


화학식 (2a)

[0076]

[0077] [식 중, 사용된 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용되고, 본원에 기재된 바람직한 구현예가 적용됨].

[0078] 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (3) 의 화합물에 관한 것이다:

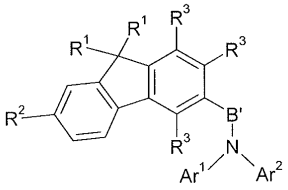


화학식 (3)

[0079]

[0080] [식 중, 사용된 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용됨].

[0081] 보다 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (4) 의 화합물에 관한 것이다:



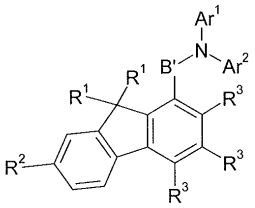
화학식 (4)

[0082]

[0083] [식 중, 사용된 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용됨].

[0084] 기 Ar^1 및 Ar^2 를 함유하는 아민이 플루오렌의 3 위치에 위치하는 경우, 기 Ar^1 또는 기 Ar^2 는 산소를 통한 브릿징을 갖지 않는 것이 특히 바람직한데, 이는 OLED 에서 이러한 화합물의 사용이 특히 유리한 성능 데이터를 유도하기 때문이다.

[0085] 보다 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (5) 의 화합물에 관한 것이다:

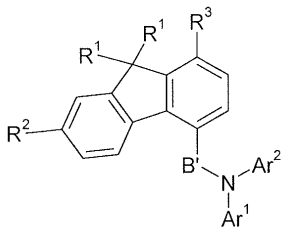


화학식 (5)

[0086]

[0087] [식 중, 사용된 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용됨].

[0088] 매우 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (6) 의 화합물에 관한 것이다:

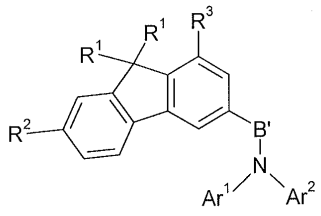


화학식 (6)

[0089]

[0090] [식 중, 사용된 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용됨].

[0091] 보다 매우 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (7) 의 화합물에 관한 것이다:

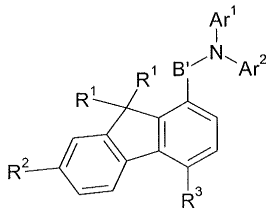


화학식 (7)

[0092]

[0093] [식 중, 사용된 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용됨].

[0094] 보다 매우 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (8) 의 화합물에 관한 것이다:

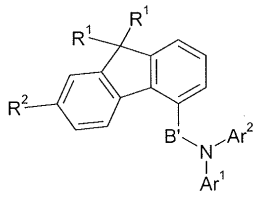


화학식 (8)

[0095]

[0096] [식 중, 사용된 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용됨].

[0097] 매우 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (9) 의 화합물에 관한 것이다:

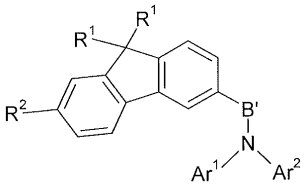


화학식 (9)

[0098]

[0099] [식 중, 사용된 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용됨].

[0100] 보다 매우 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (10) 의 화합물에 관한 것이다:

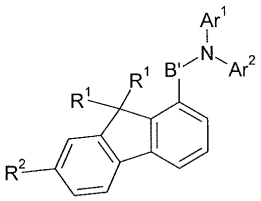


화학식 (10)

[0101]

[0102] [식 중, 사용된 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용됨].

[0103] 보다 매우 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (11) 의 화합물에 관한 것이다:

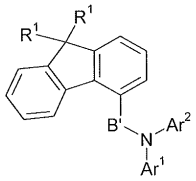


화학식 (11)

[0104]

[0105] [식 중, 사용된 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용됨].

[0106] 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (12) 의 화합물에 관한 것이다:

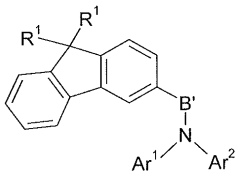


화학식 (12)

[0107]

[0108] [식 중, 사용된 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용됨].

[0109] 더욱 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (13) 의 화합물에 관한 것이다:

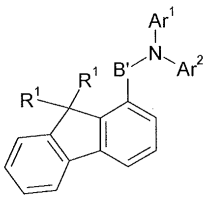


화학식 (13)

[0110]

[0111] [식 중, 사용된 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용됨].

[0112] 더욱 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 일반식 (14) 의 화합물에 관한 것이다:

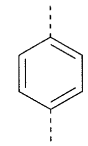


화학식 (14)

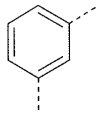
[0113]

[0114] [식 중, 사용된 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용됨].

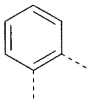
[0115] 나아가, 화학식 (1) 내지 (14) 의 화합물에 있어서, B' 가 화학식 (15) 내지 (36b) 의 기 (여기서 이러한 기들은 또한 서로 독립적인 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 로부터 선택되고, R^4 가 상기 제시된 바와 같이 정의되는 것이 바람직하다:



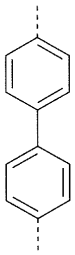
화학식 (15)



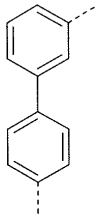
화학식 (16)



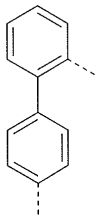
화학식 (17)



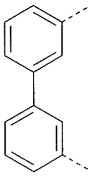
화학식 (18)



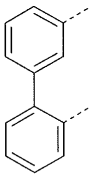
화학식 (19)



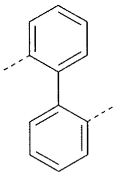
화학식 (20)



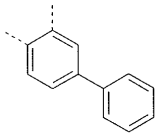
화학식 (21)



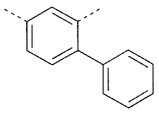
화학식 (22)



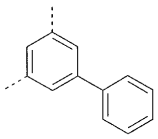
화학식 (23)



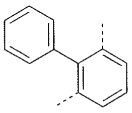
화학식 (24)



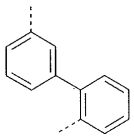
화학식 (25)



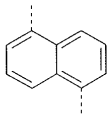
화학식 (26)



화학식 (27)

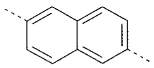


화학식 (28)

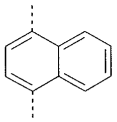


화학식 (29)

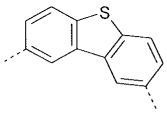
[0116]



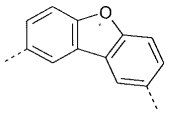
화학식 (30)



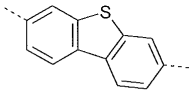
화학식 (31)



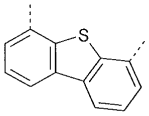
화학식 (32)



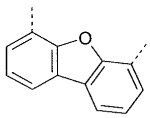
화학식 (33)



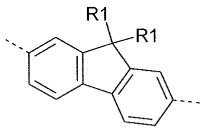
화학식 (34)



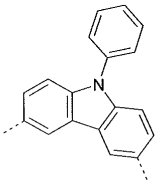
화학식 (35)



화학식 (36)



화학식 (36a)



화학식 (36b)

[0117]

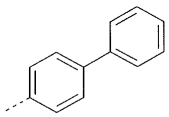
[0118] [식 중, 점선은 연결 위치를 나타냄].

[0119] 상기 제시된 화학식 (1) 내지 (14) 의 화합물에 있어서, B' 가 화학식 (15) 내지 (36b) 의 기로부터 선택되는 것이 특히 바람직하고, 여기서 매우 특히 바람직한 구현예에서, 이러한 기들은 미치환된다.

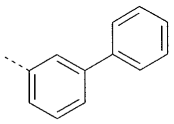
[0120] 화학식 (1) 내지 (14) 의 화합물에 있어서, B' 가 화학식 (15) 내지 (17) 의 기 (여기서 이러한 기들은 바람직하게는 미치환됨) 에 해당하는 것이 매우 특히 바람직하다.

[0121] Ar^1 및 Ar^2 는 바람직하게는 페닐, 페닐피리딜, 페닐나프틸, 바이페닐, 테르페닐 또는 쿼테르페닐기 (이는 서로 동일하거나 상이할 수 있는 하나 이상의 라디칼 R^6 으로 치환될 수 있음) 로부터 선택되고, Ar^1 내 2 개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 부가적으로 2가 기 -O-, -S-, $C(R^6)_2$ 또는 $-Si(R^6)_2-$ 에 의해 브릿지될 수 있거나 또는 Ar^2 내 2 개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 부가적으로 2가 기 -O-, -S-, $C(R^6)_2$ 또는 $-Si(R^6)_2-$ 에 의해 브릿지될 수 있고, 여기서 부가적인 브릿징이 존재하지 않는 경우가 바람직하고, 여기서 Ar^1 로부터의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 2가 기 -O-, -S-, $-Si(R^6)_2-$, $-NR^6-$ 또는 $-C(R^6)_2-$ 에 의해 Ar^2 로부터의 방향족 또는 헤테로방향족 고리에 브릿지될 수 있고, 여기서 브릿지되지 않은 기 Ar^1 및 Ar^2 가 바람직하고, 여기서 2 개의 기 Ar^1 및 Ar^2 중 하나 이상은 플루오렌기를 함유한다.

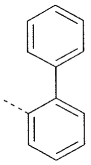
[0122] 본 발명의 매우 바람직한 구현예에서, Ar^1 및 Ar^2 는 하기 화학식 (37) 내지 (122g) 의 기 (이들은 하나 이상의 라디칼 R^6 으로 치환될 수 있음) 로부터 선택되고, 여기서 2 개의 기 Ar^1 및 Ar^2 중 하나 이상은 플루오렌기를 함유한다:



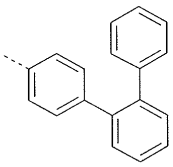
화학식 (37)



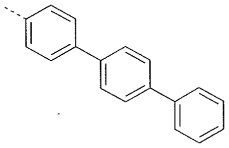
화학식 (38)



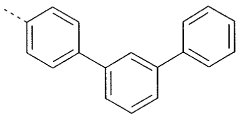
화학식 (39)



화학식 (40)

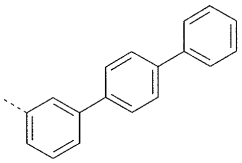


화학식 (41)

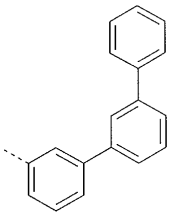


화학식 (42)

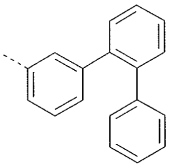
[0123]



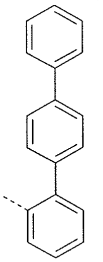
화학식 (43)



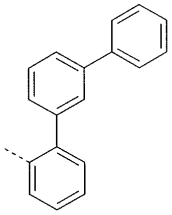
화학식 (44)



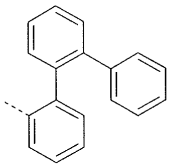
화학식 (45)



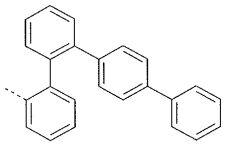
화학식 (46)



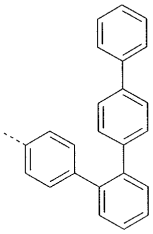
화학식 (47)



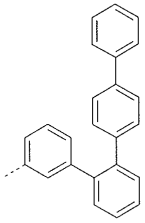
화학식 (48)



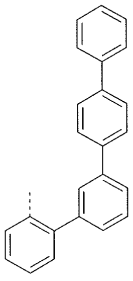
화학식 (49)



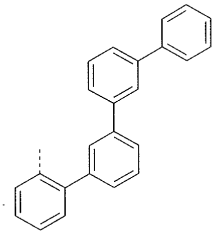
화학식 (50)



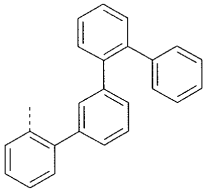
화학식 (51)



화학식 (52)

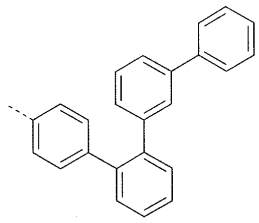


화학식 (53)

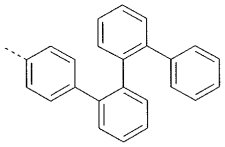


화학식 (54)

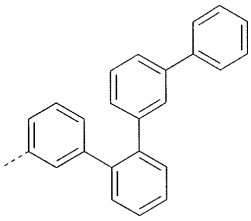
[0124]



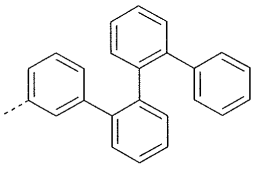
화학식 (55)



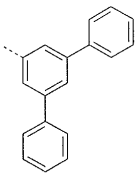
화학식 (56)



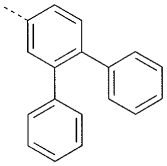
화학식 (57)



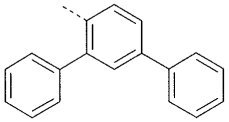
화학식 (58)



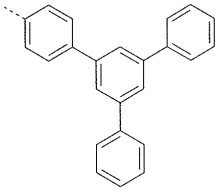
화학식 (59)



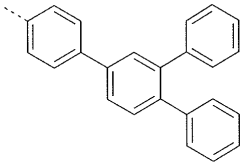
화학식 (60)



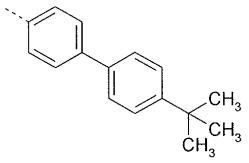
화학식 (61)



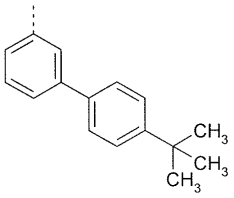
화학식 (62)



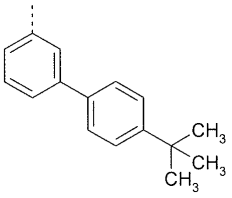
화학식 (63)



화학식 (64)

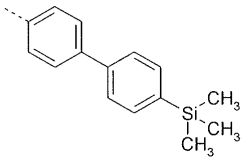


화학식 (65)

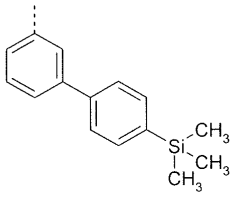


화학식 (66)

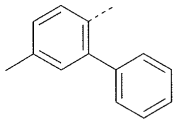
[0125]



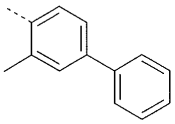
화학식 (67)



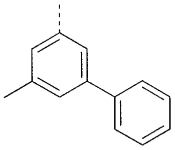
화학식 (68)



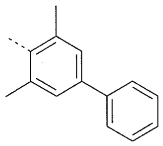
화학식 (69)



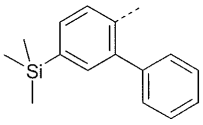
화학식 (70)



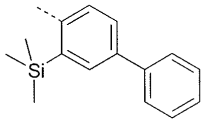
화학식 (71)



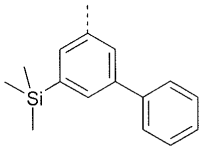
화학식 (72)



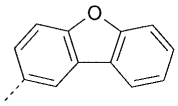
화학식 (73)



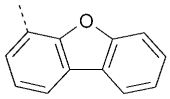
화학식 (74)



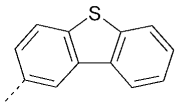
화학식 (75)



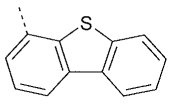
화학식 (76)



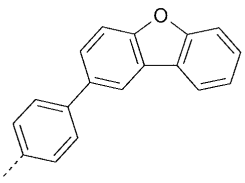
화학식 (77)



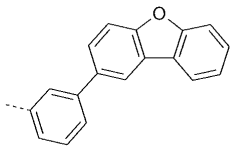
화학식 (78)



화학식 (79)

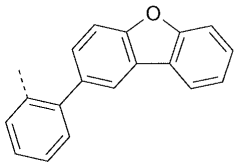


화학식 (80)

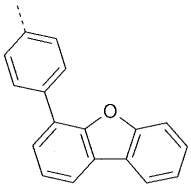


화학식 (81)

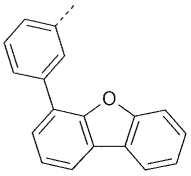
[0126]



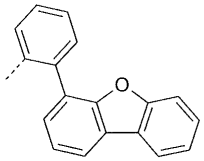
화학식 (82)



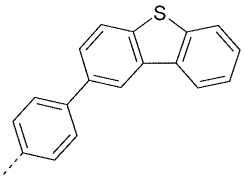
화학식 (83)



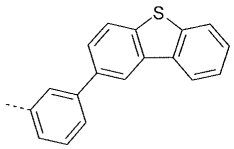
화학식 (84)



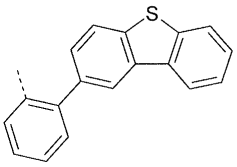
화학식 (85)



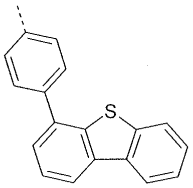
화학식 (86)



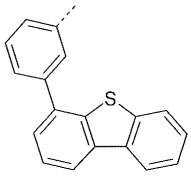
화학식 (87)



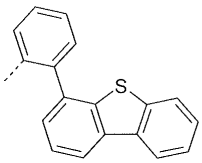
화학식 (88)



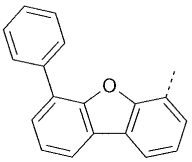
화학식 (89)



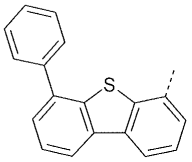
화학식 (90)



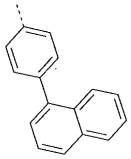
화학식 (91)



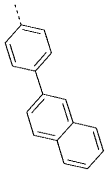
화학식 (92)



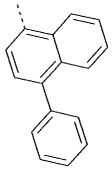
화학식 (93)



화학식 (94)

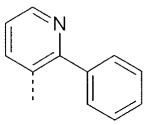


화학식 (95)

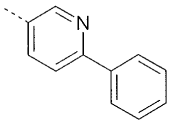


화학식 (96)

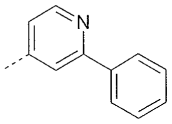
[0127]



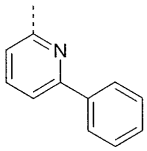
화학식 (97)



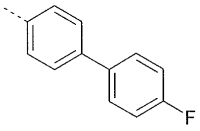
화학식 (98)



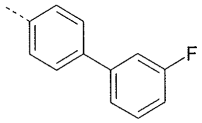
화학식 (99)



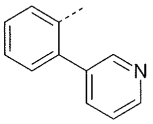
화학식 (100)



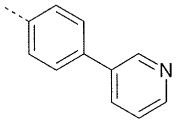
화학식 (101)



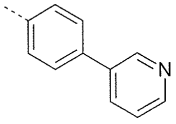
화학식 (102)



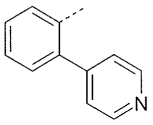
화학식 (103)



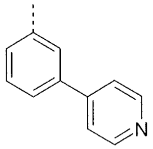
화학식 (104)



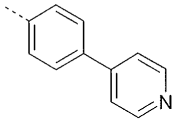
화학식 (105)



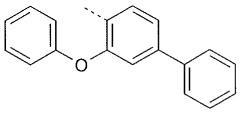
화학식 (106)



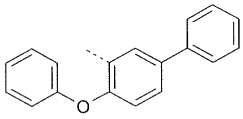
화학식 (107)



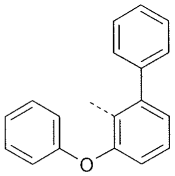
화학식 (108)



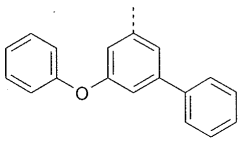
화학식 (109)



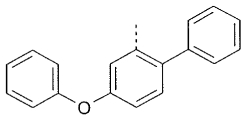
화학식 (110)



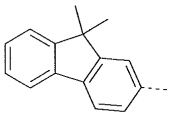
화학식 (111)



화학식 (112)

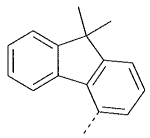


화학식 (113)

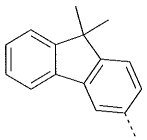


화학식 (114)

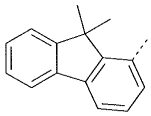
[0128]



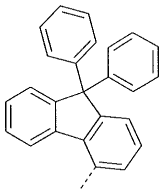
화학식 (115)



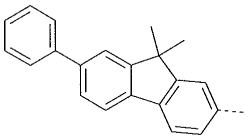
화학식 (116)



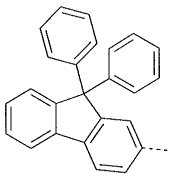
화학식 (117)



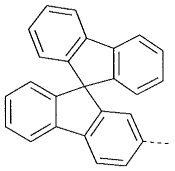
화학식 (118)



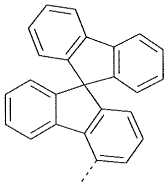
화학식 (119)



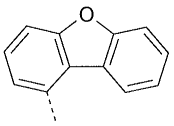
화학식 (120)



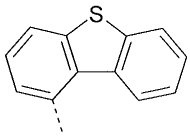
화학식 (121)



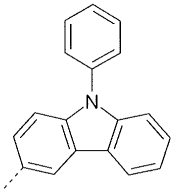
화학식 (122)



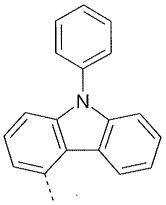
화학식 (122a)



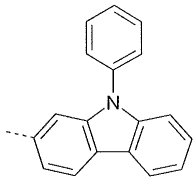
화학식 (122b)



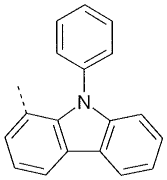
화학식 (122c)



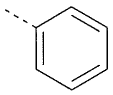
화학식 (122d)



화학식 (122e)



화학식 (122f)



화학식 (122g)

[0129]

[0130] [식 중, 점선은 질소 원자에의 결합 위치를 나타냄].

[0131] 기 Ar^1 및 Ar^2 의 하나 이상의 플루오렌기는, 본 발명의 바람직한 구현예에서, 기 Z^a_1, Z^b_1 또는 Z^c_1 의 질소 원자에 직접 결합된다. 기 Ar^1 및 Ar^2 의 하나 이상의 플루오렌기가 이의 1, 2, 3 및 4 위치를 통해 기 Z^a_1, Z^b_1 또는 Z^c_1 의 질소 원자에 결합되는 것이 매우 바람직하고, 여기서 2 위치를 통한 결합이 매우 특히 바람직하다.

[0132] 바람직한 구현예에서, 본 발명은, 식 중 사용된 기호에 하기가 적용되는, 일반식 (6) 의 화합물에 관한 것이다:

[0133] R^1 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 바람직하게는 동일하게, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 (여기서 상기 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 2 개의 라디칼 R^1 은 서로 연결되어 고리를 형성하여, 플루오렌의 9 위치에 스피로 화합물을 형성할 수 있고, 단 스피로바이플루오렌은 제외되고;

[0134] R^2 는 H, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 (여기서 상기 기들은 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고;

[0135] R^3 은 H, D, F, Cl, Br, I, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시기 (여기서 상기 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 로 대체될 수 있음), 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬기 (이는 각각의 경우 상기 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 둘 이상의 라디칼 R^3 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고;

[0136] B' 는 화학식 (15) 내지 (36), 바람직하게는 (15) 내지 (17) 의 기로부터 선택되고, 여기서 이러한 기들은 또한 서로 독립적인 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있고, 여기서 R^4 는 상기 정의된 바와 같고;

[0137] Ar^1, Ar^2 는 페닐, 페닐피리딜, 페닐나프틸, 바이페닐, 테르페닐 또는 쿼테르페닐기 (이는 서로 동일하거나 상이할 수 있는 하나 이상의 라디칼 R^6 으로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 Ar^1 내 2 개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 부가적으로 2가 기 -O-, -S-, $C(R^6)_2$ 또는 $-Si(R^6)_2-$ 에 의해 브릿지될 수 있거나 또는 Ar^2 내 2 개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 부가적으로 2가 기 -O-, -S-, $C(R^6)_2$ 또는 $-Si(R^6)_2-$ 에 의해 브릿지될 수 있고, 여기서 부가적인 브릿징이 존재하지 않는 경우가 바람직하고, 여기서 Ar^1 로부터의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 2가 기 -O-, -S-, $-Si(R^6)_2-$, $-NR^6-$ 또는 $-C(R^6)_2-$ 에 의해 Ar^2 로부터의 방향족 또는 헤테로방향족 고리에 브릿지될 수 있고, 여기서 브릿지되지 않은 기 Ar^1 및 Ar^2 가 바람직하고, 여기서 기 Ar^1 및 Ar^2 중 하나 이상은 플루오렌기를 함유함.

[0138] 매우 바람직한 구현예에서, 본 발명은, 식 중 사용된 기호에 하기가 적용되는, 일반식 (6) 의 화합물에 관한 것이다:

[0139] R^1 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 바람직하게는 동일하게, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 (여기서 상기 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 2 개의 라디칼 R^1 은 서로 연결되어 고리를 형성하여, 플루오렌의 9 위치에 스피로 화합물을 형성할 수 있고, 단 스피로바이플루오렌은 제외되고;

[0140] R^2 는 H, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 (여기서 상기 기들은 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고;

[0141] R^3 은 H 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 R^3 이 H 인 경우가 특히 바람직하고;

[0142] B' 는 페닐렌기이고;

[0143] Ar^1, Ar^2 는 페닐, 바이페닐, 테르페닐 또는 쿼테르페닐기 (이는 서로 동일하거나 상이할 수 있는 하나 이상의 라디칼 R^6 으로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 Ar^1 및 Ar^2 내 고리는 브릿지되지 않고, Ar^1 및 Ar^2 는 특히 바람

직하게는 바이페닐기 (이는 서로 동일하거나 상이할 수 있는 하나 이상의 라디칼 R^6 으로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 2 개의 기 Ar^1 및 Ar^2 중 하나 이상은 플루오렌기를 함유함.

[0144] 매우 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은, 식 중 사용된 기호에 하기가 적용되는, 일반식 (6) 의 화합물에 관한 것이다:

[0145] R^1 은 각각의 경우 동일하고, 1 내지 5 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 바람직하게는 메틸기 또는 에틸기 (여기서 상기 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이거나 또는 페닐, 바이페닐 또는 피리딜기 (이들은 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 를 나타내고, 여기서 R^1 에 따른 2 개의 알킬기는 서로 연결되어 고리를 형성하여, 플루오렌의 9 위치에 스피로 화합물을 형성할 수 있고, 단 스피로바이플루오렌은 제외되고;

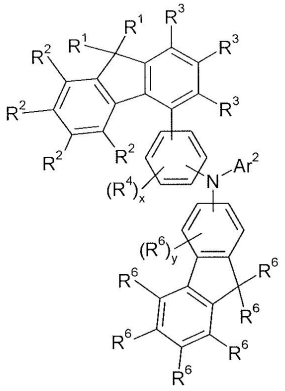
[0146] R^2 는 H, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 (여기서 상기 기들은 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고;

[0147] R^3 은 H 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 R^3 이 H 인 경우가 특히 바람직하고;

[0148] B' 는 페닐렌기이고;

[0149] Ar^1, Ar^2 는 페닐, 바이페닐, 테르페닐 또는 쿼테르페닐기 (이는 서로 동일하거나 상이할 수 있는 하나 이상의 라디칼 R^6 으로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 Ar^1 및 Ar^2 내 고리는 브릿지되지 않고, Ar^1 및 Ar^2 는 특히 바람직하게는 바이페닐기 (이는 서로 동일하거나 상이할 수 있는 하나 이상의 라디칼 R^6 으로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 2 개의 기 Ar^1 및 Ar^2 중 하나 이상은 플루오렌기를 함유함.

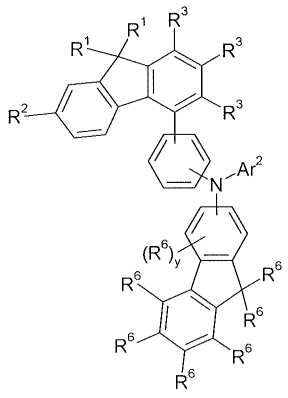
[0150] 결과적으로, 일반식 (123) 의 화합물이 특히 바람직한 것으로 제시된다:



[0151] 화학식 (123)

[0152] [식 중, x 는 0, 1, 2, 3 또는 4 이고, y 는 0, 1, 2 또는 3 임].

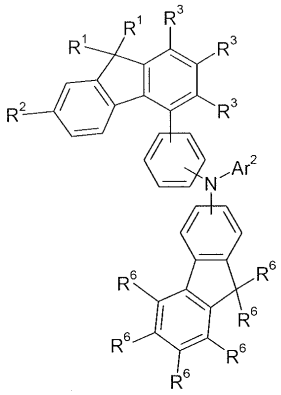
[0153] 나아가, 일반식 (124) 의 화합물이 또한 바람직한 것으로 제시된다:



화학식 (124)

[0154] .

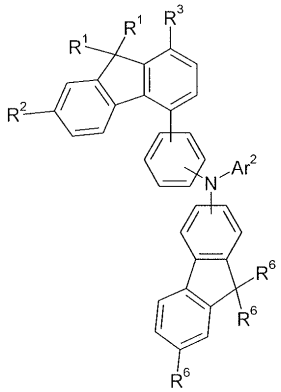
[0155] 일반식 (125) 의 화합물이 보다 바람직한 것으로 제시된다:



화학식 (125)

[0156] .

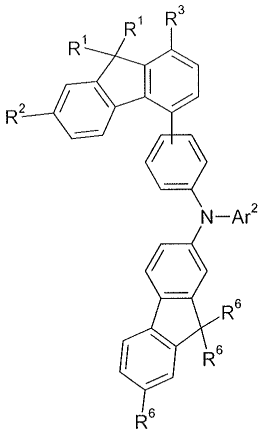
[0157] 일반식 (126) 의 화합물이 보다 더욱 바람직한 것으로 제시된다:



화학식 (126)

[0158] .

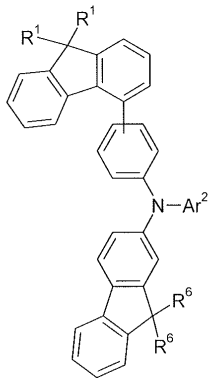
[0159] 일반식 (127) 의 화합물이 보다 더욱 바람직한 것으로 제시된다:



화학식 (127)

[0160] .

[0161] 최종적으로, 하기 화학식 (128) 의 화합물은 본 발명의 특히 바람직한 구현예를 나타낸다:



화학식 (128)

[0162] .

[0163] 보다 바람직한 구현예에서, 본 발명은, 식 중 사용된 기호에 하기가 적용되는, 일반식 (8) 의 화합물에 관한 것이다:

[0164] R^1 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 바람직하게는 동일하게, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 (여기서 상기 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 2 개의 라디칼 R^1 은 서로 연결되어 고리를 형성하여, 플루오렌의 9 위치에 스피로 화합물을 형성할 수 있고, 단 스피로바이플루오렌은 제외되고;

[0165] R^2 는 H, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 (여기서 상기 기들은 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고;

[0166] R^3 은 H, D, F, Cl, Br, I, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시기 (여기서 상기 언급된 기들은 각각 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있고, 상기 언급된 기에서 하나 이상 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 로 대체될 수 있음), 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬기 (이는

각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 둘 이상의 라디칼 R^3 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고;

[0167] B' 는 화학식 (15) 내지 (36), 바람직하게는 (15) 내지 (17) 의 기로부터 선택되고, 여기서 이러한 기들은 또한 서로 독립적인 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있고, 여기서 R^4 는 상기 정의된 바와 같고;

[0168] Ar^1, Ar^2 는 페닐, 페닐피리딜, 페닐나프틸, 바이페닐, 테르페닐 또는 쿼테르페닐기 (이는 서로 동일하거나 상이할 수 있는 하나 이상의 라디칼 R^6 으로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 Ar^1 내 2 개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 부가적으로 2가 기 -O-, -S-, $C(R^6)_2$ 또는 $-Si(R^6)_2-$ 에 의해 브릿지될 수 있거나 또는 Ar^2 내 2 개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 부가적으로 2가 기 -O-, -S-, $C(R^6)_2$ 또는 $-Si(R^6)_2-$ 에 의해 브릿지될 수 있고, 여기서 부가적인 브릿징이 존재하지 않는 경우가 바람직하고, 여기서 Ar^1 로부터의 방향족 또는 헤테로방향족 고리는 2가 기 -O-, -S-, $-Si(R^6)_2-$, $-NR^6-$ 또는 $-C(R^6)_2-$ 에 의해 Ar^2 로부터의 방향족 또는 헤테로방향족 고리에 브릿지될 수 있고, 여기서 브릿지되지 않은 기 Ar^1 및 Ar^2 가 바람직하고, 여기서 2 개의 기 Ar^1 및 Ar^2 중 하나 이상은 플루오렌기를 함유함.

[0169] 매우 바람직한 구현예에서, 본 발명은, 식 중 사용된 기호에 하기가 적용되는, 일반식 (8) 의 화합물에 관한 것이다:

[0170] R^1 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 바람직하게는 동일하게, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 (상기 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 2 개의 라디칼 R^1 은 서로 연결되어 고리를 형성하여, 플루오렌의 9 위치에 스피로 화합물을 형성할 수 있고, 단 스피로바이플루오렌은 제외되고;

[0171] R^2 는 H, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 (여기서 상기 기들은 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고;

[0172] R^3 은 H 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 R^3 이 H 인 경우가 특히 바람직하고;

[0173] B' 는 페닐렌기이고;

[0174] Ar^1, Ar^2 는 페닐, 바이페닐, 테르페닐 또는 쿼테르페닐기 (이는 서로 동일하거나 상이할 수 있는 하나 이상의 라디칼 R^6 으로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 Ar^1 및 Ar^2 내 고리는 부가적으로 브릿지되지 않고, Ar^1 및 Ar^2 는 특히 바람직하게는 바이페닐기 (이는 서로 동일하거나 상이할 수 있는 하나 이상의 라디칼 R^6 으로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 2 개의 기 Ar^1 및 Ar^2 중 하나 이상은 플루오렌기를 함유함.

[0175] 매우 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은, 식 중 사용된 기호에 하기가 적용되는, 일반식 (8) 의 화합물에 관한 것이다:

[0176] R^1 은 각각의 경우 동일하고, 1 내지 5 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 바람직하게는 메틸기 또는 에틸기 (여기서 상기 기는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이거나 또는 페닐, 바이페닐 또는 피리딜기 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 를 나타내고, 여기서 R^1 에 따른 2 개의 알킬기는 서로 연결되어 고리를 형성하여, 플루오렌의 9 위치에 스피로 화합물을 형성할 수 있고, 단 스피로바이플루오렌은 제외되고;

[0177] R^2 는 H, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 (여기서 상기 기들은 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고;

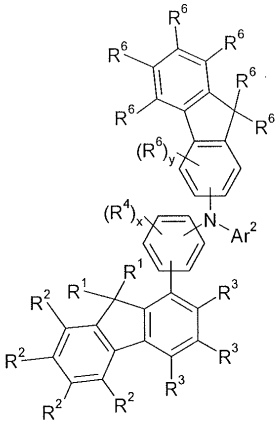
[0178] R^3 은 H 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 R^3 이 H 인 경우가 특히 바람직하고;

[0179] B' 는 페닐렌기이고;

[0180] Ar^1, Ar^2 는 페닐, 바이페닐, 테르페닐 또는 쿼테르페닐기 (이는 서로 동일하거나 상이할 수 있는 하나 이상의 라디칼 R^6 으로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 Ar^1 및 Ar^2 내 고리는 부가적으로 브릿지되지 않고, Ar^1 및 Ar^2 는 특히 바람직하게는 바이페닐기 (이는 서로 동일하거나 상이할 수 있는 하나 이상의 라디칼 R^6 으로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 2 개의 기 Ar^1 및 Ar^2 중 하나 이상은 플루오렌기를 함유함.

[0181] 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명은 모노아민 화합물인 것을 특징으로 하는, 일반식 (1) 의 화합물에 관한 것이다.

[0182] 결과적으로, 일반식 (129) 의 화합물이 특히 바람직한 것으로 제시된다:

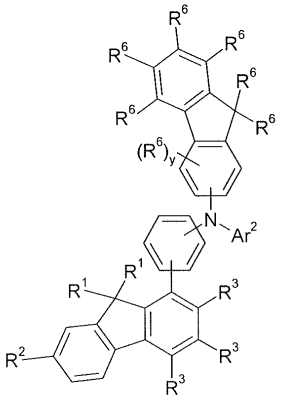


화학식 (129)

[0183]

[0184] [식 중, x 는 0, 1, 2, 3 또는 4 이고, y 는 0, 1, 2 또는 3 임].

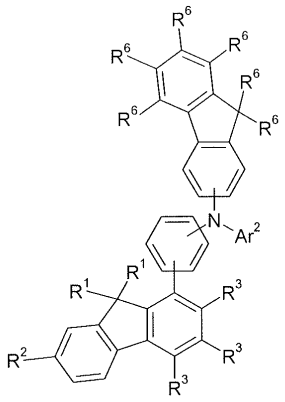
[0185] 나아가, 일반식 (130) 의 화합물이 또한 바람직한 것으로 제시된다:



화학식 (130)

[0186] .

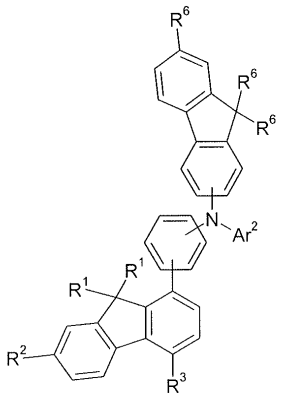
[0187] 일반식 (131) 의 화합물이 보다 바람직한 것으로 제시된다:



화학식 (131)

[0188] .

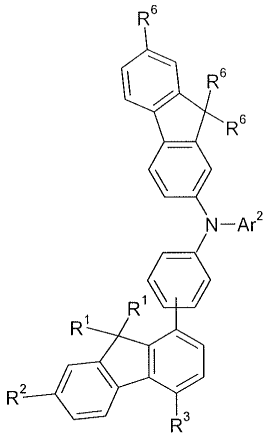
[0189] 일반식 (132) 의 화합물이 보다 더욱 바람직한 것으로 제시된다:



화학식 (132)

[0190] .

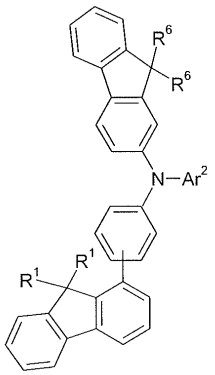
[0191] 일반식 (133) 의 화합물이 보다 더욱 바람직한 것으로 제시된다:



화학식 (133)

[0192] .

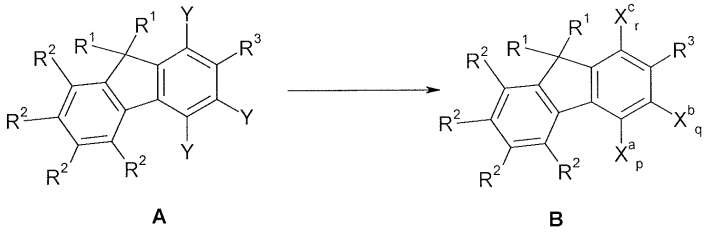
[0193] 최종적으로, 하기 화학식 (134) 의 화합물은 본 발명의 특히 바람직한 구현예를 나타낸다:



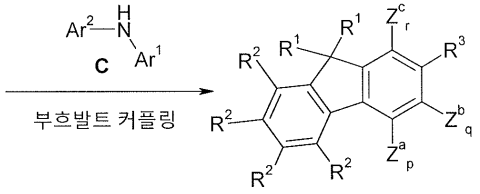
화학식 (134)

[0194] .

[0195] 하기 반응식은 본 발명에 따른 화학식 (1) 의 화합물의 제조를 위한 바람직한 합성 경로를 나타낸다. 본 발명에 따른 화합물의 합성을 위하여, 플루오렌 화합물 A 를 우선 당업자에게 친숙한 방법 (예를 들어, 보론화 및 스즈키 (Suzuki) 커플링) 에 의해 화합물 B 로 전환시키고, 추가로 부흐발트 커플링에 의해 화학식 Ar^1-NH-Ar^2 의 아민 C 와 반응시켜, 본 발명에 따른 화합물을 수득한다:



A B



C

부흐발트 커플링

[0196]

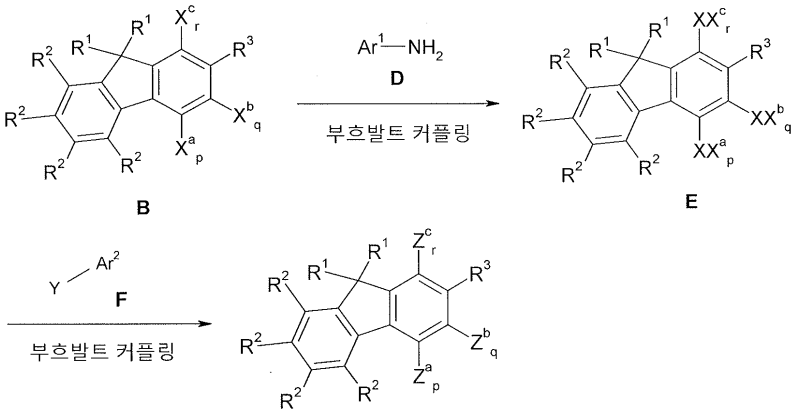
[0197] [식 중, 사용된 기호 및 지수에는 상기 정의가 적용되고,

[0198] Y 는 이탈기, 바람직하게는 할로겐이고;

[0199] X^a_0, X^b_0, X^c_0 는, 각각의 경우 동일하거나 상이하게, R^3 이고,

[0200] X^a_1, X^b_1, X^c_1 는 -B'-Y 이고, 여기서 Y 는 이탈기, 예를 들어 할로겐임].

[0201] 본 발명에 따른 화합물의 제조를 위한 또 다른 바람직한 합성 경로는 하기 반응식에 도시되어 있다. 이러한 합성 경로는 2 종의 커플링 반응을 포함한다: 우선, 플루오렌 화합물 B 를 첫 번째 부흐발트 커플링에서 화학식 Ar^1-NH_2 의 아민 D 와 반응시킨다. 최종적으로, 화합물 F, 예를 들어 브로모아릴 화합물을 이용하여 두 번째 부흐발트 커플링을 수행한다:



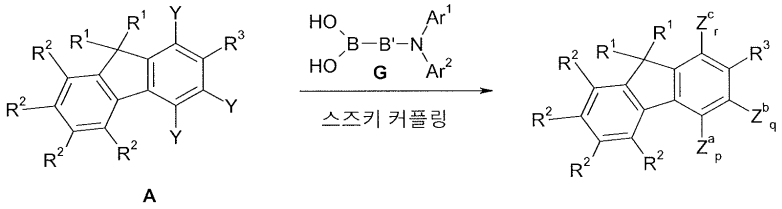
[0202]

[0203] [식 중, Y 는 마찬가지로 이탈기, 바람직하게는 할로겐이고;

[0204] XX^a_0, XX^b_0, XX^c_0 는, 각각의 경우 동일하거나 상이하게, R^3 이고,

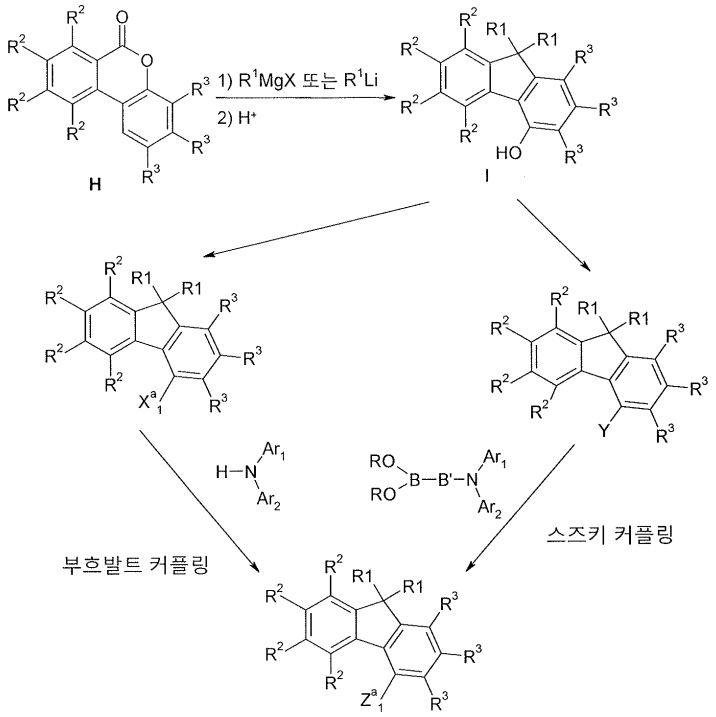
[0205] XX^a_1, XX^b_1, XX^c_1 는 -B'-NH-Ar^1 임].

[0206] 본 발명에 따른 화합물의 제조를 위한 또 다른 바람직한 합성 경로는 하기 반응식에 도시되어 있다. 이를 위하여, 플루오렌 화합물 A 를 당업자에게 친숙한 C-C 커플링 방법 중 하나 (예를 들어, 스즈키 커플링) 를 통해 본 발명에 따른 화합물로 전환시킨다:



[0207] .

[0208] 하기 반응식은 본 발명에 따른 화합물의 제조를 위한 추가의 바람직한 합성 경로를 나타낸다. 이를 위하여, 벤조크로메논 H 를 출발 지점으로서 간주한다. 유기금속 시약, 예를 들어 그리냐드 (Grignard) 또는 유기리튬 시약의 첨가, 및 후속되는 중간체 알코올레이트의 산-촉매 고리화로, 해당 4-히드록시플루오렌 I 를 유도한다. 이어서, 히드록실기를 이탈기 Y 또는 -B'-Y ($=X^a_1$), 예를 들어 트리플레이트 (TfO) 또는 할라이드 (바람직하게는 Br 또는 Cl) 로 전환시키고, 당업자에게 친숙한 방법 (C-C 커플링, 예컨대 스즈키, 네기시 (Negishi), 야마모토 (Yamamoto), 그리냐드-교차, 스틸 (Stille), 헥 (Heck) 커플링 등; C-N 커플링, 예컨대 부흐발트 커플링) 에 의해 추가로 본 발명에 따른 화합물로 전환시킨다 (여기서, 부흐발트 커플링 또는 스즈키 커플링이 바람직함). X^a_1 의 경우에는, 당연히 오로지 Y 만 이탈기이다.

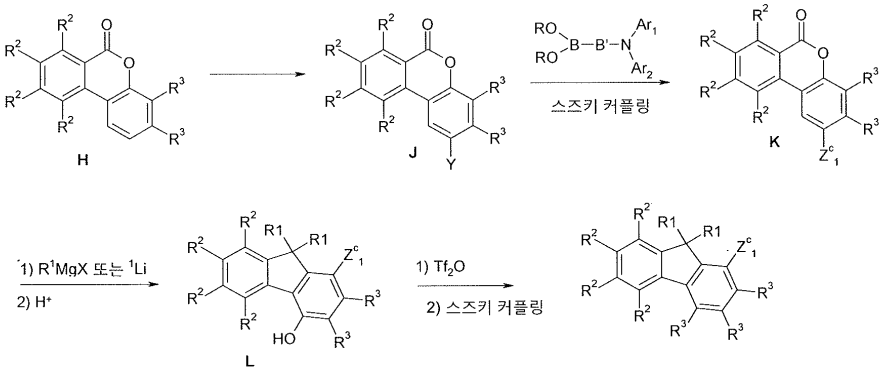


[0209]

[0210] [식 중, 사용된 지수는 상기 정의된 바와 같고, B 는 보론 원자를 나타냄].

[0211] 이는 바람직한 4 위치에 아민을 갖는 플루오렌의 제조를 가능하게 한다.

[0212] 플루오렌의 1 위치에 아민을 갖는 본 발명에 따른 플루오렌은 전적으로 이와 유사하게 제조될 수 있다.



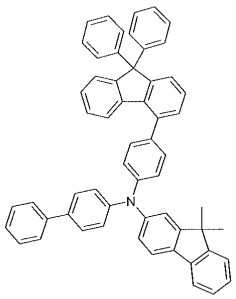
[0213]

[0214] 스즈키 커플링에 이용되는 기 R 을 함유하는 보론산 에스테르는 당업자에게 널리 공지되어 있다.

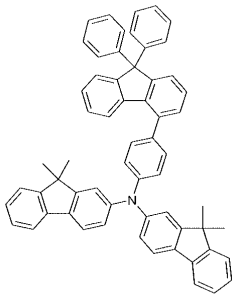
[0215] 본 발명에 따른 화합물의 합성에 이용되는 출발 화합물 및 중간체 화합물 A, B, C, D, E, F, G, H, I, J, K 및 L 의 합성 경로는 당업자에게 친숙하다. 나아가, 일부 구체적인 합성 방법은 실시예에 보다 상세하게 기재되어 있다.

[0216] 일반식 (1) 의 화합물의 제조를 위한 바람직한 커플링 반응은 부흐발트 커플링 및 스즈키 커플링이다.

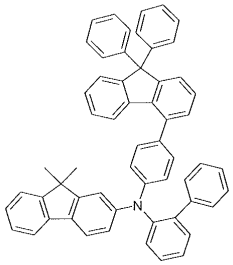
[0217] 본 발명에 따른 바람직한 화합물은 하기 표에 예로서 제시되어 있다:



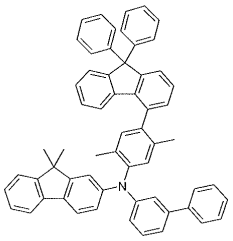
화학식 (A-1)



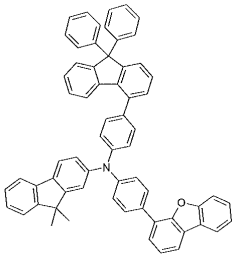
화학식 (A-2)



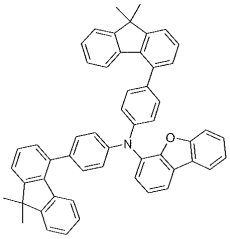
화학식 (A-3)



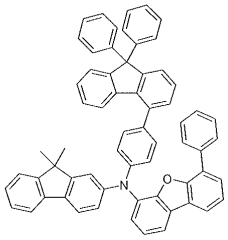
화학식 (A-4)



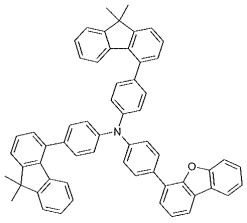
화학식 (A-5)



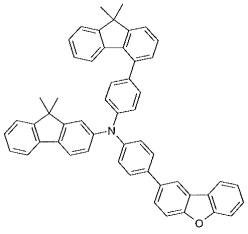
화학식 (A-6)



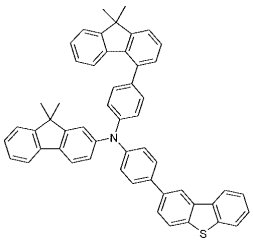
화학식 (A-7)



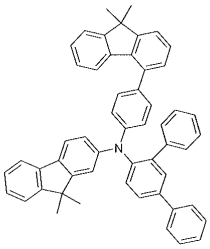
화학식 (A-8)



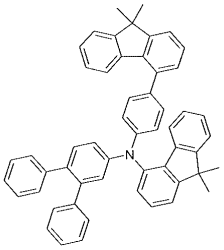
화학식 (A-9)



화학식 (A-10)

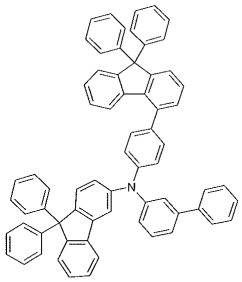


화학식 (A-11)

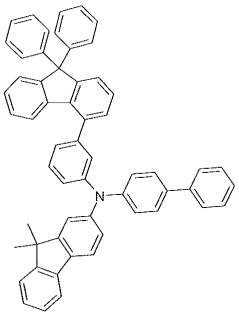


화학식 (A-12)

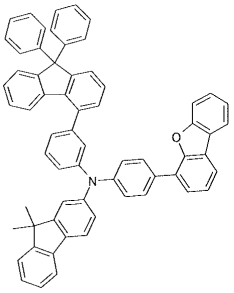
[0218]



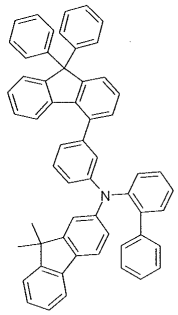
화학식 (A-13)



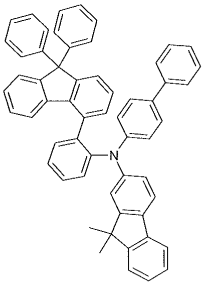
화학식 (A-14)



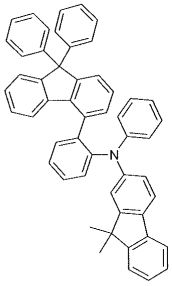
화학식 (A-15)



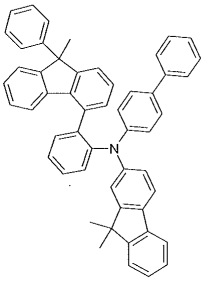
화학식 (A-16)



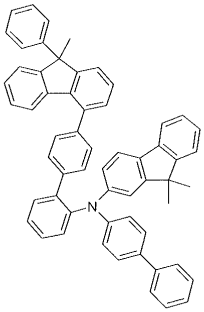
화학식 (A-17)



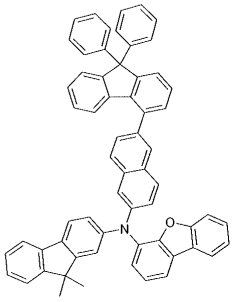
화학식 (A-18)



화학식 (A-19)

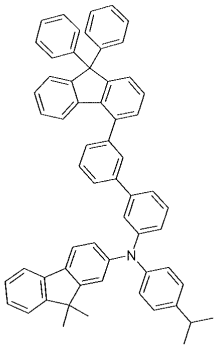


화학식 (A-20)

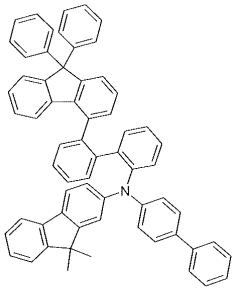


화학식 (A-21)

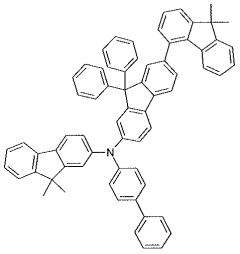
[0219]



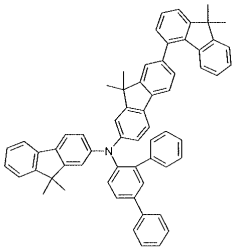
화학식 (A-22)



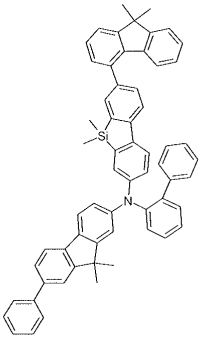
화학식 (A-23)



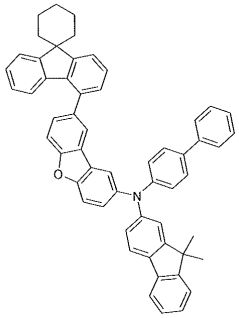
화학식 (A-24)



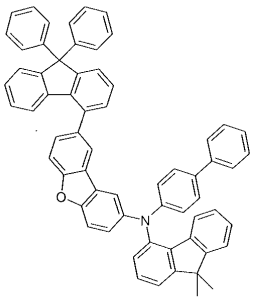
화학식 (A-25)



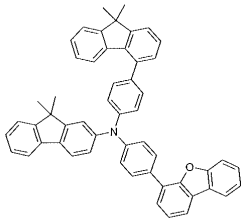
화학식 (A-26)



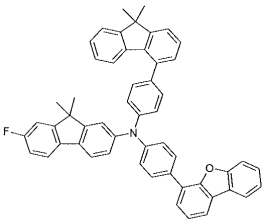
화학식 (A-27)



화학식 (A-28)

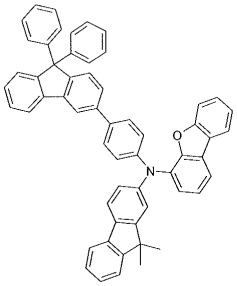


화학식 (A-29)

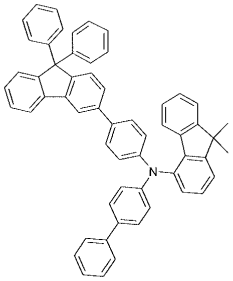


화학식 (A-30)

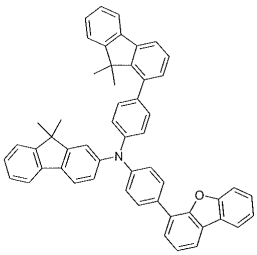
[0220]



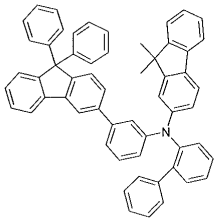
화학식 (A-31)



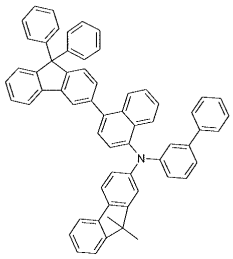
화학식 (A-32)



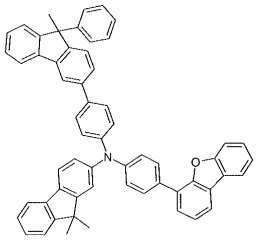
화학식 (A-33)



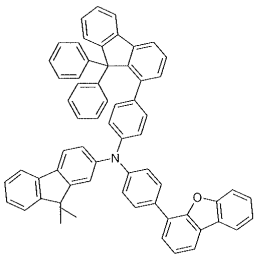
화학식 (A-34)



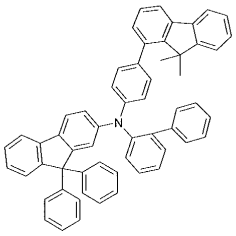
화학식 (A-35)



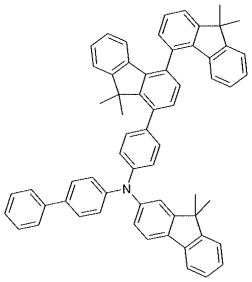
화학식 (A-36)



화학식 (A-37)

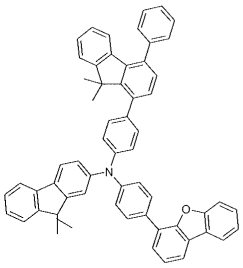


화학식 (A-38)

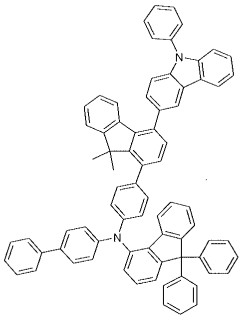


화학식 (A-39)

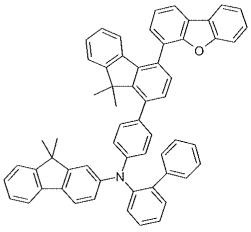
[0221]



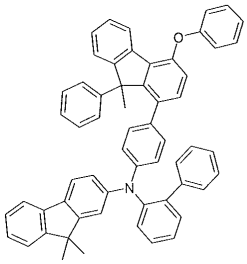
화학식 (A-40)



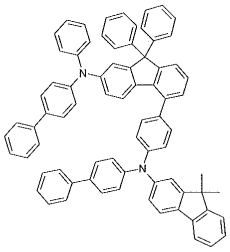
화학식 (A-41)



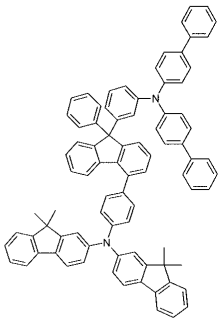
화학식 (A-42)



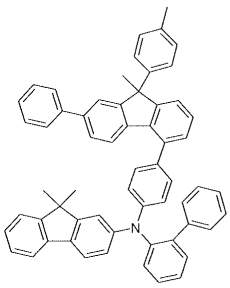
화학식 (A-43)



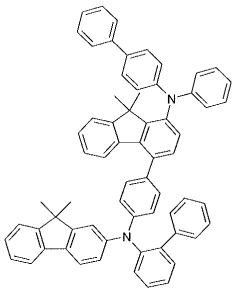
화학식 (A-44)



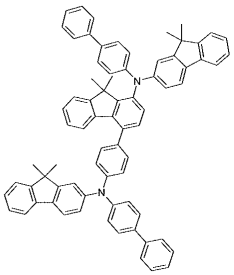
화학식 (A-45)



화학식 (A-46)

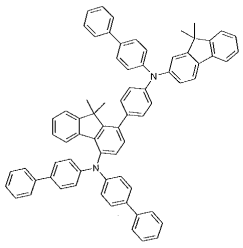


화학식 (A-47)

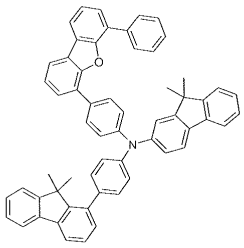


화학식 (A-48)

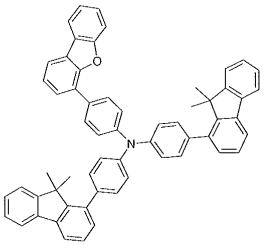
[0222]



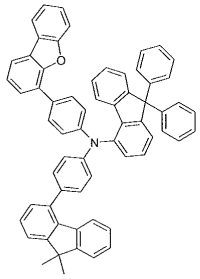
화학식 (A-49)



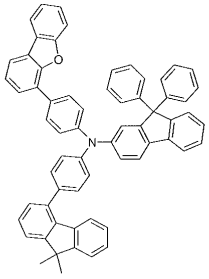
화학식 (A-50)



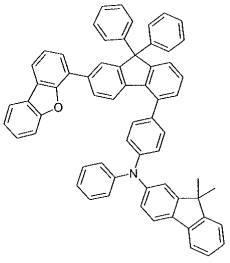
화학식 (A-51)



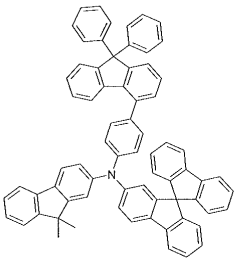
화학식 (A-52)



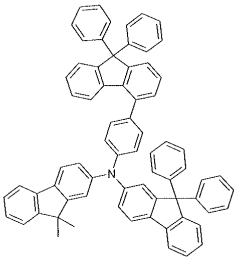
화학식 (A-53)



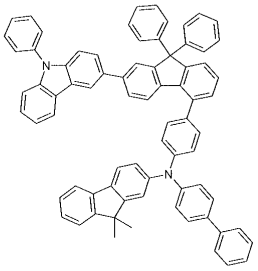
화학식 (A-54)



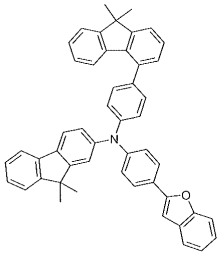
화학식 (A-55)



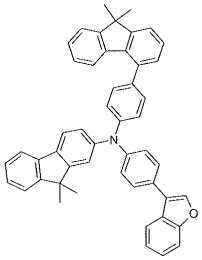
화학식 (A-56)



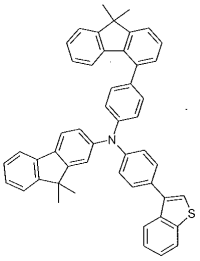
화학식 (A-57)



화학식 (A-59)

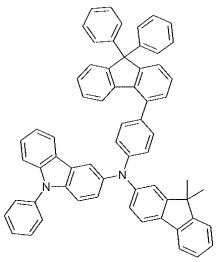


화학식 (A-60)

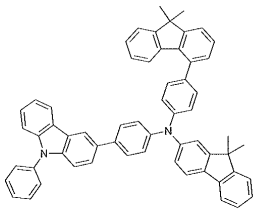


화학식 (A-61)

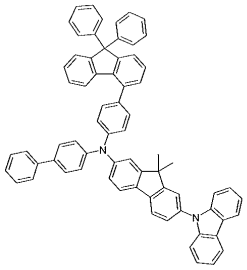
[0223]



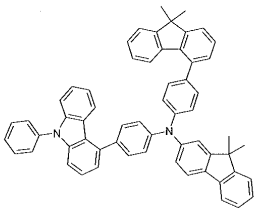
화학식 (A-62)



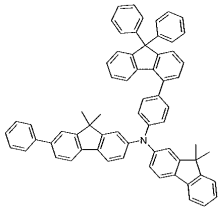
화학식 (A-63)



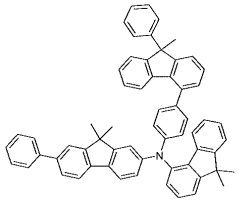
화학식 (A-64)



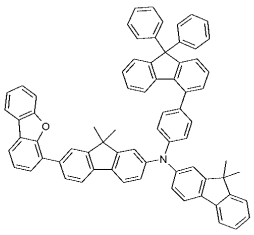
화학식 (A-65)



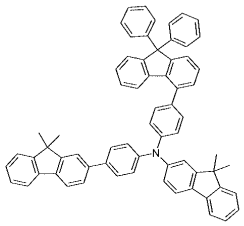
화학식 (A-66)



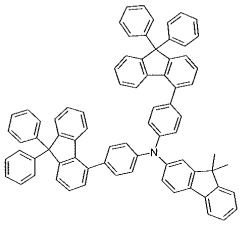
화학식 (A-67)



화학식 (A-68)



화학식 (A-69)



화학식 (A-70)

[0224]

[0225] 상기 기재된 화학식 (1) 의 화합물은 반응성 이탈기, 예컨대 브롬, 요오드, 염소, 보론산 또는 보론산 에스테르로 치환될 수 있다. 이는 해당 올리고머, 덴드리머 또는 폴리머의 제조를 위한 모노머로서 사용될 수 있다.

적합한 반응성 이탈기는, 예를 들어, 브롬, 요오드, 염소, 보론산, 보론산 에스테르, 아민, 말단 C-C 이중 결합 또는 C-C 삼중 결합을 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 옥시란, 옥세탄, 고리첨가 반응, 예를 들어 1,3-양극성 고리첨가 반응을 거치는 기, 예를 들어, 디엔 또는 아지드, 카르복실산 유도체, 알코올 및 실란이다.

[0226] 따라서, 본 발명은 나아가 하나 이상의 화학식 (I) 의 화합물을 함유하는 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머에 관한 것으로, 여기서 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머에의 결합(들)은 화학식 (I) 의 임의의 목적하는 위치에 편재화될 수 있다. 화학식 (I) 의 화합물에 연결에 따라, 상기 화합물은 올리고머 또는 폴리머의 측쇄의 구성성분 또는 주쇄의 구성성분이 된다. 본 발명의 의미에서 올리고머는 3 개 이상의 모노머 단위로부터 구축된 화합물을 의미하는 것으로 의도된다. 본 발명의 의미에서 폴리머는 10 개 이상의 모노머 단위로부터 구축된 화합물을 의미하는 것으로 의도된다. 본 발명에 따른 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머는 공액되거나, 부분적으로 공액되거나 또는 비(非)공액될 수 있다. 본 발명에 따른 올리고머 또는 폴리머는 선형, 분지형 또는 수지형 (dendritic) 일 수 있다. 선형으로 연결된 구조에서, 화학식 (I) 의 단위는 서로 직접적으로 연결되거나 또는 서로 2가 기, 예를 들어 치환 또는 미치환 알킬렌기를 통해, 헤테로원자를 통해 또는 2가 방향족 또는 헤테로방향족기를 통해 연결될 수 있다. 분지형 및 수지형 구조에서, 예를 들어, 화학식 (I) 의 3 개 이상의 단위는 3가 또는 다가 기, 예를 들어 3가 또는 다가 방향족 또는 헤테로방향족기를 통해 연결되어, 분지형 또는 수지형 올리고머 또는 폴리머를 형성할 수 있다.

[0227] 화학식 (I) 의 화합물에 대하여 상기 기재된 바와 같은 바람직한 것들이, 올리고머, 덴드리머 및 폴리머에서의 화학식 (I) 의 반복 단위에 대해서도 동일하게 적용된다.

[0228] 올리고머 또는 폴리머의 제조를 위하여, 본 발명에 따른 모노머는 추가의 모노머와 동종중합 또는 공중합된다.

적합하고 바람직한 공모노머는 플루오렌 (예를 들어 EP 842208 또는 WO 2000/22026 에 따름), 스피로바이플루오렌 (예를 들어 EP 707020, EP 894107 또는 WO 2006/061181 에 따름), 파라-페닐렌 (예를 들어 WO 1992/18552 에 따름), 카르바졸 (예를 들어 WO 2004/070772 또는 WO 2004/113468 에 따름), 티오펜 (예를 들어

EP 1028136 에 따름), 디히드로페난트렌 (예를 들어 WO 2005/014689 또는 WO 2007/006383 에 따름), 시스- 및 트랜스-인데노플루오렌 (예를 들어 WO 2004/041901 또는 WO 2004/113412 에 따름), 케톤 (예를 들어 WO 2005/040302 에 따름), 페난트렌 (예를 들어 WO 2005/104264 또는 WO 2007/017066 에 따름) 또는, 또한 다수의 상기 단위로부터 선택된다. 상기 폴리머, 올리고머 및 덴드리머는 통상적으로 또한 추가의 단위, 예를 들어 발광 (형광 또는 인광) 단위, 예컨대 비닐트리아릴아민 (예를 들어 WO 2007/068325 에 따름) 또는 인광 금속 착물 (예를 들어 WO 2006/003000 에 따름), 및/또는 전하-수송 단위, 특히 트리아릴아민을 기재로 하는 단위들을 함유한다.

[0229] 본 발명에 따른 폴리머, 올리고머 및 덴드리머는 유리한 특성, 특히 긴 수명, 높은 효율 및 우수한 색좌표를 갖는다.

[0230] 본 발명에 따른 폴리머 및 올리고머는 일반적으로 하나 이상의 유형의 모노머의 중합에 의해 제조되며, 이중 하나 이상의 모노머는 폴리머에서 화학식 (I) 의 반복 단위가 된다. 적합한 중합 반응은 당업자에게 공지되어 있고, 문헌에 기재되어 있다. C-C 또는 C-N 연결을 유도하는 특히 적합하고 바람직한 중합 반응은 하기와 같다:

[0231] (A) 스즈키 (SUZUKI) 중합;

[0232] (B) 야마모토 (YAMAMOTO) 중합;

[0233] (C) 스틸 (STILLE) 중합; 및

[0234] (D) 하트위그-부흐발트 (HARTWIG-BUCHWALD) 중합.

[0235] 중합이 상기 방법에 의해 수행될 수 있는 방법 및 그 후 폴리머가 반응 매질로부터 분리 및 정제될 수 있는 방법은 당업자에게 공지되어 있고, 문헌, 예를 들어 WO 2003/048225, WO 2004/037887 및 WO 2004/037887 에 상세하게 기재되어 있다.

[0236] 따라서, 본 발명은 또한 스즈키 중합, 야마모토 중합, 스틸 중합 또는 하트위그-부흐발트 중합에 의해 제조되는 것을 특징으로 하는, 본 발명에 따른 폴리머, 올리고머 및 덴드리머의 제조 방법에 관한 것이다. 본 발명에 따른 덴드리머는 당업자에게 공지된 방법에 의해 또는 이와 유사하게 제조될 수 있다. 적합한 방법은 문헌, 예를 들어 [Frechet, Jean M. J.; Hawker, Craig J., "Hyper-branched polyphenylene and hyperbranched polyesters: new soluble, three-dimensional, reactive polymers", Reactive & Functional Polymers (1995), 26(1-3), 127-36]; [Janssen, H. M.; Meijer, E. W., "The synthesis and characterization of dendritic molecules", Materials Science and Technology (1999), 20 (Synthesis of Polymer), 403-458]; [Tomalia, Donald A., "Dendrimer molecules", Scientific American (1995), 272(5), 62-6]; WO 2002/067343 A1 및 WO 2005/026144 A1 에 기재되어 있다.

[0237] 본 발명에 따른 화합물, 폴리머, 올리고머 및 덴드리머는 전자 소자에 사용되는 기타 유기 기능성 물질을 포함하는 조성물로서 이용될 수 있다. 선행 기술로부터의 다수의 가능한 유기 기능성 물질이 당업자에게 공지되어 있다.

[0238] 따라서, 본 발명은 또한 본 발명에 따른 하나 이상의 화학식 (1) 의 화합물 또는 본 발명에 따른 하나 이상의 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머, 및 형광 발광체, 인광 발광체, 호스트 물질, 매트릭스 물질, 전자-수송 물질, 전자-주입 물질, 정공-전도체 물질, 정공-주입 물질, 전자-차단 물질, 정공-차단 물질 및 p-도펀트로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 추가 유기 기능성 물질을 포함하는 조성물에 관한 것이다.

[0239] 여기서, 본 발명에 따른 하나 이상의 화학식 (1) 의 화합물 또는 본 발명에 따른 하나 이상의 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머, 및 전자-수송 물질로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 추가 유기 반도체 물질을 포함하는 조성물이 바람직하다.

[0240] 나아가, 본 발명에 따른 하나 이상의 화학식 (1) 의 화합물 또는 본 발명에 따른 하나 이상의 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머, 및 정공-수송 물질로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 추가 유기 반도체 물질을 포함하는 조성물이 바람직하다.

[0241] 나아가, 본 발명에 따른 하나 이상의 화학식 (1) 의 화합물 또는 본 발명에 따른 하나 이상의 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머, 및 하나 이상의 p-도펀트를 포함하는 조성물이 바람직하다.

[0242] 나아가, 본 발명에 따른 하나 이상의 화학식 (1) 의 화합물 또는 본 발명에 따른 하나 이상의 폴리머, 올리고머

또는 덴드리머, 및 매트릭스 물질로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 추가 유기 반도체 물질을 포함하는 조성물이 바람직하다.

[0243] 액체상으로부터, 예를 들어 스핀 코팅 또는 프린팅 공정에 의한 본 발명에 따른 화합물의 가공을 위하여, 본 발명에 따른 화합물의 제형이 요구된다. 이러한 제형은, 예를 들어 용액, 분산액 또는 미니에멀젼일 수 있다. 이러한 목적을 위하여 둘 이상의 용매의 혼합물을 사용하는 것이 바람직할 수 있다.

[0244] 따라서, 본 발명은 나아가 하나 이상의 화학식 (I) 의 화합물 또는 하나 이상의 화학식 (I) 의 단위를 함유하는 하나 이상의 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머, 및 하나 이상의 용매, 바람직하게는 유기 용매를 포함하는, 제형, 특히 용액, 분산액 또는 미니에멀젼에 관한 것이다. 상기 유형의 용액을 제조할 수 있는 방법은 당업자에게 공지되어 있고, 예를 들어 WO 2002/072714, WO 2003/019694 및 상기 문헌에 인용된 문헌에 기재되어 있다.

[0245] 적합하고 바람직한 용매는, 예를 들어 톨루엔, 아니솔, o-, m- 또는 p-자일렌, 메틸 벤조에이트, 메시틸렌, 테트랄린, 베라트롤, THF, 메틸-THF, THP, 클로로벤젠, 디옥산, 페녹시톨루엔, 특히 3-페녹시톨루엔, (-)-펜촌 (fenchone), 1,2,3,5-테트라메틸벤젠, 1,2,4,5-테트라메틸벤젠, 1-메틸나프탈렌, 2-메틸벤조티아졸, 2-페녹시에탄올, 2-피롤리디논, 3-메틸아니솔, 4-메틸아니솔, 3,4-디메틸아니솔, 3,5-디메틸아니솔, 아세토페논, α-테르피네올, 벤조티아졸, 부틸 벤조에이트, 큐멘, 시클로헥산올, 시클로헥사논, 시클로헥실벤젠, 데칼린, 도데실벤젠, 에틸 벤조에이트, 인단, 메틸 벤조에이트, 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 이러한 용매의 혼합물이다.

[0246] 본 발명에 따른 화합물은 전자 소자, 특히 유기 전계발광 소자 (예를 들어 OLED 또는 OLEC) 에 사용하기에 적합하다. 치환에 따라, 상기 화합물은 각종 기능 및 층에 이용된다.

[0247] 따라서, 본 발명은 나아가 화합물은 전자 소자에서, 바람직하게는 정공-수송층 및/또는 발광층에서의 화학식 (1) 의 화합물의 용도에 관한 것이다.

[0248] 본 발명에 따른 전자 소자는 바람직하게는 유기 집적 회로 (OIC), 유기 전계-효과 트랜지스터 (OFET), 유기 박막 트랜지스터 (OTFT), 유기 발광 트랜지스터 (OLET), 유기 태양 전지 (OSC), 유기 광검출기, 유기 광수용체, 유기 전계-켄치 소자 (OFQD), 유기 발광 전기화학 전지 (OLEC, LEC 또는 LEEC), 유기 레이저 다이오드 (O-laser) 및 유기 발광 다이오드 (OLED) 로 이루어진 군으로부터 선택된다. 특히 바람직한 것은 유기 전계발광 소자이고, 매우 특히 바람직하게는 OLEC 및 OLED 이고, 특히 바람직하게는 OLED 이다.

[0249] 본 발명은, 상기 이미 언급된 바와 같이, 하나 이상의 화학식 (I) 의 화합물을 포함하는 전자 소자에 관한 것이다. 여기서, 전자 소자는 바람직하게는 상기 언급된 소자로부터 선택된다. 특히 바람직한 것은 유기 전계발광 소자이고, 매우 특히 바람직하게는 발광층, 정공-수송층 또는 또 다른 층일 수 있는 하나 이상의 유기층이, 하나 이상의 화학식 (1) 의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는, 애노드, 캐소드 및 하나 이상의 발광층을 포함하는 OLED 이다.

[0250] 캐소드, 애노드 및 발광층 이외에, 유기 전계발광 소자는 또한 추가 층을 포함할 수 있다. 이는, 예를 들어, 각각의 경우, 하나 이상의 정공-주입층, 정공-수송층, 정공-차단층, 전자-수송층, 전자-주입층, 전자-차단층, 여기자-차단층, 중간층, 전하-생성층 (IDMC 2003, Taiwan; Session 21 OLED (5), T. Matsumoto, T. Nakada, J. Endo, K. Mori, N. Kawamura, A. Yokoi, J. Kido, Multiphoton Organic EL Device Having Charge Generation Layer) 및/또는 유기 또는 무기 p/n 접합으로부터 선택된다. 하지만, 각각의 이러한 층이 반드시 존재해야할 필요는 없으며, 층의 선택은 항상 사용되는 화합물, 및 특히 또한 상기 전계발광 소자가 형광 또는 인광인지 여부에 따라 달라진다는 것에 유의해야 한다.

[0251] 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자는 다수의 발광층을 포함할 수 있다. 이러한 경우, 특히 바람직하게는, 이러한 발광층은 종합적으로 백색 발광을 초래하도록 전체적으로 380 nm 내지 750 nm 에서 다수의 발광 최대값을 갖고; 즉 형광 또는 인광일 수 있고 청색 또는 황색 또는 주황색 또는 적색 광을 발광할 수 있는 각종 발광 화합물이 발광층에 사용된다. 3-층 시스템, 즉 3 개의 발광층을 갖는 시스템이 특히 바람직하며, 여기서 3 개의 층은 청색, 녹색 및 주황색 또는 적색 발광을 나타낸다 (기본 구조에 대하여, 예를 들어 WO 2005/011013 참조). 본 발명에 따른 화합물은 상기와 같은 소자에서 정공-수송층, 발광층 및/또는 또 다른 층에 존재할

수 있다. 백색 광의 생성을 위하여, 하나의 색상을 발광하는 다수의 발광체 화합물보다, 넓은 파장 범위에서 발광하는 개별적으로 사용되는 발광체 화합물이 또한 적합할 수 있다는 점에 유의해야 한다.

[0252] 화학식 (1) 의 화합물이, 하나 이상의 인광 도펀트를 포함하는 전계발광 소자에 사용되는 경우가 본 발명에 있어서 바람직하다. 여기서, 상기 화합물은 각종 층, 바람직하게는 정공-수송층, 정공-주입층 또는 발광층에 사용될 수 있다. 하지만, 화학식 (1) 의 화합물은 또한 본 발명에 따라 하나 이상의 형광 도펀트를 포함하는 전자 소자에 이용될 수 있다.

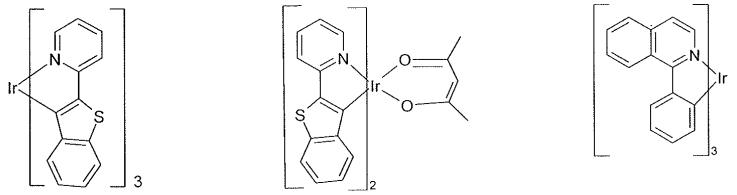
[0253] 용어 인광 도펀트는, 통상적으로, 스핀-금지 전이, 예를 들어 여기된 삼중항 상태 또는 비교적 높은 스핀 양자수를 갖는 상태, 예를 들어 오중항 상태로부터의 전이를 통해 발광이 일어나는 화합물을 포함한다.

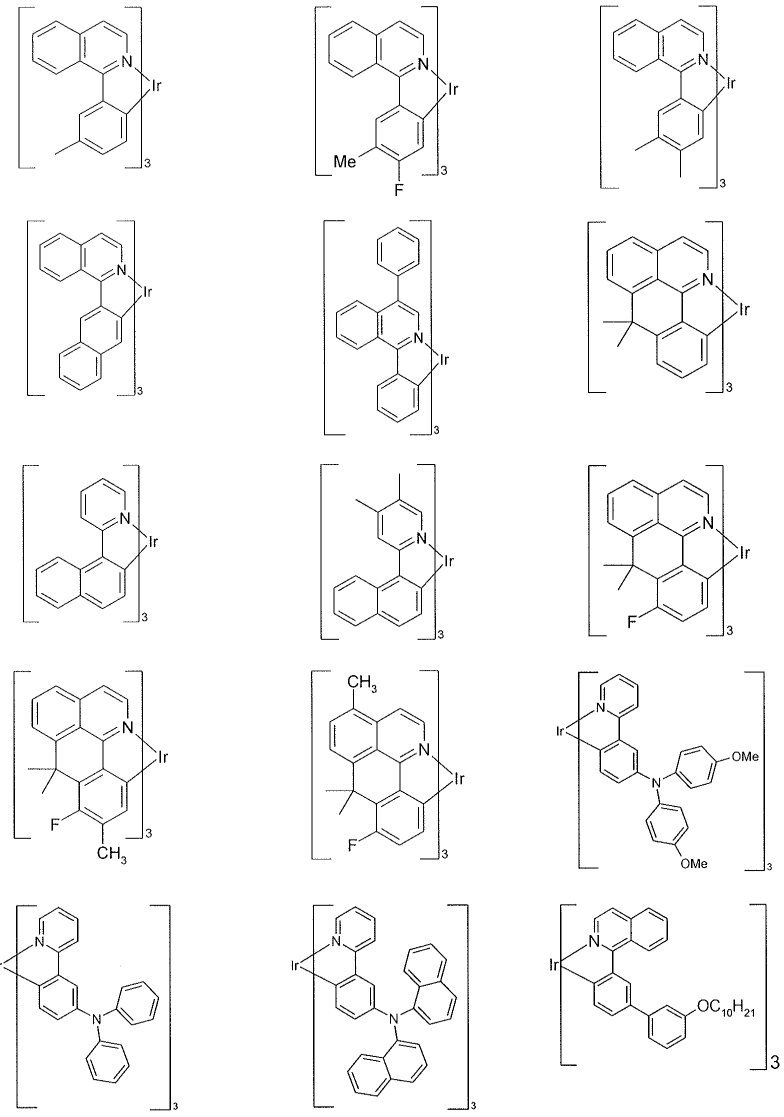
[0254] 적합한 인광 도펀트 (= 삼중항 발광체) 는, 특히, 적합하게 여기되는 경우, 바람직하게는 가시 범위에서 발광하고, 또한 20 초과, 바람직하게는 38 초과 내지 84 미만, 특히 바람직하게는 56 초과 내지 80 미만의 원자 번호를 갖는 하나 이상의 원자를 함유하는 화합물이다. 바람직하게는 구리, 몰리브덴, 텅스텐, 레늄, 루테늄, 오스뮴, 로듐, 이리듐, 팔라듐, 백금, 은, 금 또는 유로퓸을 함유하는 화합물, 특히 이리듐, 백금 또는 구리를 함유하는 화합물이 인광 발광체로 사용된다.

[0255] 본 발명의 목적을 위하여, 모든 발광성 이리듐, 백금 또는 구리 착물이 인광 화합물로서 간주된다.

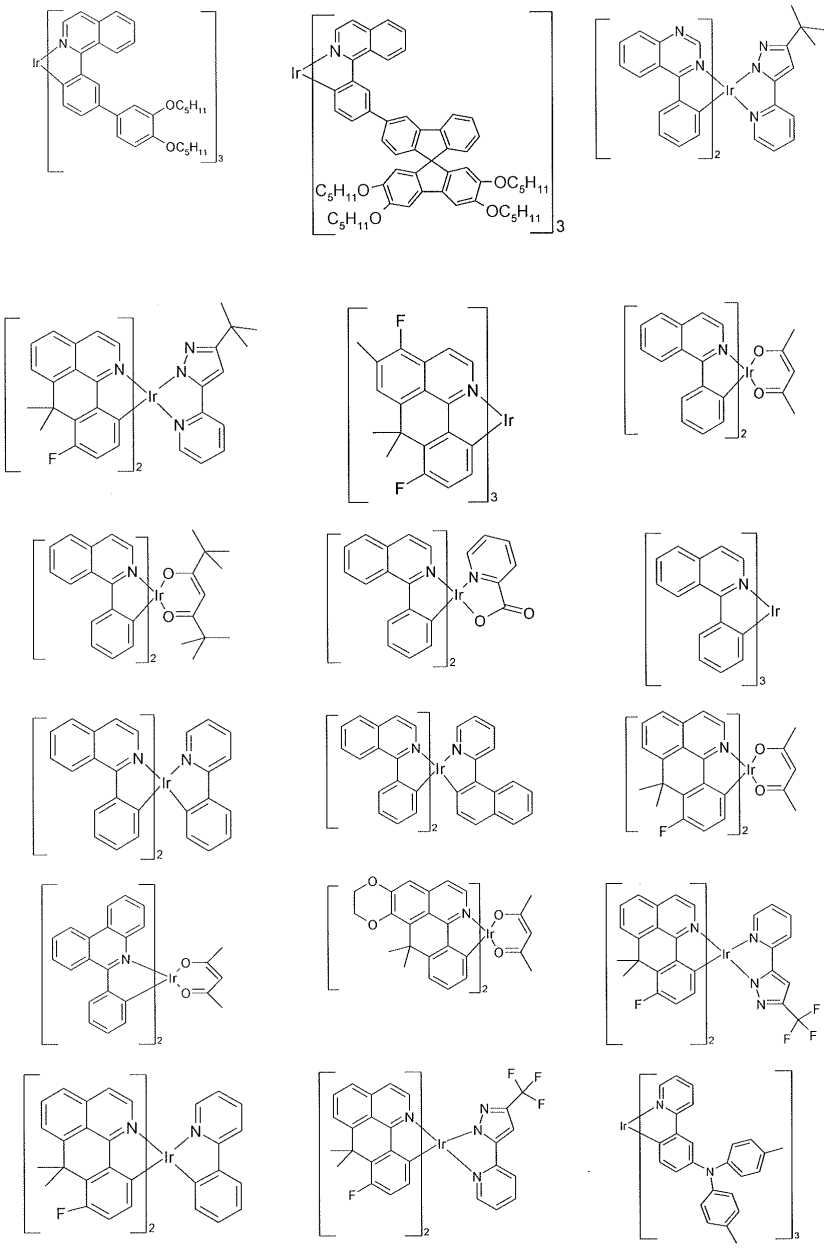
[0256] 상기 기재된 발광체의 예는, 특허출원 WO 00/70655, WO 01/41512, WO 02/02714, WO 02/15645, EP 1191613, EP 1191612, EP 1191614, WO 05/033244, WO 05/019373 및 US 2005/0258742 에 제시되어 있다. 일반적으로, 선행기술에 따라 인광 OLED 에 사용되고 유기 전계발광 소자 분야의 당업자에게 공지되어 있는 모든 인광 착물이, 적합하다. 당업자는 또한, 진보성 없이, 추가의 인광 착물을 유기 전계발광 소자에서 화학식 (1) 의 화합물과 조합으로 이용할 수 있을 것이다.

[0257] 나아가, 적합한 인광 발광체 화합물의 명시적인 예는 하기 표에 제시되는 바와 같다.

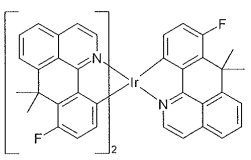
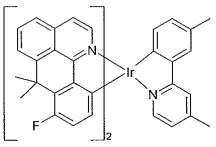
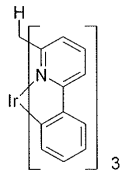
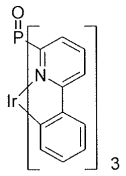
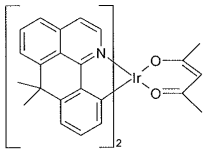
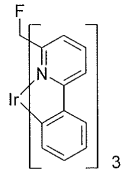
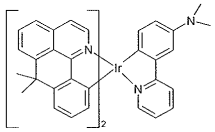
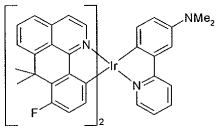
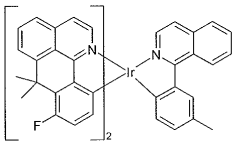
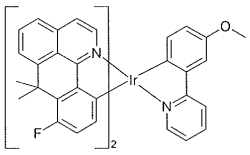
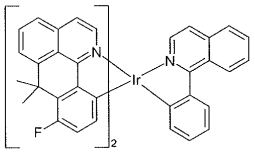
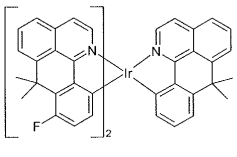
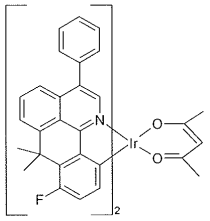
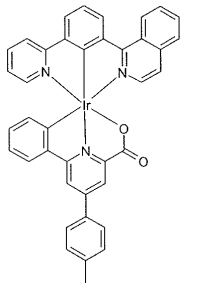
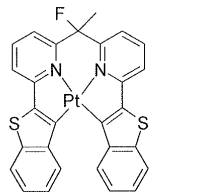
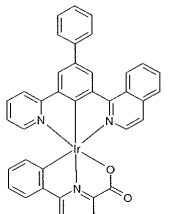
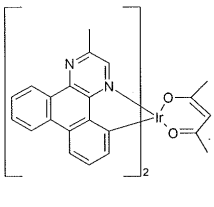
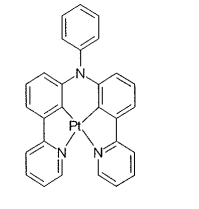
[0258] 



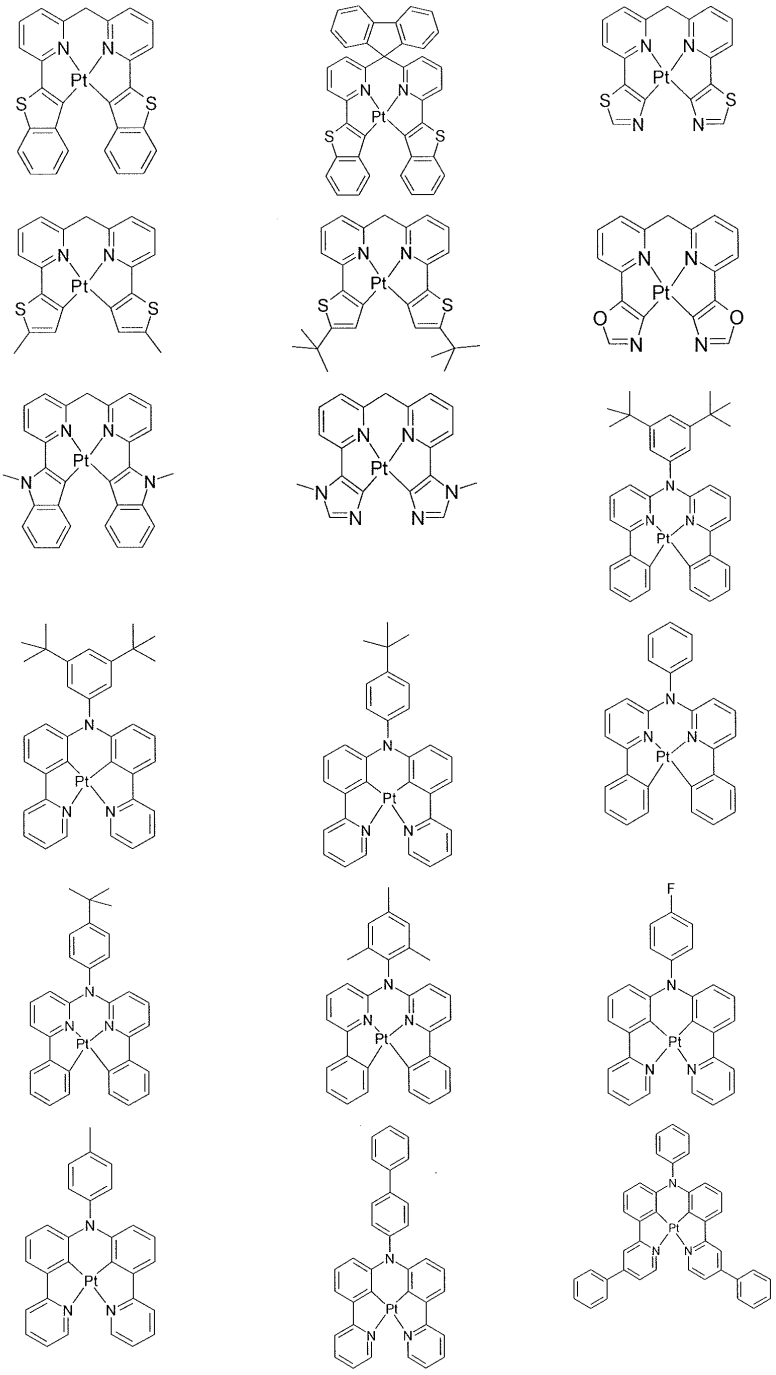
[0259]



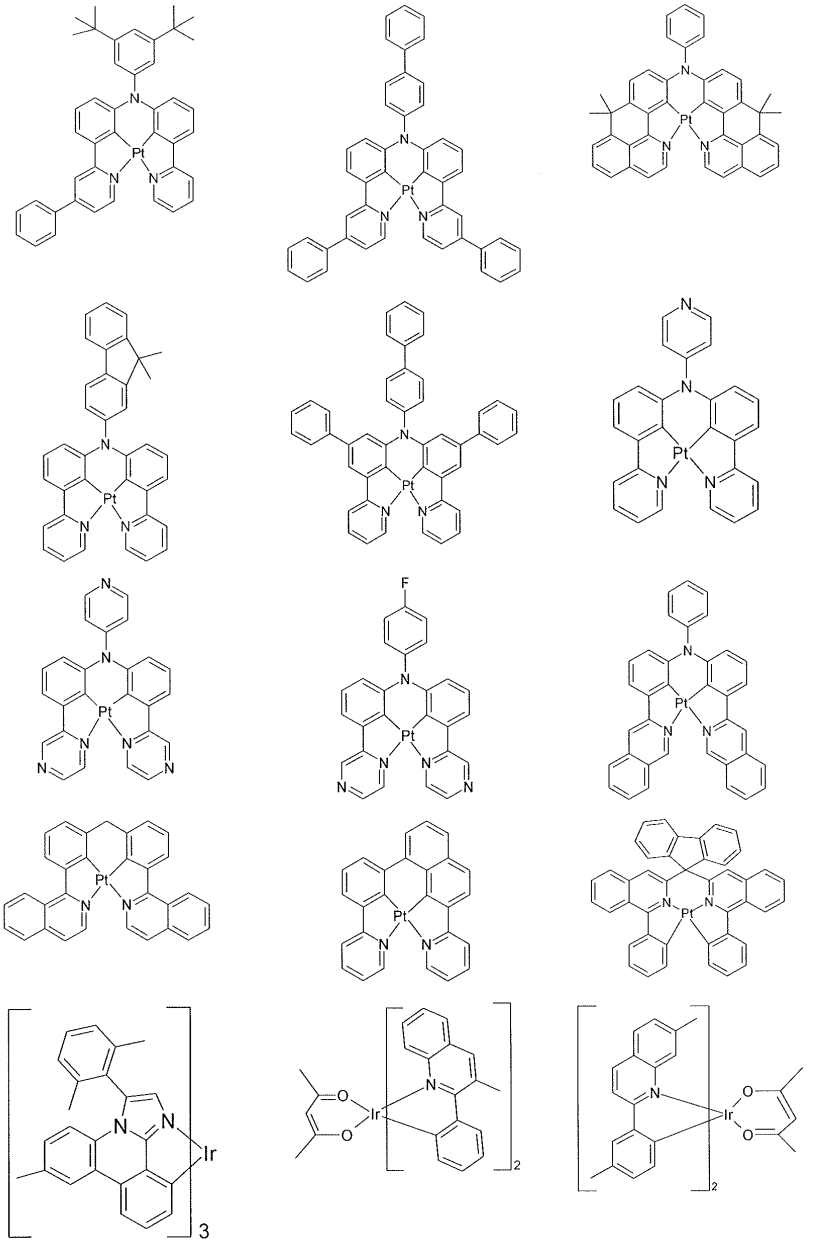
[0260]

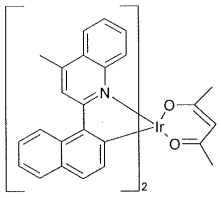
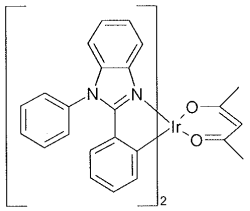
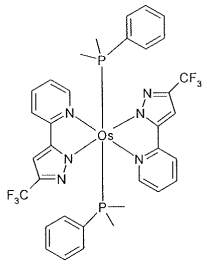
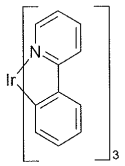
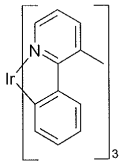
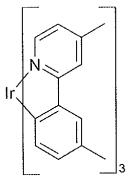
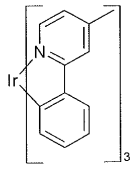
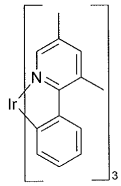
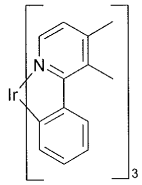
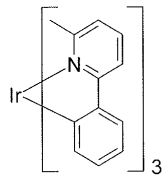
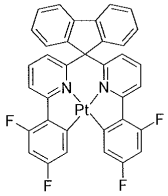
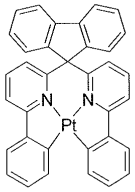
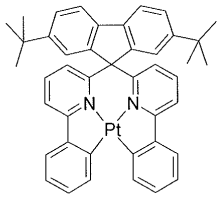
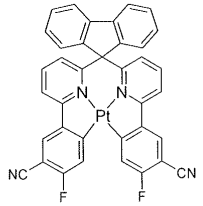
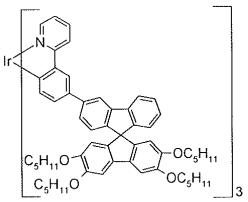
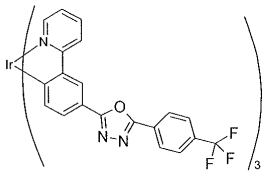
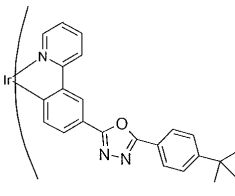
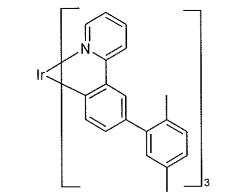
[0261]



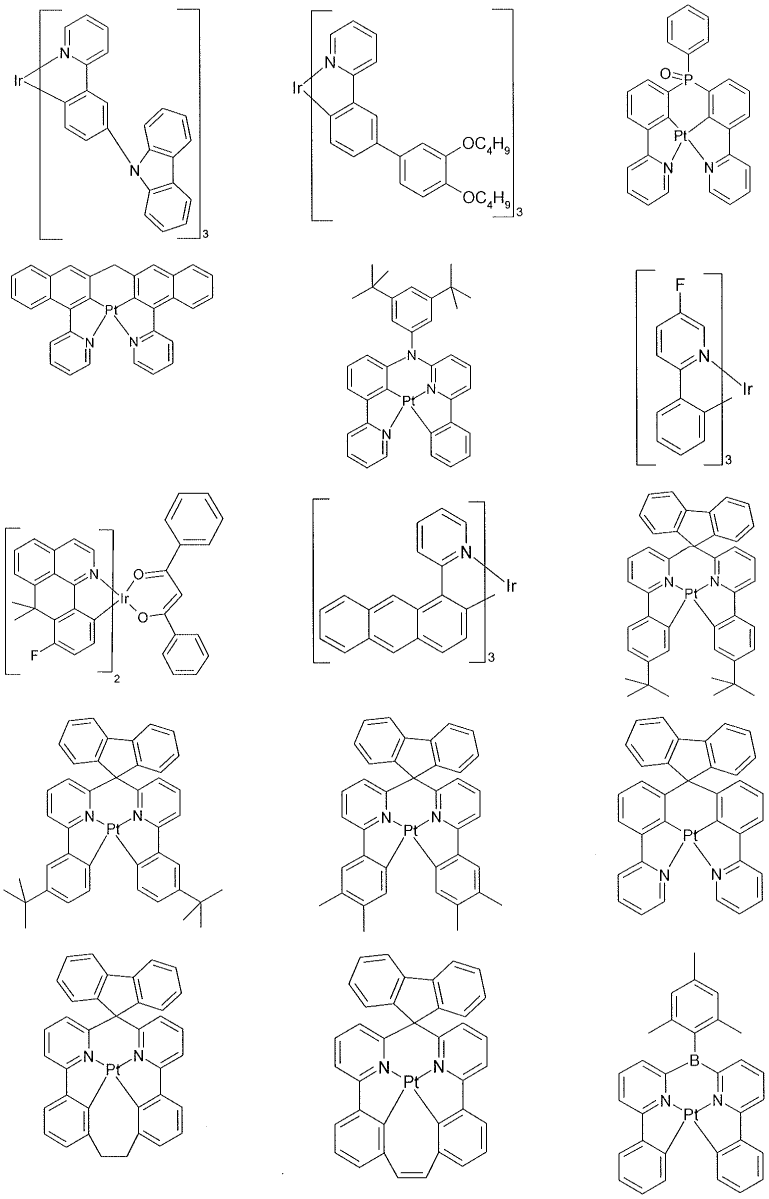
[0262]



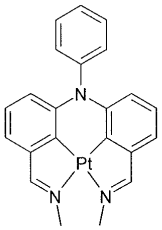
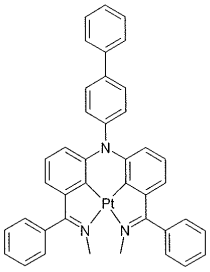
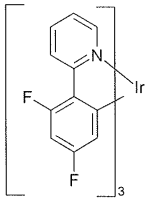
[0263]

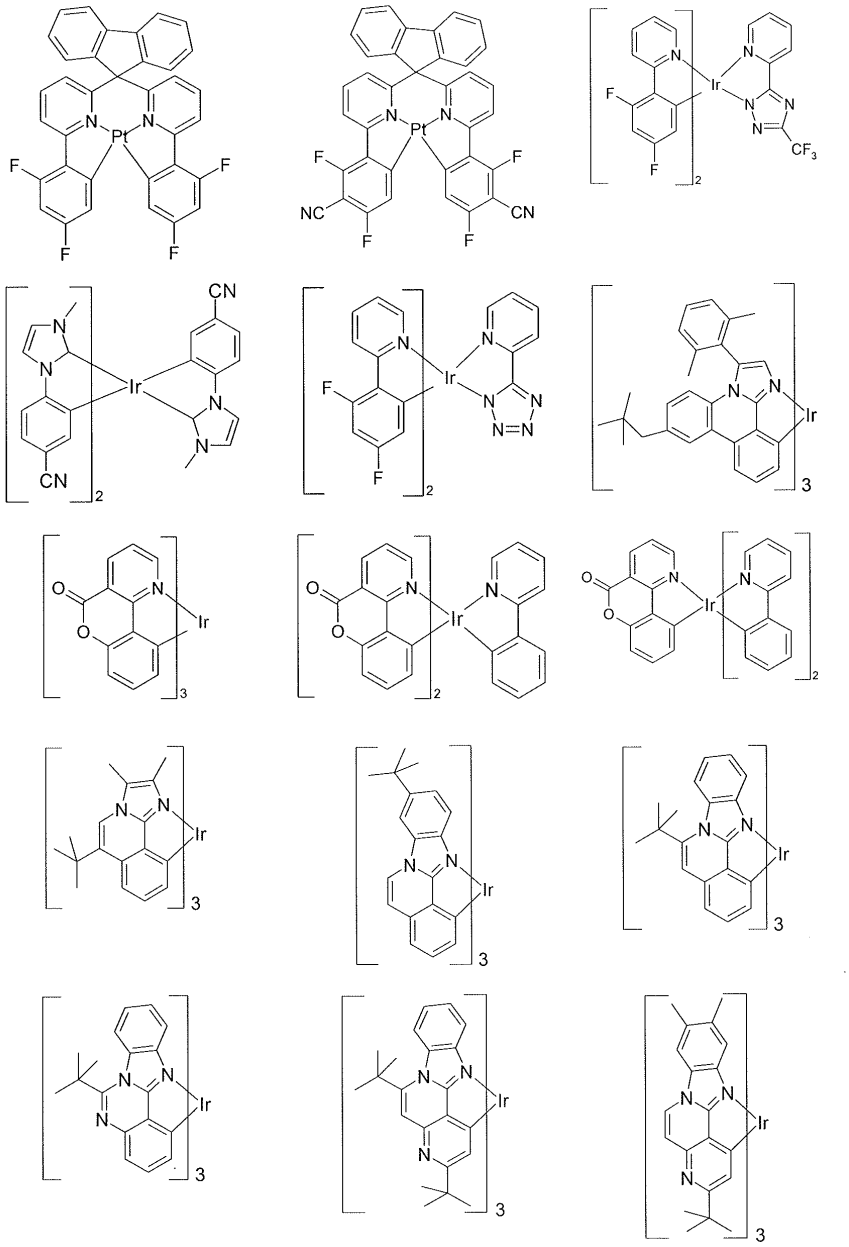



















[0264]



[0265]



[0267]

[0268] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 일반식 (I) 의 화합물은 정공-수송 물질로서 이용된다. 따라서, 상기 화합물은 바람직하게는 정공-수송층, 전자-차단층 및/또는 정공-주입층에 이용된다. 본 발명의 의미에서 정공-주입층은 애노드에 바로 인접한 층이다. 본 발명의 의미에서 정공-수송층은 정공-주입층과 발광층 사이에 위치한 층이다. 정공-수송층은 발광층에 바로 인접해 있을 수 있다. 화학식 (1) 의 화합물이 정공-수송 물질 또는 정공-주입 물질로서 사용되는 경우, 이는 전자-수용체 화합물 (p-도핑), 예를 들어 F_4-TCNQ, F_6-TNAP 또는 EP 1476881 또는 EP 1596445 에 기재된 화합물로 도핑되는 것이 바람직할 수 있다. 본 발명의 보다 바람직한 구현예에서, 화학식 (1) 의 화합물은 US 2007/0092755 에 기재된 바와 같이, 헥사아자트리페닐렌 유도체와 조합으로 정공-수송 물질로서 사용된다. 여기서, 헥사아자트리페닐렌 유도체는 특히 바람직하게는 별개의 층에 이용된다.

[0269] 일반식 (1) 의 화합물이 정공-수송층에서 정공-수송 물질로서 이용되는 경우, 상기 화합물은 정공-수송층에 순수한 물질로서, 즉 100% 의 비율로 이용될 수 있거나, 또는 정공-수송층에 하나 이상 추가 화합물과의 조합으로 이용될 수 있다.

[0270] 본 발명의 추가 구현예에서, 일반식 (1) 의 화합물은 발광 물질로서 이용된다. 이를 위하여, 상기 화합물은 바람직하게는 발광층에 이용된다. 하나 이상의 일반식 (1) 의 화합물 이외에, 발광층은 하나 이상의 호스트 물질을 추가로 포함한다. 당업자는 공지된 호스트 물질로부터 어려움 없이 및 진보성 없이 선택할 수 있을

것이다.

[0271] 본 발명의 추가 구현예에서, 일반식 (1) 의 화합물은 하나 이상의 도펀트, 바람직하게는 인광 도펀트와 조합으로 매트릭스 물질로서 이용된다.

[0272] 매트릭스 물질 및 도펀트를 포함하는 시스템에서 도펀트는, 혼합물 중 비율이 보다 작은 성분을 의미하는 것으로 의도된다. 따라서, 매트릭스 물질은, 매트릭스 물질 및 도펀트를 포함하는 시스템에서 혼합물 중 비율이 보다 큰 성분을 의미하는 것으로 의도된다.

[0273] 이러한 경우, 발광층에서 매트릭스 물질의 비율은 형광 발광층의 경우, 50.0 내지 99.9 부피%, 바람직하게는 80.0 내지 99.5 부피% 및 특히 바람직하게는 92.0 내지 99.5 부피% 이고, 인광 발광층의 경우, 85.0 내지 97.0 부피% 이다.

[0274] 따라서, 상기 도펀트의 비율은 형광 발광층의 경우, 0.1 내지 50.0 부피%, 바람직하게는 0.5 내지 20.0 부피% 및 특히 바람직하게는 0.5 내지 8.0 부피% 이고, 인광 발광층의 경우, 3.0 내지 15.0 부피% 이다.

[0275] 유기 전계발광 소자의 발광층은 또한 다수의 매트릭스 물질 (혼합-매트릭스 시스템 (mixed-matrix systems)) 및/또는 다수의 도펀트를 포함하는 시스템을 포함할 수 있다. 이러한 경우 마찬가지로, 도펀트는 일반적으로 시스템에서 이의 비율이 보다 작은 물질이고, 매트릭스 물질은 시스템에서 이의 비율이 보다 큰 물질이다. 하지만, 각각의 경우, 시스템에서 개별적인 매트릭스 물질의 비율은 개별적인 도펀트의 비율보다 더 작을 수 있다.

[0276] 본 발명의 보다 바람직한 구현예에서, 일반식 (I) 의 화합물은 혼합-매트릭스 시스템의 성분으로서 사용된다.

상기 혼합-매트릭스 시스템은 바람직하게는 2 또는 3 종의 상이한 매트릭스 물질, 특히 바람직하게는 2 종의 상이한 매트릭스 물질을 포함한다. 여기서, 2 종의 물질 중 하나는 바람직하게는 정공-수송 특성을 갖는 물질이고, 다른 하나의 물질은 전자-수송 특성을 갖는 물질이다. 하지만, 혼합-매트릭스 성분의 목적하는 전자-수송 및 정공-수송 특성은 또한 주로 또는 전적으로 단일 혼합-매트릭스 성분으로 조합될 수 있고, 여기서 추가의 혼합-매트릭스 성분(들)이 다른 기능을 충족시킨다. 여기서 2 종의 상이한 매트릭스 물질은 1:50 내지 1:1, 바람직하게는 1:20 내지 1:1, 특히 바람직하게는 1:10 내지 1:1 및 매우 특히 바람직하게는 1:4 내지 1:1 의 비로 존재할 수 있다. 혼합-매트릭스 시스템은 바람직하게는 인광 유기 전계발광 소자에 이용된다.

혼합-매트릭스 시스템에 대한 보다 구체적인 정보는, 특히, 특허출원 WO 2010/108579 에 제시되어 있다.

[0277] 혼합-매트릭스 시스템은 하나 이상의 도펀트, 바람직하게는 하나 이상의 인광 도펀트를 포함할 수 있다. 일반적으로, 혼합-매트릭스 시스템은 바람직하게는 인광 유기 전계발광 소자에 이용된다.

[0278] 혼합-매트릭스 시스템의 매트릭스 성분으로서 본 발명에 따른 화합물과 조합으로 사용될 수 있는 특히 적합한 매트릭스 물질은, 어떠한 유형의 도펀트가 혼합-매트릭스 시스템에 이용되는지에 따라, 하기 제시되는 인광 도펀트용으로 바람직한 매트릭스 물질 또는 형광 도펀트용으로 바람직한 매트릭스 물질로부터 선택된다.

[0279] 혼합-매트릭스 시스템에 사용하기에 바람직한 인광 도펀트는 상기 표에 제시된 인광 도펀트이다.

[0280] 여기서 p-도펀트는 산화제, 즉 전자 수용체를 의미하는 것으로 의도된다. p-도펀트의 바람직한 예는, F_4-TCNQ, F_6-TNAP, NDP-2 (Novaled), NDP-9 (Novaled), 퀴논 (예를 들어 EP 1538684 A1, WO 2006/081780 A1, WO 2009/003455 A1, WO 2010/097433 A1), 라디알렌 (radialene) (예를 들어 EP 1988587 A1, US 2010/102709 A1, EP 2180029 A1, WO 2011/131185 A1, WO 2011/134458 A1, US 2012/223296 A1), S-함유 전이금속 착물 (예를 들어 WO 2007/134873 A1, WO 2008/061517 A2, WO 2008/061518 A2, DE 102008051737 A1, WO 2009/089821 A1, US 2010/096600 A1), 비스이미다졸 (예를 들어 WO 2008/138580 A1), 프탈로시아닌 (예를 들어 WO 2008/058525 A2), 보라-테트라아자펜탈렌 (예를 들어 WO 2007/115540 A1), 풀러렌 (예를 들어 DE 102010046040 A1) 및 주족 할라이드 (예를 들어 WO 2008/128519 A2) 이다.

[0281] 본 발명에 따른 소자에서 관련 기능으로 바람직하게 이용되는 물질은 하기에 제시되는 바와 같다.

[0282] 바람직한 형광 도펀트는 아릴아민의 부류로부터 선택된다. 본 발명의 의미에서 아릴아민 또는 방향족 아민은 질소에 직접 결합된 3 개의 치환 또는 미치환 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 함유하는 화합물을 의미하는 것으로 의도된다. 이러한 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 중 하나 이상은 바람직하게는 축합된 고리 시스템, 특히 바람직하게는 14 개 이상의 방향족 고리 원자를 갖는 축합된 고리 시스템이다. 이의 바람직한 예는 방향족 안트라센아민, 방향족 안트라센디아민, 방향족 피렌아민, 방향족 피렌디아민, 방향족

크리센아민 또는 방향족 크리센디아민이다. 방향족 안트라센아민은 1 개의 디아릴아미노기가 바람직하게는 9-위치에서 안트라센기에 직접 결합된 화합물을 의미하는 것으로 의도된다. 방향족 안트라센디아민은 2 개의 디아릴아미노기가 바람직하게는 9,10-위치에서 안트라센기에 직접 결합된 화합물을 의미하는 것으로 의도된다. 방향족 피렌아민, 피렌디아민, 크리센아민 및 크리센디아민은 이와 유사하게 정의되며, 여기서 디아릴아미노기는 바람직하게는 1-위치 또는 1,6-위치에서 피렌에 결합된다.

[0283] 본 발명에 따른 화합물 이외에, 바람직하게는 형광 도펀트용으로 적합한 매트릭스 물질은, 각종 물질의 부류로부터의 물질이다. 바람직한 매트릭스 물질은 올리고아릴렌 (예를 들어 EP 676461 에 따른 2,2',7,7'-테트라페닐스피로바이플루오렌 또는 디나프틸안트라센), 특히 축합된 방향족기 함유 올리고아릴렌, 올리고아릴렌비닐렌 (예를 들어 EP 676461 에 따른 DPVBi 또는 스피로-DPVBi), 다지 (polypodal) 금속 착물 (예를 들어 WO 2004/081017 에 따름), 정공-전도성 화합물 (예를 들어 WO 2004/058911 에 따름), 전자-전도성 화합물, 특히 케톤, 포스핀 옥시드, 술폭시드 등 (예를 들어 WO 2005/084081 및 WO 2005/084082 에 따름), 아트로프이성질체 (atropisomer) (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 부류로부터 선택된다. 특히 바람직한 매트릭스 물질은 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센 및/또는 피렌 또는 이러한 화합물들의 아트로프이성질체를 포함하는 올리고아릴렌, 올리고아릴렌비닐렌, 케톤, 포스핀 옥시드 및 술폭시드의 부류로부터 선택된다. 매우 특히 바람직한 매트릭스 물질은 안트라센, 벤즈안트라센, 벤조페난트렌 및/또는 피렌 또는 이러한 화합물들의 아트로프이성질체를 포함하는 올리고아릴렌 부류로부터 선택된다. 본 발명의 의미에서 올리고아릴렌은 3 개 이상의 아릴 또는 아릴렌기가 서로 결합된 화합물을 의미하는 것으로 의도된다.

[0284] 본 발명에 따른 화합물 이외에, 인광 도펀트용으로 바람직한 매트릭스 물질은, 방향족 아민, 특히 트리아릴아민 (예를 들어 US 2005/0069729 에 따름), 카르바졸 유도체 (예를 들어 CBP, N,N-비스카르바졸릴바이페닐) 또는 WO 2005/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527 또는 WO 2008/086851 에 따른 화합물, 브릿지된 카르바졸 유도체 (예를 들어 WO 2011/088877 및 WO 2011/128017 에 따름), 인데노카르바졸 유도체 (예를 들어 WO 2010/136109 및 WO 2011/000455 에 따름), 아자카르바졸 유도체 (예를 들어 EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160 에 따름), 인돌로카르바졸 유도체 (예를 들어 WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따름), 케톤 (예를 들어 WO 2004/093207 또는 WO 2010/006680 에 따름), 포스핀 옥시드, 술폭시드 및 술폰 (예를 들어 WO 2005/003253 에 따름), 올리고페닐렌, 양극성 매트릭스 물질 (예를 들어 WO 2007/137725 에 따름), 실란 (예를 들어 WO 2005/111172 에 따름), 아자보롤 또는 보론산 에스테르 (예를 들어 WO 2006/117052 에 따름), 트리아진 유도체 (예를 들어 WO 2010/015306, WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따름), 아연 착물 (예를 들어 EP 652273 또는 WO 2009/62578 에 따름), 알루미늄 착물 (예를 들어 BAlq), 디아자실롤 및 테트라아자실롤 유도체 (예를 들어 WO 2010/054729 에 따름), 디아자포스폴 유도체 (예를 들어 WO 2010/054730 에 따름) 및 알루미늄 착물 (예를 들어 BAlq) 이다.

[0285] 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자의 정공-주입 또는 정공-수송층에 또는 전자-수송층에 사용될 수 있는 적합한 전하-수송 물질은, 예를 들어 [Y. Shirota et al., *Chem. Rev.* **2007**, *107(4)*, 953-1010] 에 개시된 화합물 또는 선행 기술에 따라 이러한 층에 이용되는 기타 물질이다.

[0286] 유기 전계발광 소자의 캐소드는 바람직하게는 낮은 일함수를 갖는 금속, 각종 금속, 예를 들어 알칼리 토금속, 알칼리 금속, 주족 금속 또는 란타노이드 (예를 들어 Ca, Ba, Mg, Al, In, Mg, Yb, Sm 등) 을 포함하는 금속 합금 또는 다중층 구조를 포함한다. 또한, 알칼리 금속 또는 알칼리 토금속 및 은을 포함하는 합금, 예를 들어 마그네슘 및 은을 포함하는 합금이 적합하다. 다중층 구조의 경우, 비교적 높은 일함수를 갖는 추가의 금속, 예를 들어 Ag 또는 Al 이 또한 상기 금속 이외에 사용될 수 있고, 이러한 경우, 금속의 조합, 예를 들어 Ca/Ag, Mg/Ag 또는 Ag/Ag 가 일반적으로 사용된다. 또한, 금속성 캐소드와 유기 반도체 사이에 높은 유전상수를 갖는 얇은 중간층 물질을 도입하는 것이 바람직할 수 있다. 상기 목적을 위하여, 예를 들어, 알칼리 금속 플루오라이드 또는 알칼리 토금속 플루오라이드 뿐 아니라, 해당 산화물 또는 탄산염 (예를 들어 LiF, Li_2O, BaF_2, MgO, NaF, CsF, Cs_2CO_3 등) 도 적합하다. 나아가, 리튬 퀴놀리네이트 (LiQ) 가 상기 목적을 위하여 사용될 수 있다. 이러한 층의 층 두께는 바람직하게는 0.5 내지 5 nm 이다.

[0287] 애노드는 바람직하게는 높은 일함수를 갖는 물질을 포함한다. 애노드는 바람직하게는 진공에 비해 4.5 eV 초과의 일함수를 갖는다. 상기 목적을 위하여, 한편으로는 높은 산화환원 전위를 갖는 금속, 예를 들어 Ag, Pt 또는 Au 이 적합하다. 다른 한편으로는, 금속/금속 산화물 전극 (예를 들어 Al/Ni/NiO_x, Al/PtO_x) 이 또한 바람직할 수 있다. 일부 적용에 있어서, 하나 이상의 전극은 유기 물질의 조사 (유기 태양 전지) 또는

광의 커플링-아웃 (OLED, O-laser) 을 가능하게 하기 위하여 투명하거나 부분적으로 투명해야 한다. 여기서, 바람직한 애노드 물질은 전도성 혼합 금속 산화물이다. 산화인듐주석 (ITO) 또는 산화인듐아연 (IZO) 이 특히 바람직하다. 나아가 전도성, 도핑된 유기 물질, 특히 전도성, 도핑된 폴리머가 바람직하다.

[0288] 본 발명에 따른 소자의 수명은 물 및/또는 공기의 존재 하에서 단축되기 때문에, 상기 소자는 적절하게 (용도에 따라) 구조화되고, 접촉부가 제공되고, 최종적으로 밀봉된다.

[0289] 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자는 하나 이상의 층이 승화 공정에 의해 코팅되며, 여기서 물질이 진공 승화 장치 내에서 10^{-5} mbar 미만, 바람직하게는 10^{-6} mbar 미만의 초기 압력에서 증기 증착에 의해 적용되는 것을 특징으로 한다. 하지만, 또한 여기서 상기 초기 압력은 더 낮아질 수도 있는데, 예를 들어 10^{-7} mbar 미만일 수 있다.

[0290] 마찬가지로, 하나 이상의 층이 OVPD (유기 증기상 증착) 공정에 의해 또는 운반 기체 (carrier-gas) 승화에 의해 코팅되며, 여기서 상기 물질이 10^{-5} mbar 내지 1 bar 의 압력에서 적용되는 것을 특징으로 하는, 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 상기 공정의 특별한 경우는 OVJP (유기 증기 제트 프린팅) 공정으로, 여기서 상기 물질은 노즐을 통해 직접 적용되어, 구조화된다 (예를 들어 [M. S. Arnold *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* 2008, *92*, 053301]).

[0291] 나아가, 하나 이상의 층이 용액으로부터, 예를 들어 스핀 코팅에 의해, 또는 임의의 목적하는 프린팅 공정, 예를 들어 스크린 프린팅, 플렉소그래피 프린팅, 노즐 프린팅 또는 오프셋 프린팅, 특히 바람직하게는 LITI (광 유도 열 이미지화 (light induced thermal imaging), 열 전사 프린팅) 또는 잉크젯 프린팅에 의해 제조되는 것을 특징으로 하는, 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 상기 목적을 위하여, 화학식 (I) 의 가용성 화합물이 요구된다. 높은 용해성은 상기 화합물의 적합한 치환을 통해 달성될 수 있다.

[0292] 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자의 제조를 위하여, 용액으로부터 하나 이상의 층을 적용하고, 승화 공정에 의해 하나 이상의 층을 적용하는 것이 보다 바람직하다.

[0293] 본 발명에 따라서, 하나 이상의 일반식 (I) 의 화합물을 포함하는 전자 소자는 디스플레이에서, 조명 적용에서 광원으로서 및 의료적 및/또는 미용적 적용 (예를 들어, 광선요법) 에서 광원으로서 이용될 수 있다.

[0294] 일반식 (1) 의 화합물을 포함하는 소자는 매우 다양한 방식으로 이용될 수 있다. 따라서, 예를 들어, 하나 이상의 일반식 (1) 의 화합물을 포함하는 전계발광 소자는 텔레비젼, 휴대폰, 컴퓨터 및 카메라용 디스플레이에 이용될 수 있다. 하지만, 상기 소자는 또한 조명 적용에 사용될 수도 있다. 나아가, 하나 이상의 일반식 (1) 의 화합물을 포함하는 전계발광 소자, 예를 들어 OLED 또는 OLEC 는, 의료적 또는 미용적 광선요법에 사용될 수 있다. 따라서, 다수의 질환 (건선, 아토피성 피부염, 염증, 여드름, 피부암 등) 을 치료할 수 있거나 또는 피부 주름, 피부 발적 및 피부 노화를 예방 또는 감소시킬 수 있다. 나아가, 상기 발광 소자는 음료수, 음식 또는 식품을 신선하게 유지시키는데 또는 장비 (예를 들어 의료 장비) 를 소독하는데 이용될 수 있다.

[0295] 본 발명에 따른 화합물 및 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자는 하기 놀라운 이점에 의해 선행 기술과 구분된다:

[0296] 1. 본 발명에 따른 화합물은 특히 이의 높은 정공 이동도로 인해, 전자 소자에서, 예를 들어 유기 전계발광 소자에서 정공-수송층 또는 정공-주입층에 사용하기에 매우 적합하다. 특히, 여기서 이는 또한 인광 발광층에 바로 인접한 층에 사용하기에 적합한데, 이는 본 발명에 따른 화합물이 발광을 소멸시키지 않기 때문이다.

[0297] 2. 형광 또는 인광 발광체용 매트릭스 물질로서 이용되는 본 발명에 따른 화합물은, 매우 높은 효율 및 긴 수명을 유도한다. 이는, 특히, 상기 화합물이 추가 매트릭스 물질 및 인광 발광체와 함께 매트릭스 물질로서 이용되는 경우에 그러하다.

[0298] 3. 유기 전계발광 소자에 이용되는 본 발명에 따른 화합물은, 높은 효율, 및 낮은 사용 및 작동 전압과 함께 가파른 전류/전압 곡선을 유도한다.

[0299] 4. 전자 소자에서, 특히 정공-수송 또는 정공-주입 물질로서 이용되는 본 발명에 따른 화합물의 사용은, 높은 효율, 낮은 작동 전압 및 긴 수명을 유도한다.

[0300] 5. 본 발명에 따른 화합물은 비교적 낮은 승화 온도, 고온 안정성 및 높은 산화 안정성 및 높은 유리 전이 온도를 갖는데, 이는, 예를 들어 용액 또는 기체상으로부터의 가공성 및 또한 전자 소자에서의 사용에 유리하다.

[0301] 6. 본 발명에 따른 화합물은 높은 산화 안정성을 갖는데, 이는 특히, 이러한 화합물의 취급 및 용액에 대한 저장 수명에 있어서 긍정적인 효과를 갖는다.

[0302] 본 발명에 기재된 구현예의 변형이 본 발명의 범위에 포함된다는 점에 유의해야 한다. 본 발명에 개시된 각각의 특징은, 명백하게 배제되지 않는 한, 동일한, 동등한 또는 유사한 목적으로 간주되는 대안적인 특징으로 대체될 수 있다. 따라서, 본 발명에 개시된 각각의 특징은, 달리 언급되지 않는 한, 일반적인 시리즈의 일례 또는 동등한 또는 유사한 특징으로서 간주되어야 한다.

[0303] 본 발명의 모든 특징은, 특정한 특징 및/또는 단계가 서로 배타적이지 않는 한, 임의의 방식으로 서로 조합될 수 있다. 이는 특히 본 발명의 바람직한 특징에 있어서 그러하다. 동일하게, 비(非)-본질적인 조합의 특징은 개별적으로 (조합이 아닌 것으로) 사용될 수 있다.

[0304] 나아가, 다수의 특징들, 및 특히 본 발명의 바람직한 구현예의 특징들은, 그 자체가 본 발명이며, 단지 본 발명의 구현예의 일부로서 간주되서는 안된다는 점에 유의해야 한다. 이러한 특징들에 있어서, 각각 현재 청구된 본 발명에 추가로 또는 대안으로서 독립적인 보호가 추구될 수 있다.

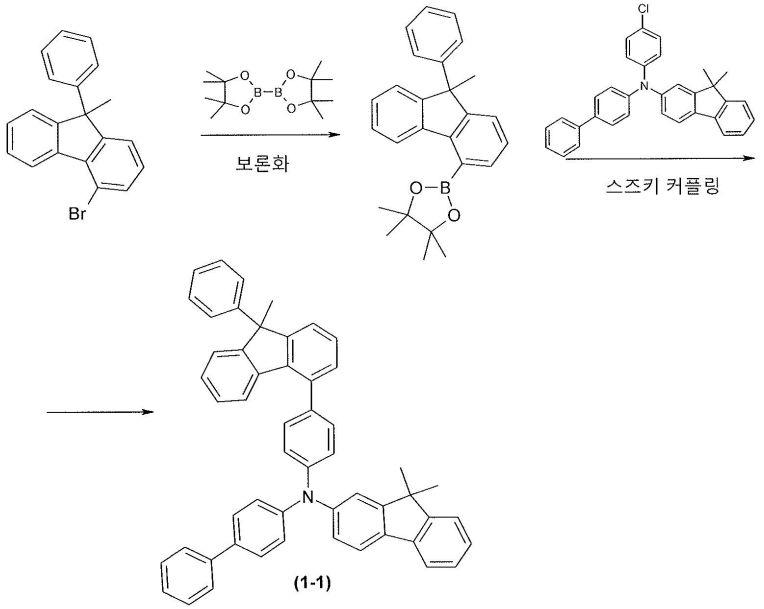
[0305] 본 발명에 개시된 기술적 조치에 대한 교시는 발췌 및 다른 실시예와 조합될 수 있다.

[0306] 본 발명을 하기 실시예로 보다 상세하게 설명할 것이나, 본 발명을 이로써 제한하고자 하는 것은 아니다.

[0307] **실시예**

[0308] **실시예 1**

[0309] **바이페닐-4-일-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)-[4-(9-메틸-9-페닐-9H-플루오렌-4-일)페닐]아민 (1-1) 및 화합물 (1-2) 내지 (1-17) 의 합성**



[0310]

[0311] **출발 물질: 4-브로모-9-메틸-9-디페닐-9H-플루오렌**

[0312] 50 g (157 mmol) 의 2,2'-디브로모바이페닐을 가열로 건조시킨 플라스크 내에서 500 ml 의 무수 THF 중에 용해시켰다. 반응 혼합물을 -78℃ 까지 냉각시켰다. 상기 온도에서, 63 ml 의 헥산 중 n-BuLi 2.5 M 용액 (157 mmol) 을 서서히 적가하였다 (기간: 약 1 시간). 배치를 -70℃ 에서 추가 1 시간 동안 교반하였다. 이어서, 18.9 g 의 아세토페논 (119 mmol) 을 100 ml 의 THF 중에 용해시키고, -70℃ 에서 적가하였다. 첨가를 완결하면, 반응 혼합물을 서서히 실온까지 가온시키고, NH_4Cl 을 사용하여 켄칭하고, 이어서 회전식 증발기에서 증발시켰다. 510 ml 의 아세트산을 상기 증발시킨 용액에 주의하여 첨가하고, 이어서 100 ml 의 발

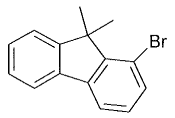
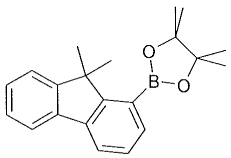
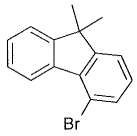
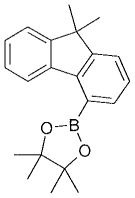
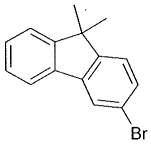
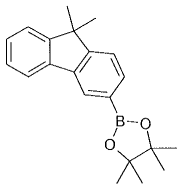
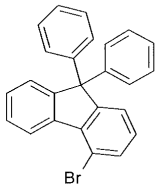
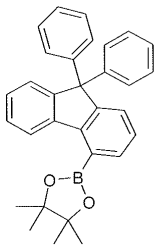
연 HCl 을 첨가하였다. 배치를 75℃ 까지 가열하고, 상기 온도에서 4 시간 동안 유지시켰다. 이러한 기간 중에 백색 고체가 석출되었다. 그 후, 배치를 실온까지 냉각시키고, 석출된 고체를 흡입으로 여과하고, 메탄올로 세정하였다. 잔류물을 진공 하에서 40℃ 에서 건조시켰다. 수율은 48 g (121 mmol) (이론치의 77%) 이었다.

[0313] **4,4,5,5-테트라메틸-2-(9-메틸-9-페닐-9H-플루오렌-4-일)-1,3,2-디옥사보롤란**

[0314] 50 g (125 mmol) 의 4-브로모플루오렌 유도체, 38.3 g (150 mmol) 의 비스(피나콜라토)디보란 및 35 g (378 mmol) 의 칼륨 아세테이트를 700 ml 의 디옥산 중에 현탁시켰다. DCM 과의 1,1-비스(디페닐포스피노)페로센 팔라듐(II) 디클로라이드 착물 3.08 g (3.78 mmol) 을 상기 현탁액에 첨가하였다. 반응 혼합물을 환류 하에서 14 시간 가열하였다. 냉각시킨 후, 유기상을 분리하고, 400 ml 의 물로 3회 세정하고, 이어서 건조될 때까지 증발시켰다. 잔류물을 톨루엔으로부터 재결정하였다 (42 g, 75% 수율).

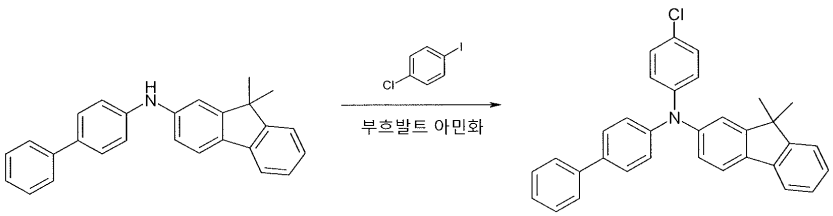
[0315] 하기 화합물들을 유사하게 제조하였다:

[0316]

출발 물질	생성물	수율
 CAS: 125053-54-2		83%
 CAS: 942615-32-9		78%
 CAS: 1190360-23-6		88%
 CAS: 713125-22-5		91%

[0317]

[0318] **중간체: 바이페닐-4-일-(4-클로로페닐)-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)아민**



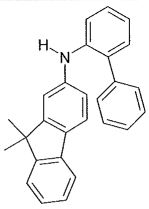
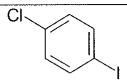
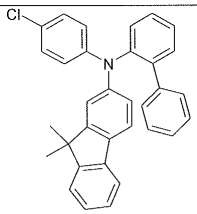
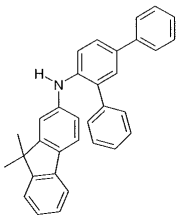
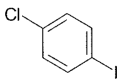
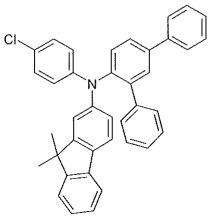
[0319]

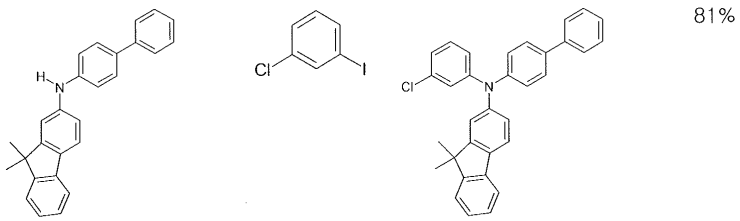
[0320] 40 g 의 바이페닐-4-일-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)아민 (111 mmol) 및 26.4 g 의 4-클로로요오도벤젠 (111 mmol) 을 700 ml 의 톨루엔 중에 용해시켰다. 상기 용액을 탈기하고, N_2 로 포화시켰다. 그 후, 4.43 ml (4.42 mmol) 의 1 M 트리-tert-부틸포스핀 용액 및 0.5 g (2.21 mmol) 의 팔라듐(II) 아세테이트를 첨가하

고, 이어서 15.9 g 의 나트륨 tert-부톡시드 (186 mmol) 를 첨가하였다. 반응 혼합물을 보호 분위기 하에서 12 시간 동안 비등시키면서 가열하였다. 이어서, 상기 혼합물을 톨루엔과 물 사이에 분배하고, 유기상을 물로 3회 세정하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 회전식 증발기에서 증발시켰다. 미정제 생성물을 톨루엔을 이용하여 실리카겔을 통해 여과한 후, 남아있는 잔류물을 헵탄/톨루엔으로부터 재결정하였다. 수율은 44.5 g (이론치의 85%) 이었다.

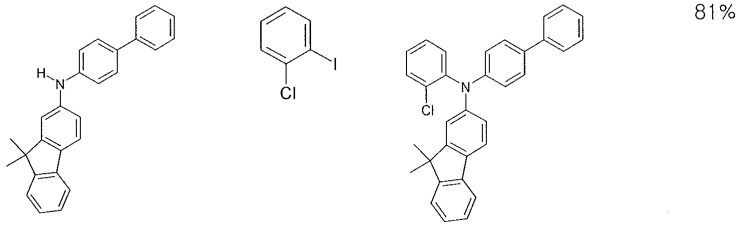
[0321] 하기 화합물들을 유사하게 제조하였다:

[0322]

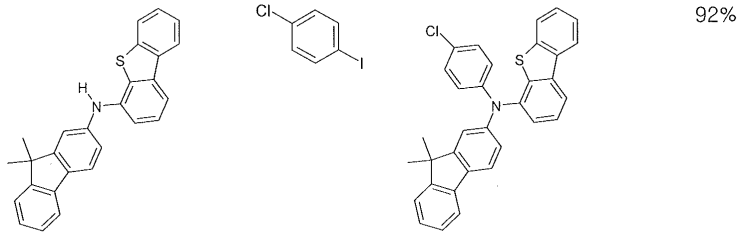
출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			78%
			80%



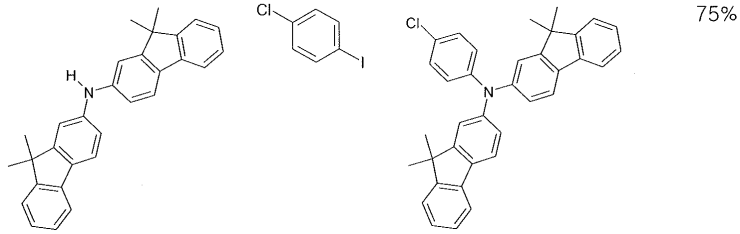
81%



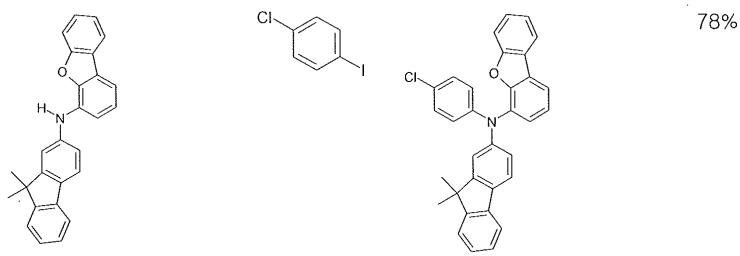
81%



92%

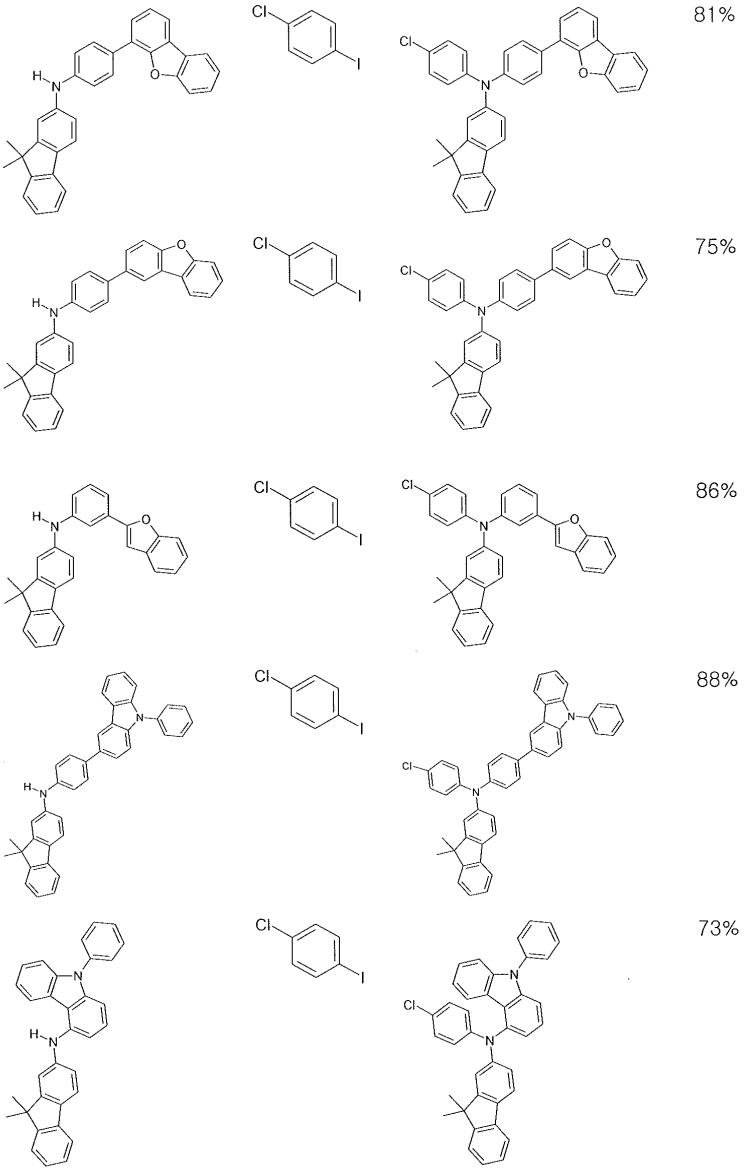


75%



78%

[0323]



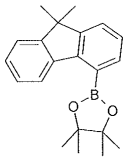
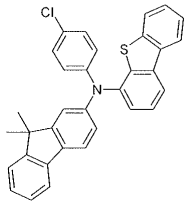
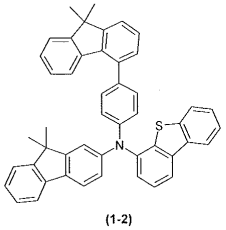
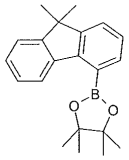
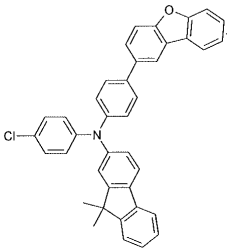
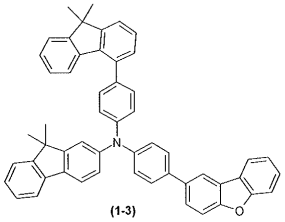
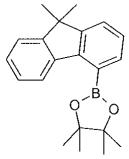
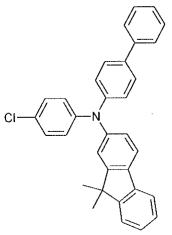
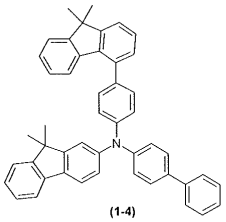
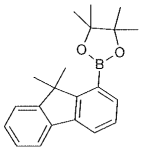
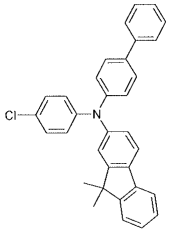
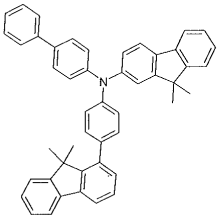
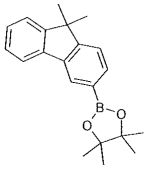
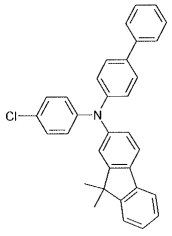
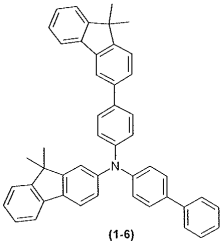
[0324]

[0325] **화합물 (1-1) 의 합성**

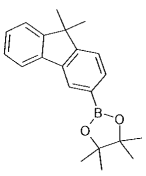
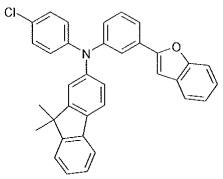
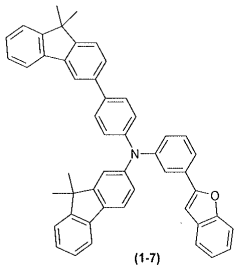
[0326] 20 g (44 mmol) 의 4-플루오렌피나콜로보론산 에스테르 유도체, 20.8 g (44 mmol) 의 염소 유도체 및 13.4 g 의 세슘 플루오라이드 (88.1 mmol) 를 265 ml 의 디옥산 중에 현탁시켰다. 3.9 g (5.28 mmol) 의 비스(트리시클로헥실포스핀)팔라듐 디클로라이드를 상기 현탁액에 첨가하고, 반응 혼합물을 환류 하에서 18 시간 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 유기상을 분리하고, 실리카겔을 통해 여과하고, 100 ml 의 물로 3회 세정하고, 이어서 건조될 때까지 증발시켰다. 미정제 생성물을 톨루엔을 이용하여 실리카겔을 통해 여과한 후, 남아있는 잔류물을 헵탄/톨루엔으로부터 재결정하고, 최종적으로 고 진공 하에서 승화시켰다. 순도는 99.9% 였다. 수율은 26.5 g (이론치의 80%) 이었다.

[0327] **화합물 (1-2) 내지 (1-17) 의 합성**

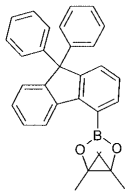
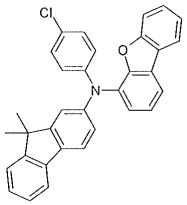
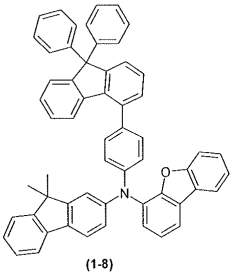
[0328] 하기 화합물 (1-2) 내지 (1-17) 을 또한 실시예 1 에 기재된 화합물 (1-1) 의 합성과 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
		 (1-2)	78%
		 (1-3)	70%
		 (1-4)	78%
		 (1-5)	80%
		 (1-6)	75%

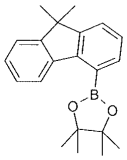
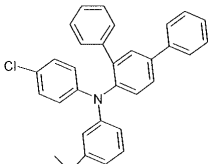
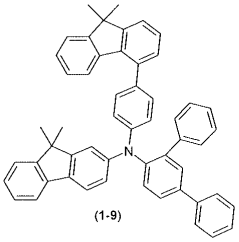
[0329]




(1-7)

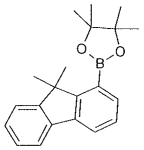
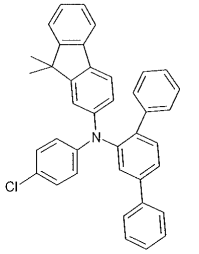
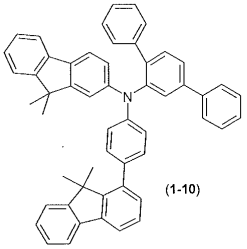
68%




(1-8)

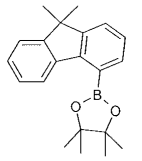
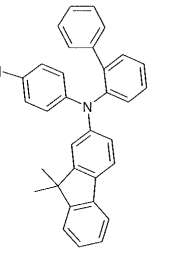
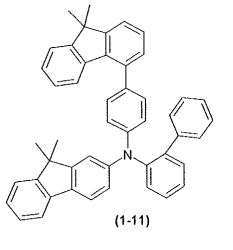
80%




(1-9)

75%

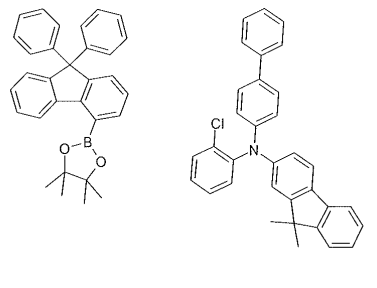



(1-10)

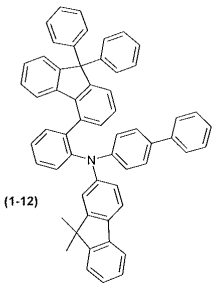
73%




(1-11)

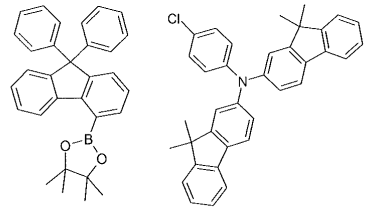
80%

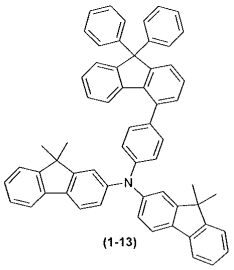
[0330]



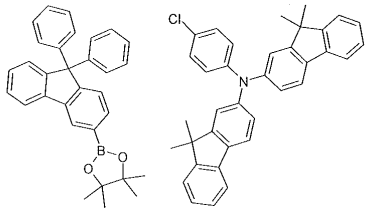

(1-12)

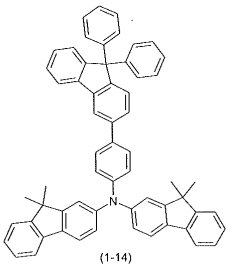
77%



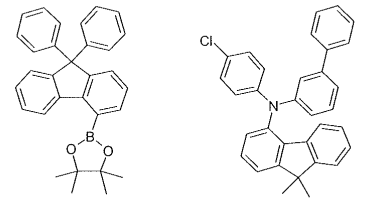

(1-13)

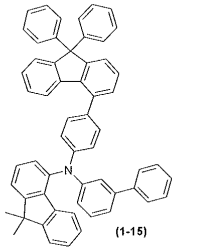
85%




(1-14)

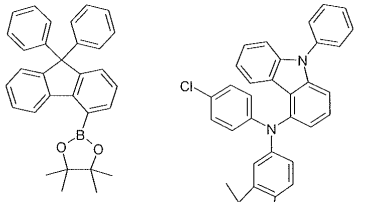
85%

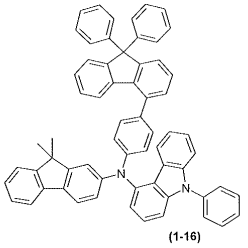



(1-15)

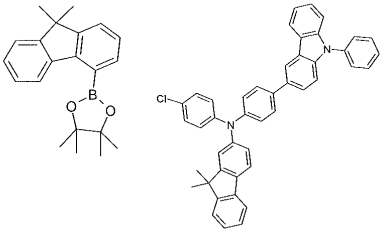
88%

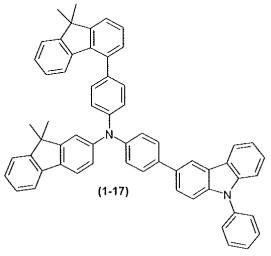
[0331]




(1-16)

75%



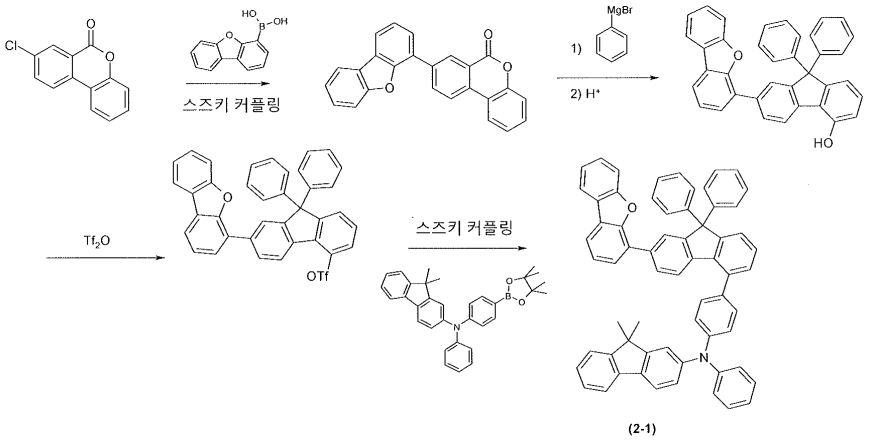

(1-17)

80%

[0332]

[0333] 실시예 2

[0334] 화합물 [4-(7-디벤조푸란-4-일-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)페닐]-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)페닐아민 (2-1) 및 화합물 (2-2) 내지 (2-6) 의 합성



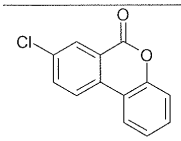
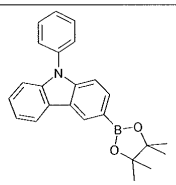
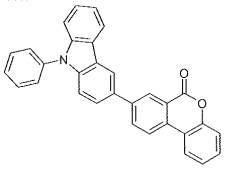
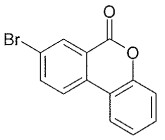
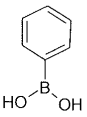
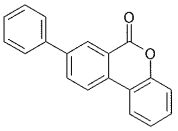
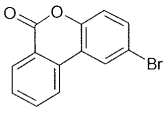
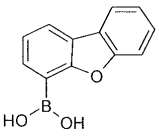
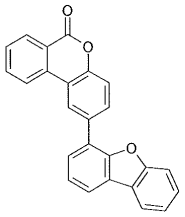
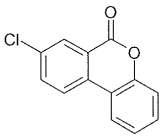
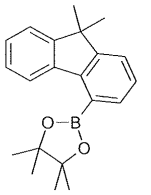
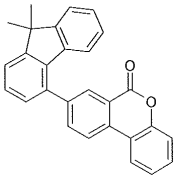
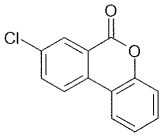
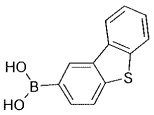
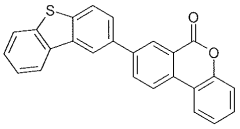
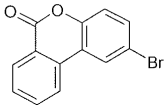
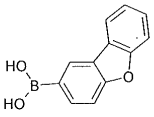
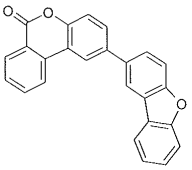
(2-1)

[0335]

[0336] **8-디벤조푸란-4-일벤조[c]크로멘-6-온**

[0337] 30.0 g (142 mmol) 의 디벤조푸란-4-보론산, 32 g (142 mmol) 의 8-클로로벤조[c]크로멘-6-온 (CAS: 742058-81-7) 및 43 g 의 세슘 플루오라이드 (283 mmol) 를 800 ml 의 디옥산 중에 현탁시켰다. 12.5 g (17 mmol) 의 비스(트리시클로헥실포스핀)팔라듐 디클로라이드를 상기 현탁액에 첨가하고, 반응 혼합물을 환류 하에서 18 시간 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 유기상을 분리하고, 실리카겔을 통해 여과하고, 100 ml 의 물로 3회 세정하고, 이어서 건조될 때까지 증발시켰다. 미정제 생성물을 톨루엔을 이용하여 실리카겔을 통해 여과한 후, 남아있는 잔류물을 헵탄/톨루엔으로부터 재결정하였다. 수율은 45 g (이론치의 88%) 이었다.

[0338] 하기 화합물들을 유사하게 제조하였다:

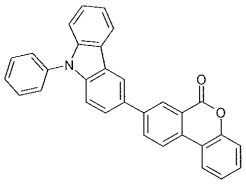
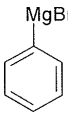
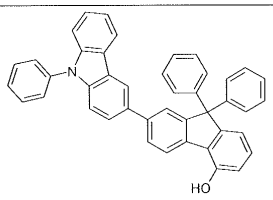
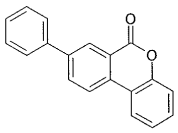
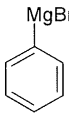
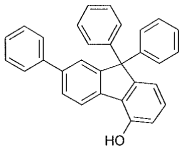
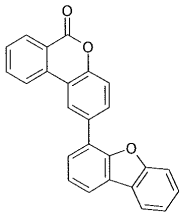
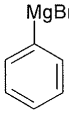
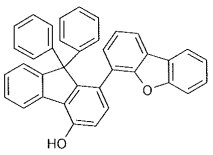
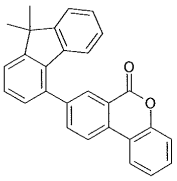
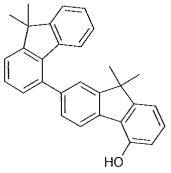
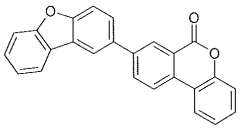
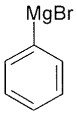
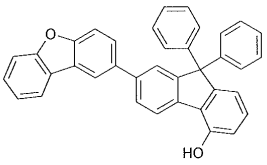
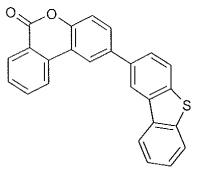
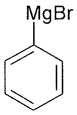
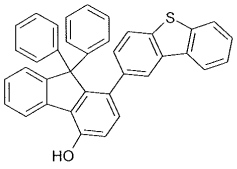
출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			84%
 CAS: 1447543-95-4			90%
 CAS:82466-16-8			85%
			76%
			81%
 CAS:82466-16-8			87%

[0339]

[0340] **7-디벤조푸란-4-일-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-올**

[0341] 25.4 g (70 mmol) 의 8-디벤조푸란-4-일벤조[c]크로멘-6-온을 가열로 건조시킨 플라스크 내에서 340 ml 의 무수 THF 중에 용해시켰다. 상기 용액을 N_2 로 포화시켰다. 투명한 용액을 -10℃ 까지 냉각시킨 후, 70 ml (210 mmol) 의 3 M 페닐마그네슘 브로마이드 용액을 첨가하였다. 반응 혼합물을 서서히 실온까지 가온시킨 후, 아세트산 무수물 (70 mmol) 을 사용하여 켄칭하였다. 이어서, 상기 혼합물을 에틸 아세테이트와 물 사이에 분배하고, 유기상을 물로 3회 세정하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 회전식 증발기에서 증발시켰다. 310 ml 의 아세트산을 상기 증발시킨 용액에 주의하여 첨가하고, 이어서 70 ml 의 발연 HCl 을 첨가하였다. 배치를 75℃ 까지 가열하고, 상기 온도에서 4 시간 동안 유지시켰다. 이러한 기간 중에 백색 고체가 석출되었다. 그 후, 배치를 실온까지 냉각시키고, 석출된 고체를 흡입으로 여과하고, 메탄올로 세정하였다. 잔류물을 진공 하에서 40℃ 에서 건조시켰다. 미정제 생성물을 헵탄/에틸 아세테이트 1:1 을 이용하여 실리카겔을 통해 여과하여, 26 g (이론치의 75%) 을 수득하였다.

[0342] 하기 브롬화 화합물들을 유사하게 제조하였다:

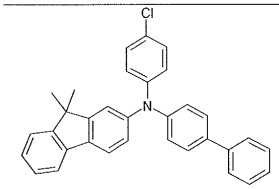
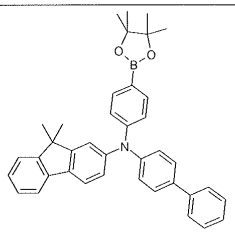
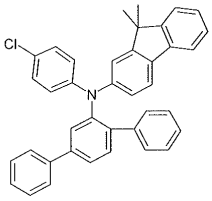
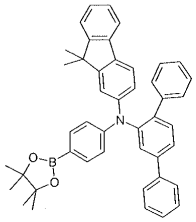
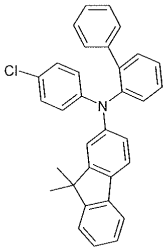
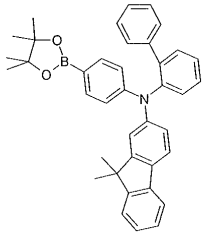
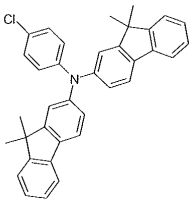
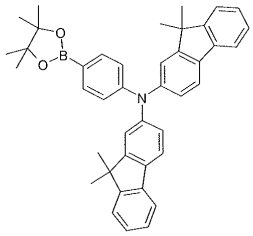
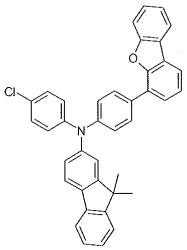
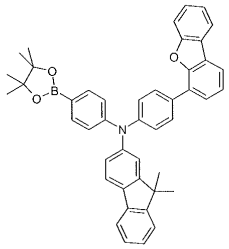
출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			72%
			80%
			77%
	CH_3MgBr		72%
			66%
			74%

[0343]

[0344] **(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)페닐-[4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐]아민**

[0345] 32.1 g (81.1 mmol) 의 4-클로로페닐아민 유도체, 20.6 g (81.1 mmol) 의 비스(피나콜라토)디보란 및 13.5 g (137.9 mmol) 의 칼륨 아세테이트를 600 ml 의 디옥산 중에 현탁시켰다. 5.9 g (8.1 mmol) 의 비스(트리시클로헥실포스핀)팔라듐(II) 디클로라이드를 상기 현탁액에 첨가하였다. 반응 혼합물을 환류 하에서 12 시간 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 유기상을 분리하고, 200 ml 의 물로 3회 세정하고, 이어서 건조될 때까지 증발시켰다. 잔류물을 톨루엔으로부터 재결정하였다 (28.8 g, 73% 수율).

[0346] 하기 화합물들을 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	생성물	수율
		79%
		80%
		72%
		79%
		78%

[0347]

[0348] **화합물 [4-(7-디벤조푸란-4-일-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)페닐]-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)페닐아민 (2-1)**

[0349] 25 g (50 mmol) 의 7-디벤조푸란-4-일-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-올을 가열로 건조시킨 플라스크 내에서 300 ml 의 무수 THF 중에 용해시켰다. 상기 용액을 N_2 로 포화시켰다. 투명한 용액을 5℃ 까지 냉각시킨 후, 20 ml (150 mmol) 의 트리에틸아민, 122 mg 의 4-디메틸아미노피리딘 및 8.65 ml 의 트리플루오로메탄술폰산 무수물을 첨가하였다. 반응 혼합물을 서서히 실온까지 가온시켰다. 이어서, 반응 혼합물을 헵탄으로 희석하고, 회전식 증발기에서 증발시키고, 물을 이용하여 분배하고, 유기상을 물로 3회 세정하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 회전식 증발기에서 증발시켰다. 미정제 생성물을 헵탄/에틸 아세테이트 1:1 을 이용하여 실리카겔을 통해 여과하여, 30 g 의 7-디벤조푸란-4-일-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일 트리플루오로메탄술포네이트 (이론치의 98%) 를 수득하였다.

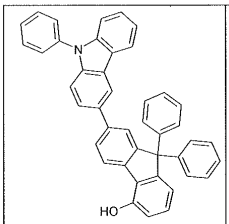
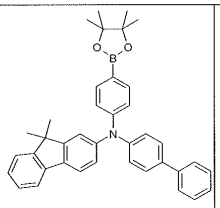
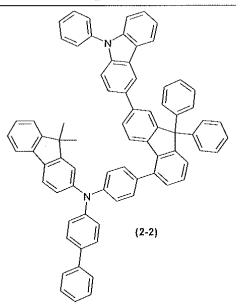
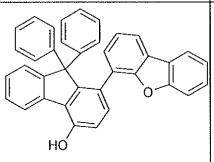
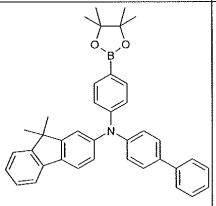
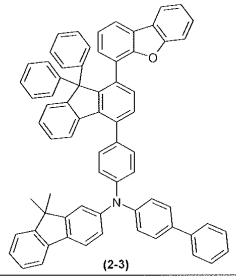
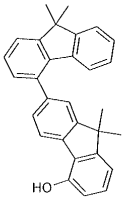
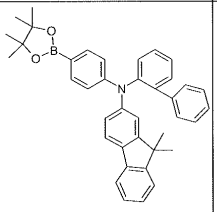
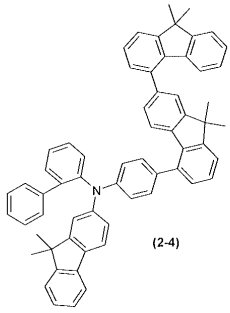
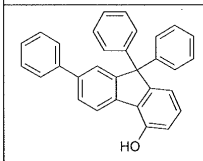
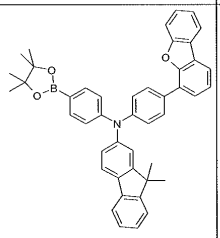
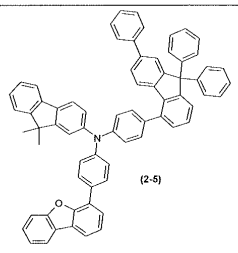
[0350] 23.5 g (36.4 mmol) 의 7-디벤조푸란-4-일-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일 트리플루오로메탄술포네이트, 18.61 g (38.2 mmol) 의 (9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)페닐-[4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐]아민, 7.64 g 의 나트륨 메타보레이트 4수화물 (54.6 mmol) 및 53 ㎕ 의 히드라지늄 히드록시드 (1.1 mmol) 를 500 ml 의 THF 및 200 ml 의 물 중에 현탁시켰다. 1.02 g (1.46 mmol) 의 비스(트리페닐포스핀)팔라듐 디

클로라이드를 상기 현탁액에 첨가하고, 반응 혼합물을 70℃ 에서 3 시간 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 혼합물을 에틸 아세테이트와 물 사이에 분배하고, 유기상을 물로 3회 세정하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 회전식 증발기에서 증발시켰다. 미정제 생성물을 톨루엔을 이용하여 실리카겔을 통해 여과한 후, 남아있는 잔류물을 헵탄/톨루엔으로부터 재결정하고, 이어서 승화시켰다. 수율은 18.4 g (이론치의 60%) 이었다.

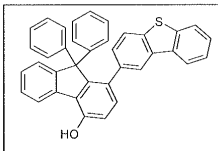
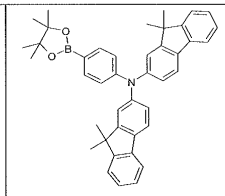
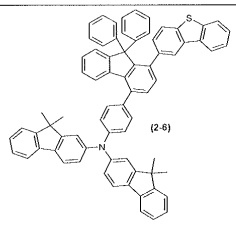
[0351] **화합물 (2-2) 내지 (2-6) 의 합성**

[0352] 하기 화합물들을 유사하게 제조하였다:

[0353]

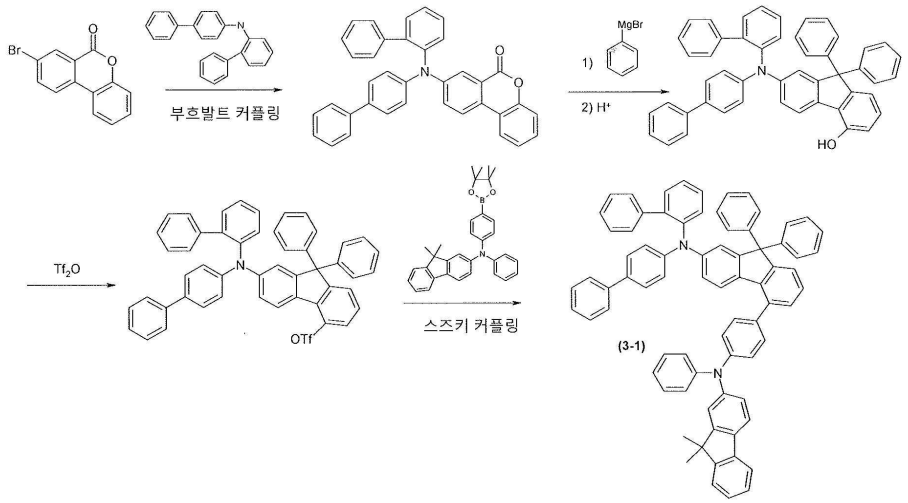
출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
		 (2-2)	78%
		 (2-3)	73%
		 (2-4)	71%
		 (2-5)	65%

[0354]

		 (2-6)	52%

[0355] **실시예 3**

[0356] **화합물 바이페닐-4-일바이페닐-2-일-(5-{4-[(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)페닐아미노]페닐}-9,9-디페닐-9H-플루오렌-2-일)아민 (3-1) 및 화합물 (3-2) 내지 (3-5) 의 합성**



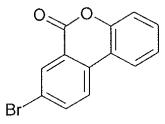
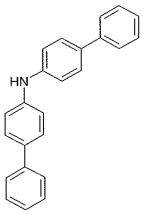
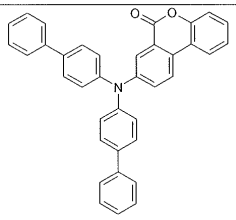
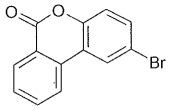
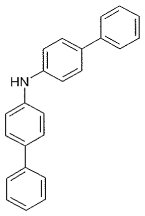
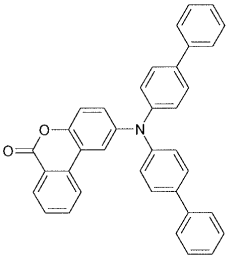
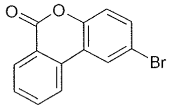
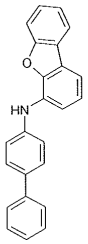
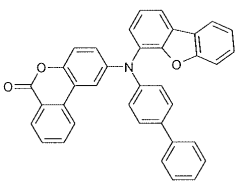
[0357]

[0358] **8-(바이페닐-4-일바이페닐-2-일아미노)벤조[c]크로멘-6-온**

[0359] 19.0 g 의 바이페닐-2-일바이페닐-4-일아민 (59 mmol) 및 16.3 g 의 8-브로모벤조[c]크로멘-6-온 (CAS:1447543-95-4) (59 mmol) 을 400 ml 의 톨루엔 중에 용해시켰다. 상기 용액을 탈기하고, N_2 로 포화시켰다. 그 후, 2.36 ml (2.36 mmol) 의 1 M 트리-tert-부틸포스핀 용액 및 0.27 g (1.18 mmol) 의 팔라듐(II) 아세테이트를 첨가하였다. 이어서, 11.6 g 의 나트륨 tert-부톡시드 (109 mmol) 를 첨가하였다. 반응 혼합물을 보호 분위기 하에서 3 시간 동안 비등시키면서 가열하였다. 이어서, 상기 혼합물을 톨루엔과 물 사이에 분배하고, 유기상을 물로 3회 세정하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 회전식 증발기에서 증발시켰다.

미정제 생성물을 톨루엔을 이용하여 실리카겔을 통해 여과한 후, 남아있는 잔류물을 헵탄/톨루엔으로부터 재결정하였다. 수율은 27 g (이론치의 90%) 이었다.

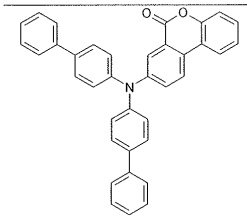
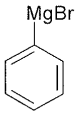
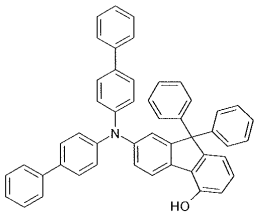
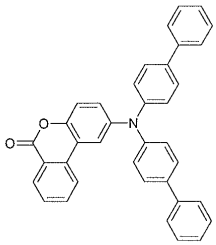
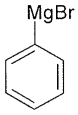
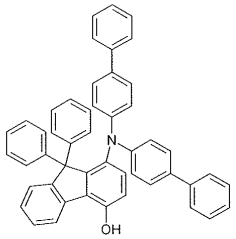
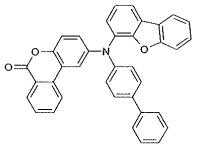
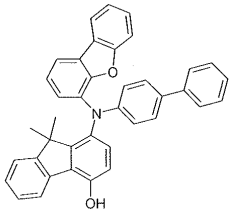
[0360] 하기 화합물들을 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			90%
			85%
			75%

[0361]

[0362] **7-(바이페닐-4-일바이페닐-2-일아미노)-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-올**

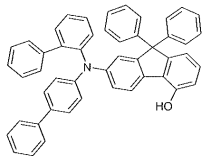
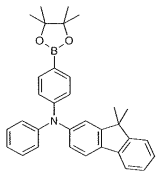
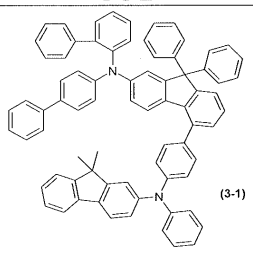
[0363] 하기 화합물들을 7-디벤조푸란-4-일-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-올과 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			83%
			71%
	CH_3MgBr		66%

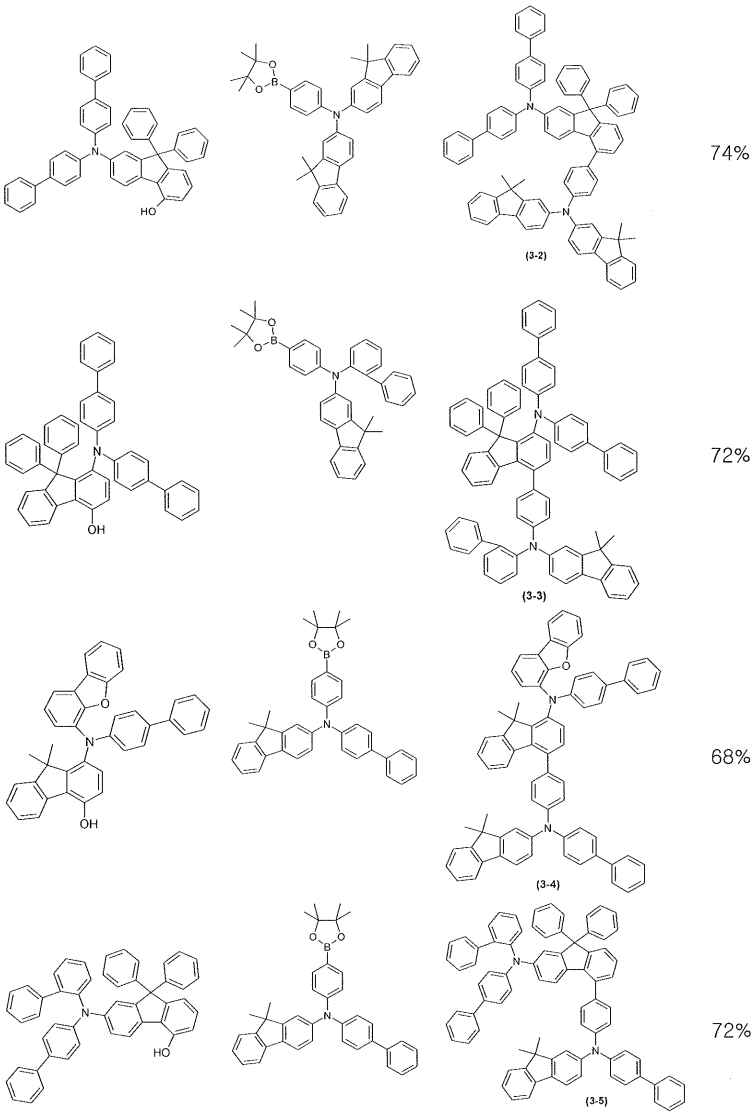
[0364]

[0365] **화합물 바이페닐-4-일바이페닐-2-일-(5-{4-[(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)페닐아미노]페닐}-9,9-디페닐-9H-플루오렌-2-일)아민 (3-1) 및 화합물 (3-2) 내지 (3-5) 의 합성**

[0366] 화합물 (**3-1**) 내지 (**3-5**) 를 화합물 [4-(7-디벤조푸란-4-일-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)페닐]-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)페닐아민 (**2-1**) 과 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			74%

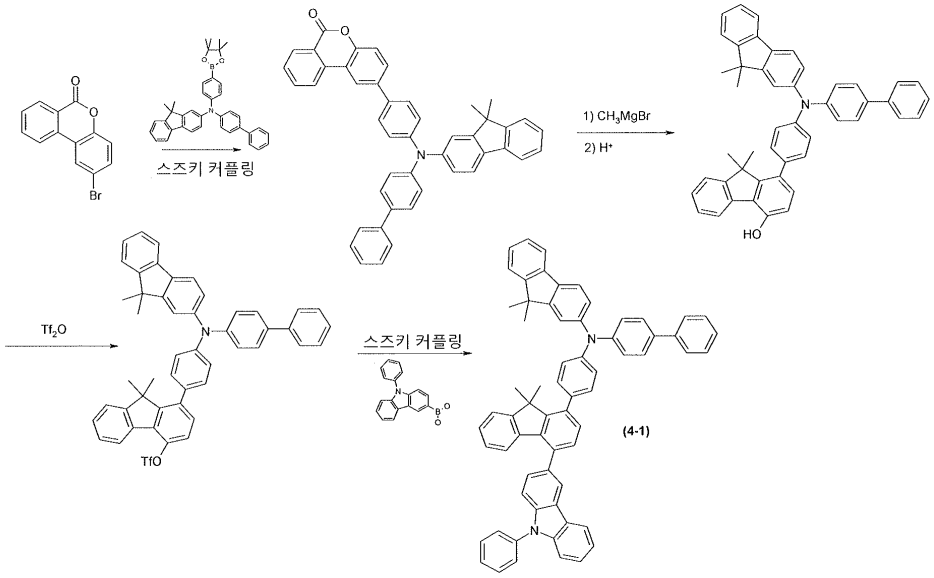
[0367]



[0368]

[0369] **실시예 4**

[0370] **화합물 바이페닐-4-일-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)-{4-[9,9-디메틸-4-(9-페닐-9H-카르바졸-3-일)-9H-플루오렌-1-일]페닐}아민 (4-1) 및 화합물 (4-2) 내지 (4-3) 의 합성**

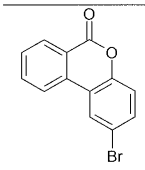
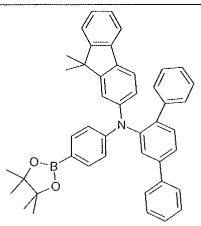
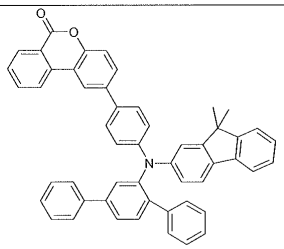
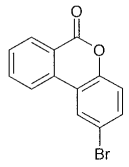
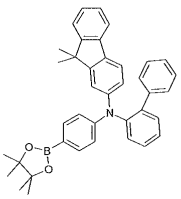
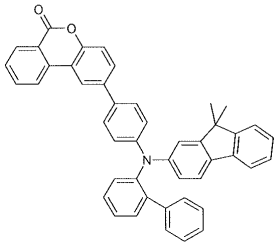


[0371]

[0372] **2-{4-[바이페닐-4-일-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)아미노]페닐}벤조[c]크로멘-6-온**

[0373] 20 g (35.5 mmol) 의 피나콜로보론산 에스테르 유도체, 9.76 g (35.5 mmol) 의 3-브로모벤조[c]크로멘-6-온 및 35 ml 의 2M Na_2CO_3 용액 (71.6 mmol) 을 600 ml 의 디옥산 중에 현탁시켰다. DCM 과의 1,1-비스(디페닐포스피노)페로센팔라듐(II) 디클로라이드 착물 0.75 g (0.89 mmol) 을 상기 현탁액에 첨가하고, 반응 혼합물을 환류 하에서 14 시간 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 유기상을 분리하고, 실리카겔을 통해 여과하고, 100 ml 의 물로 3회 세정하고, 이어서 건조될 때까지 증발시켰다. 미정제 생성물을 톨루엔을 이용하여 실리카겔을 통해 여과한 후, 남아있는 잔류물을 헵탄/톨루엔으로부터 재결정하였다. 수율은 17.7 g (이론치의 79%) 이었다.

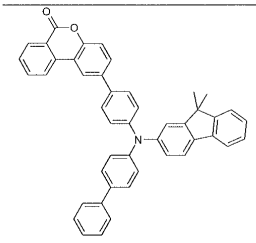
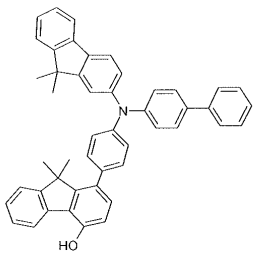
[0374] 하기 화합물들을 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			80%
			77%

[0375]

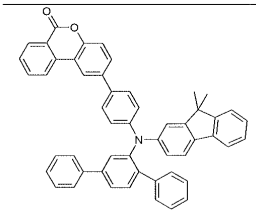
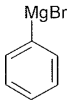
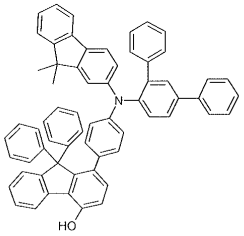
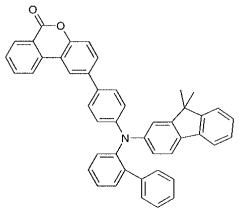
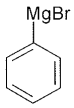
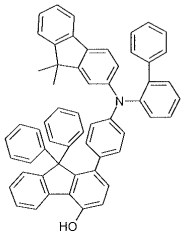
[0376] **1-{4-[바이페닐-4-일-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)아미노]페닐}-9,9-디메틸-9H-플루오렌-4-올**

[0377] 1-{4-[바이페닐-4-일-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)아미노]페닐}-9,9-디메틸-9H-플루오렌-4-올을 실시예 3 에 기재된 7-디벤조푸란-4-일-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-올의 합성과 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
	CH_3MgBr		84%

[0378]

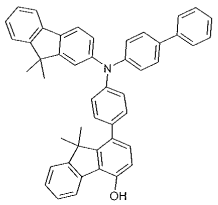
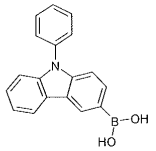
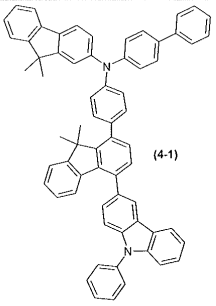
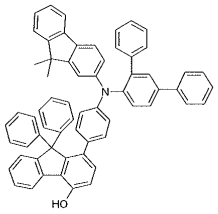
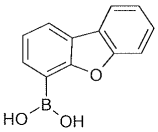
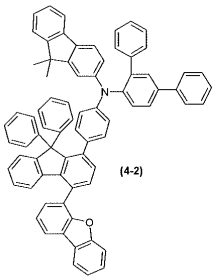
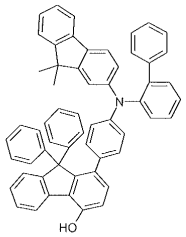
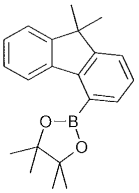
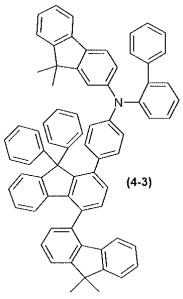
[0379] 하기 화합물들을 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			64%
			70%

[0380]

[0381] **화합물 (4-1) 내지 (4-3) 의 합성**

[0382] 화합물 (**4-1**) 내지 (**4-3**) 을 화합물 [4-(7-디벤조푸란-4-일-9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)페닐]-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)페닐아민 (**2-1**) 과 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
			80%
			71%
			75%

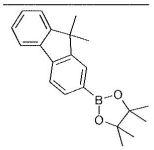
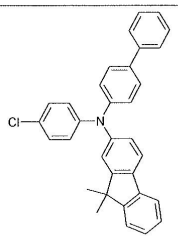
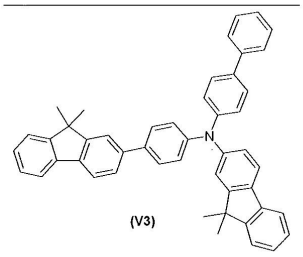
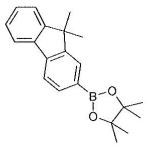
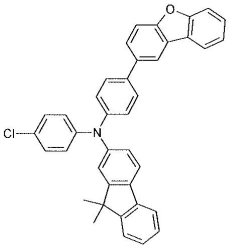
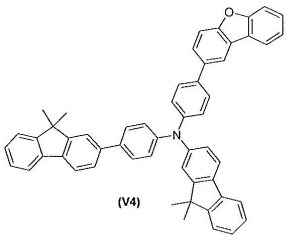
[0383]

[0384] <u>실시예 5</u>

[0385] **비교예**

[0386] **비교 화합물 (V3) 및 (V4) 의 합성**

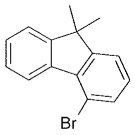
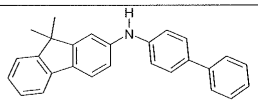
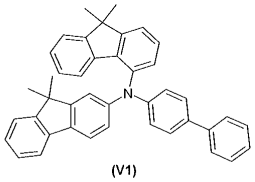
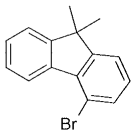
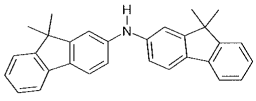
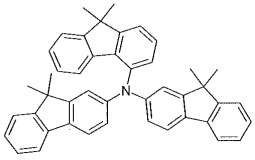
[0387] 하기 화합물 (V3) 및 (V4) 를 또한 실시예 1 에 기재된 화합물 (1-1) 의 합성과 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
		 (V3)	79%
		 (V4)	85%

[0388]

[0389] **비교 화합물 (V1) 및 (V2) 의 합성**

[0390] 하기 화합물 (V1) 및 (V2) 를 또한 실시예 1 에 기재된 **중간체**의 합성과 유사하게 제조하였다:

출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
		 (V1)	79%
		 (V2)	75%

[0391]

[0392] **실시예 6**

[0393] **OLED 의 제조**

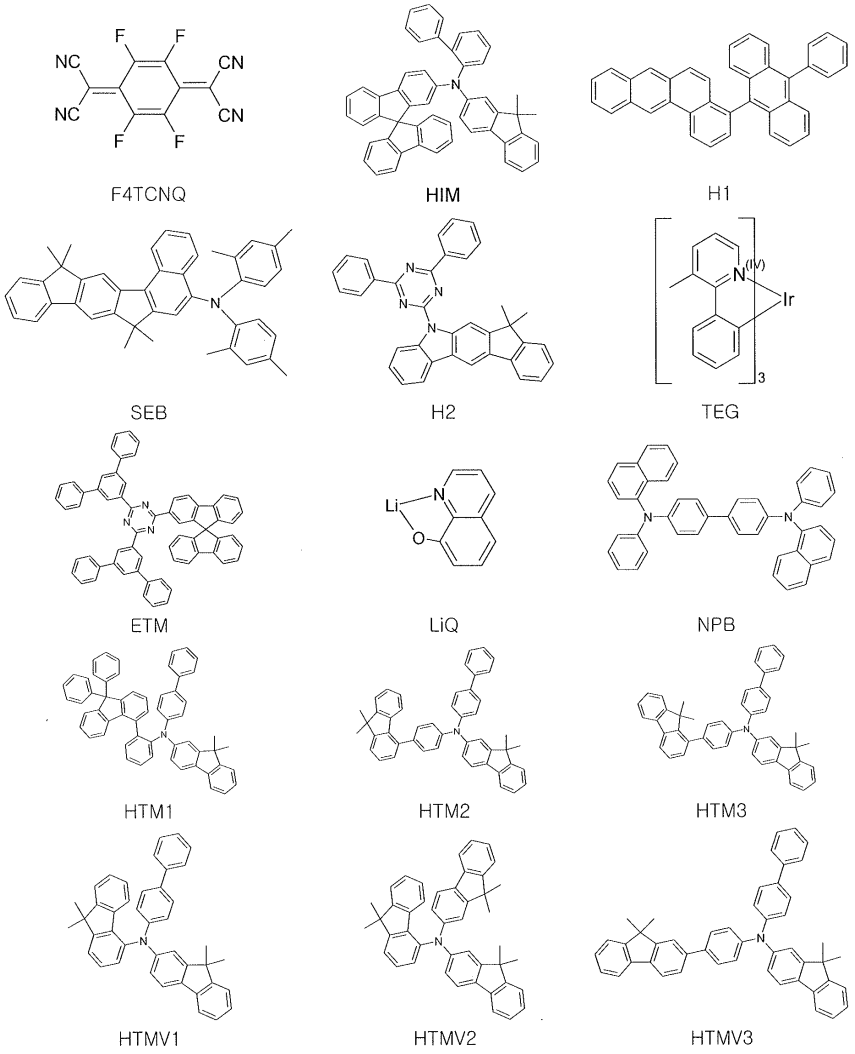
[0394] 본 발명에 따른 OLED 및 선행 기술에 따른 OLED 를 본원에 기재된 조건 (예를 들어 물질) 에 맞게 조정된, WO 04/058911 에 따른 일반적인 방법으로 제조하였다.

[0395] 하기 본 발명의 실시예 E1 내지 E4 및 참조예 V1-V4 에, 각종 OLED 의 데이터가 제시되어 있다. 두께 50 nm 의 구조화된 ITO (산화인듐주석) 으로 코팅된 유리 플레이트를 기판으로 사용하였다. OLED 는 기본적으로 하기 층 구조를 갖는다: 기판 / p-도핑된 정공-수송층 (HIL1) / 정공-수송층 (HTL) / p-도핑된 정공-수송층 (HIL2) / 정공-수송층 (EBL) / 발광층 (EML) / 전자-수송층 (ETL) / 전자-주입층 (EIL) 및 최종적으로 캐소드. 캐소드는 두께 100 nm 의 알루미늄 층으로 형성되어 있다. OLED 의 제조에 필요한 물질들은 표 1 에 제시되어 있고, 각종 성분들의 구조는 표 2 에 제시되어 있다.

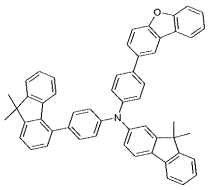
[0396] 모든 물질을 진공 챔버 내에서 열 증기 증착에 의해 적용하였다. 여기서, 발광층은 항상 하나 이상의 매트릭스 물질 (호스트 물질), 및 동시-증발법에 의해 특정 부피비로 매트릭스 물질 또는 매트릭스 물질들과 혼합된 하나의 발광 도펀트 (발광체) 로 이루어진다. 여기서, H1:SEB (95%:5%) 과 같은 표현은, 물질 H1 이 층 내에 95% 의 부피비로 존재하고, SEB 가 층 내에 5% 의 부피비로 존재한다는 것을 의미한다. 유사하게, 전자-수송층 또는 정공-주입층은 또한 2 종의 물질의 혼합물로 이루어질 수 있다.

[0397] OLED 를 표준 방법으로 특징 분석하였다. 이를 위하여, 람버트 (Lambert) 방사 특성치로 추정하여 전류/전압/시감 농도 특성치 (IUL 특성치) 로부터 산출된, 시감 농도 (luminous density) 의 함수로서의 전계발광 스펙트럼, 전류 효율 (cd/A 로서 측정됨), 전력 효율 (lm/W 로서 측정됨) 및 외부 양자 효율 (EQE, % 로서 측정됨), 및 수명을 측정하였다. 전계발광 스펙트럼을 1000 cd/m^2 의 시감 농도에서 측정하고, 이로부터 CIE 1931 x 및 y 색좌표를 산출하였다. 표현 EQE @ 10 mA/cm^2 는 10 mA/cm^2 의 전류 밀도에서의 외부 양자 효율을 나타낸다. LT80 @ 60 mA/cm^2 는, OLED 가 60 mA/cm^2 의 일정한 전류에서 초기 강도의 80% 로 감소될 때까지의 수명이다.

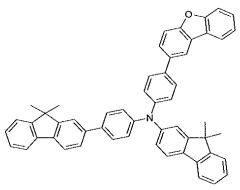
표 1: 사용된 물질의 구조



[0398]



HTM4



HTMV4

[0399]

표 2: OLED 의 구조:
HIL1(HIM:F4TCNQ(5%)-20nm)/HTL/HIL2/EBL/EML/ETL(ETM)/EIL(Liq-1 nm)

Ex.	HTL	HIL2	EBL	EML	ETL
	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm
V1	HIM 155 nm	NPB:F4TCNQ(5%) 20 nm	NPB 20 nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM:LiQ(50%) 30 nm
E1	HIM 155 nm	HTM1:F4TCNQ(5%) 20 nm	HTM1 20 nm	H1:SEB1(5%) 20 nm	ETM:LiQ(50%) 30 nm
E2	HIM 155 nm	HTM2:F4TCNQ(5%) 20 nm	HTM2 20 nm	H1:SEB1(5%) 20 nm	ETM:LiQ(50%) 30 nm
E3	HIM 155 nm	HTM3:F4TCNQ(5%) 20 nm	HTM3 20 nm	H1:SEB1(5%) 20 nm	ETM:LiQ(50%) 30 nm
V2	HIM 155 nm	HTMV1:F4TCNQ(5%) 20 nm	HTMV1 20 nm	H1:SEB1(5%) 20 nm	ETM:LiQ(50%) 30 nm
V3	HIM 155 nm	HTMV2:F4TCNQ(5%) 20 nm	HTMV2 20 nm	H1:SEB1(5%) 20 nm	ETM:LiQ(50%) 30 nm
V4	HIM 155 nm	HTMV3:F4TCNQ(5%) 20 nm	HTMV3 20 nm	H1:SEB1(5%) 20 nm	ETM:LiQ(50%) 30 nm
E4	HIM 155 nm	HTM4:F4TCNQ(5%) 20 nm	HTM4 20 nm	H1:SEB1(5%) 20 nm	ETM:LiQ(50%) 30 nm
V5	HIM 155 nm	HTMV4:F4TCNQ(5%) 20 nm	HTMV4 20 nm	H1:SEB1(5%) 20 nm	ETM:LiQ(50%) 30 nm
E5	HIM 210 nm	HTM1:F4TCNQ(5%) 20 nm	HTM1 20 nm	H2:TEG(10%) 30 nm	ETM:LiQ(50%) 40 nm
E6	HIM 210 nm	HTM2:F4TCNQ(5%) 20 nm	HTM2 20 nm	H2:TEG(10%) 30 nm	ETM:LiQ(50%) 40 nm
V6	HIM 210 nm	NPB:F4TCNQ(5%) 20 nm	NPB 20 nm	H2:TEG(10%) 30 nm	ETM:LiQ(50%) 40 nm
V7	HIM 210 nm	HTMV1:F4TCNQ(5%) 20 nm	HTMV1 20 nm	H2:TEG(10%) 30 nm	ETM:LiQ(50%) 40 nm

[0400]

[0401] 단일항 청색 성분에서, 본 발명에 따른 샘플 E1 (8.5%), E2 (9.4%) 및 E3 (9.2%) 는 기준 샘플 V1 (6.2%), V2 (8.1%), V3 (8.1%) 및 V4 (7.5%) 와 비교시, 10 mA/cm^2 에서 보다 높은 양자 효율을 나타냈다. 60 mA/cm^2 에서의 수명 LT80 은, 본 발명에 따른 샘플 E1 (250 시간), E2 (282 시간) 및 E3 (260 시간) 의 경우 가 기준 샘플 V1 (125 시간), V2 (216 시간), V3 (170 시간) 및 V4 (195 시간) 보다 유의하게 우수하였다.

[0402] 단일항 청색 성분에서, 본 발명에 따른 샘플 E4 (8.8%) 는 기준 샘플 V5 (8.3%) 와 비교시, 10 mA/cm^2 에서 보다 높은 양자 효율을 나타냈다. 60 mA/cm^2 에서의 수명 LT80 은, 본 발명에 따른 샘플 E4 (240 시간) 의 경우가 기준 샘플 V5 (195 시간) 보다 유의하게 우수하였다.

[0403] 삼중항 녹색 성분에서, 기준 샘플 V6 (11.7%) 및 V7 (20.3%) 은 일부 경우에 본 발명에 따른 샘플 E5 (21.2%) 및 E6 (21.8%) 보다 2 mA/cm^2 에서 상당히 낮은 양자 효율을 나타냈다. 또한, 본 발명에 따른 샘플 E5 (115 시간) 및 E6 (105 시간) 의 20 mA/cm^2 에서의 수명 (80%) 은, V6 (80 시간) 및 V7 (100 시간) 의 경우보다 더 길었다.