



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2025년01월07일

(11) 등록번호 10-2750558

(24) 등록일자 2025년01월02일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C07D 405/04* (2006.01) *C07D 405/14* (2006.01)  
*C07D 409/04* (2006.01) *C07D 409/14* (2006.01)  
*C07D 495/04* (2006.01) *C09K 11/06* (2006.01)  
*H10K 50/00* (2023.01) *H10K 99/00* (2023.01)
- (52) CPC특허분류  
*C07D 405/04* (2013.01)  
*C07D 405/14* (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2018-7028385
- (22) 출원일자(국제) 2017년02월06일  
 심사청구일자 2022년01월27일
- (85) 번역문제출일자 2018년10월01일
- (65) 공개번호 10-2018-0118748
- (43) 공개일자 2018년10월31일
- (86) 국제출원번호 PCT/EP2017/000155
- (87) 국제공개번호 WO 2017/148565  
 국제공개일자 2017년09월08일
- (30) 우선권주장  
 16158460.2 2016년03월03일  
 유럽특허청(EPO)(EP)  
 16159829.7 2016년03월11일  
 유럽특허청(EPO)(EP)
- (56) 선행기술조사문헌  
 KR101614738 B1\*  
 KR1020150031892 A\*  
 \*는 심사관에 의하여 인용된 문헌
- (73) 특허권자  
 메르크 파텐트 게엠베하  
 독일 64293 다름스타트 프랑크푸르터 스트라세 250
- (72) 발명자  
 파르함 아미르 호싸인  
 독일 60486 프랑크푸르트 암 마인 뢰미셔 링 26  
 에베를레 토마스  
 독일 76829 란다우 빌리-브란트-슈트라세 6  
 (뒷면에 계속)
- (74) 대리인  
 특허법인코리아나

전체 청구항 수 : 총 7 항

심사관 : 허정오

(54) 발명의 명칭 유기 전계발광 소자용 재료

### (57) 요약

본 발명은, 특히 유기 전계발광 소자에서 삼중항 매트릭스 재료로서 사용하기 위한, 카르바졸과의 조합으로 디벤조푸란 또는 디벤조티오펜 기를 갖는 아민을 기재한다. 본 발명은 또한 본 발명의 화합물의 제조 방법 및 이들 화합물을 포함하는 전자 소자에 관한 것이다.

(52) CPC특허분류

*C07D 409/04* (2013.01)  
*C07D 409/14* (2013.01)  
*C07D 495/04* (2013.01)  
*C09K 11/06* (2022.01)  
*H10K 50/11* (2023.02)  
*H10K 85/657* (2023.02)  
*H10K 85/6572* (2023.02)  
*H10K 85/6574* (2023.02)  
*C09K 2211/1007* (2013.01)

(72) 발명자

**야치 안야**

독일 60489 프랑크푸르트 암 마인 하트슈타이너 슈  
트라쎄 12

**그로쓰만 토비아스**

독일 64297 다름슈타트 로이터알레 71

**크뢰버 요나스 팔렌틴**

독일 60311 프랑크푸르트 암 마인 파르가쎄 4

**몬테네그로 엘비라**

독일 69469 바인하임 호라츠벡 5

**요슈텐 도미니크**

독일 60487 프랑크푸르트 암 마인 암 바인가르텐 7

**베른 카롤리네**

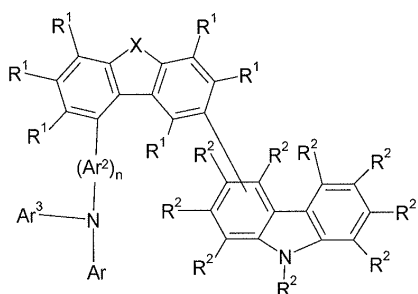
독일 64293 다름슈타트 칼러트슈트라쎄 28

# 명세서

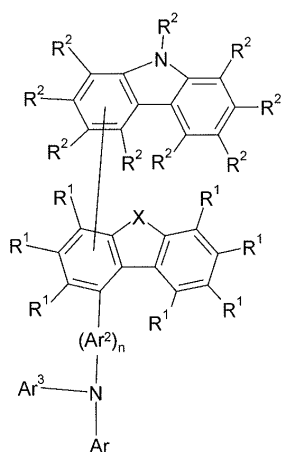
## 청구범위

### 청구항 1

화학식 (1) 또는 화학식 (2) 의 화합물로서,



화학식 (1)



화학식 (2)

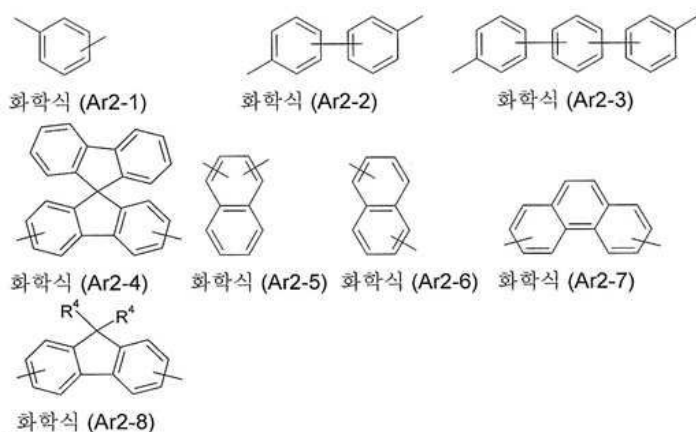
[식에서 사용된 기호는 다음과 같음:

X는 O 또는 S 이며;

Ar은 6 내지 12 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리계 또는 9,9'-스피로바이플루오렌 기 또는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리계이며, 여기서 이들 각각은 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수 있고;

Ar¹은 각 경우에 동일 또는 상이하고, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R⁴ 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계이며;

$Ar^2$ 는 하기 화학식 (Ar2-1) 내지 (Ar2-8) 중 선택되는 기이며



여기서 두 개의 말단 단일 결합은 인접 기에 대한 결합이고, 기는 자유 위치에서  $R^4$ 에 의해 치환될 수 있고;

$Ar^3$ 은 6 내지 12 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리계 또는 9,9'-스피로바이폴루오렌 기 또는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리계이며, 여기서 이들 각각은 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수 있고;

R은 각 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, CN,  $N(Ar^1)_2$ , 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 기 또는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D로 대체될 수 있음), 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 동일한 탄소 원자에 또는 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의 R 치환기가 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭 지방족 또는 방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하며;

$R^1$ 은 각 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, CN, 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 기 또는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D로 대체될 수 있음), 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의  $R^1$  치환기가 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하며;

$R^2$ 는 각 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, CN,  $N(R^4)_2$ , 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 기 또는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D로 대체될 수 있음), 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의  $R^2$  치환기가 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하며;

$R^4$ 는 각 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, CN,  $N(R^5)_2$ , 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 기 또는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의  $R^5$  라디칼로 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D로 대체될 수 있음), 6 내지 13 개의 방향족 고리

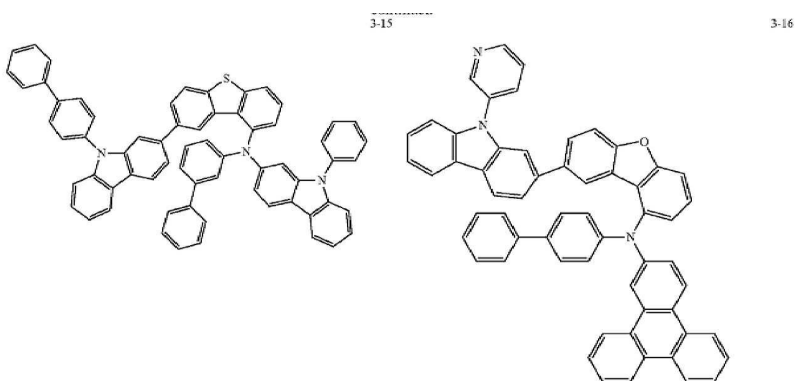
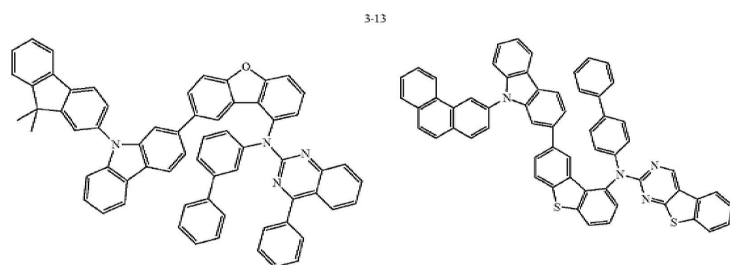
원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의  $R^5$  라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 동일한 탄소 원자 또는 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의  $R^4$  치환기가 하나 이상의  $R^5$  라디칼로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하며;

$R^5$ 는 각 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드록카르빌 라디칼, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리계 (여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D 로 대체될 수 있고, 이는 1 내지 4 개의 탄소 원자를 각각 갖는 하나 이상의 알킬 기로 치환될 수 있음) 로 이루어지는 군으로부터 선택되고;

n은 0 또는 1 이며;

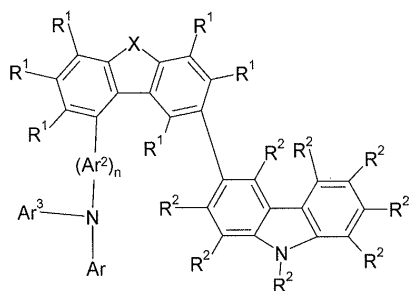
여기에서 화학식 (1) 에서 하나의  $R^2$  및 화학식 (2) 에서 탄소 원자에 결합된 하나의  $R^1$  및 하나의  $R^2$  는 단일 결합으로 대체됨.]

하기 화합물들은 제외되는, 화합물.

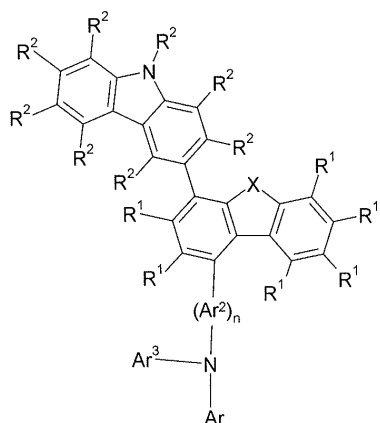


## 청구항 2

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



화학식 (1-1)



화학식 (2-1)

식에서 지수 및 기호는 제 1 항에 제시된 정의를 가짐.

## 청구항 3

제 1 항 또는 제 2 항에 따른 화합물 적어도 하나 및 적어도 하나의 추가의 화합물 및/또는 적어도 하나의 용매를 포함하는 혼합물.

## 청구항 4

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서, 전자 소자에서 사용되는 것을 특징으로 하는 화합물.

## 청구항 5

제 1 항 또는 제 2 항에 따른 화합물을 적어도 하나 포함하는 전자 소자.

## 청구항 6

제 5 항에 있어서, 유기 전계발광 소자인 것을 특징으로 하는, 전자 소자.

## 청구항 7

제 6 항에 있어서, 상기 화합물이 방사 층에서, 또는 인광 도판트 및 임의로 하나 이상의 추가의 매트릭스 재료와의 조합으로, 또는 정공 수송 층에서 또는 전자 차단자 층에서 사용되는 것을 특징으로 하는, 전자 소자.

## 발명의 설명

## 기술 분야

[0001]

본 발명은, 특히 유기 전계발광 소자에서 삼중항 매트릭스 재료로서 사용하기 위한, 카르바졸과의 조합으로 디

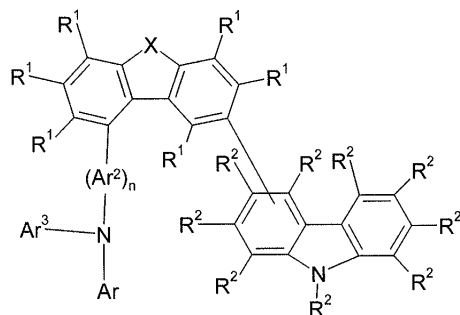
벤조푸란 또는 디벤조티오펜 기를 갖는 아민을 기재한다. 본 발명은 또한 본 발명의 화합물의 제조 방법 및 이들 화합물을 포함하는 전자 소자에 관한 것이다.

## 배경 기술

- [0002] 유기 반도체가 기능성 재료로서 사용되는 유기 전계발광 소자 (OLED) 의 구조가, 예를 들어, US 4539507, US 5151629, EP 0676461 및 WO 98/27136 에 기재되어 있다. 사용되는 방사 재료는 흔히 인광을 발하는 유기금속성 착물이다. 양자역학적 이유로, 유기금속성 화합물을 인광 방사체로서 사용하여 4 배 까지의 에너지 효율 및 전력 효율이 가능하다. 일반적으로, OLED 에서, 특히 또한 인광을 발하는 OLED 에서, 예를 들어 효율, 작동 전압 및 수명에 관하여 개선에 대한 필요가 여전히 존재한다.
- [0003] 인광 OLED 의 특성은 단지 사용되는 삼중항 방사체에 의해 결정되지 않는다. 더욱 특히, 사용되는 다른 재료가, 예를 들어 매트릭스 재료가, 또한 여기에서 특히 중요하다. 이들 재료에 대한 개선은 따라서 또한 OLED 특성에서 뚜렷한 개선을 초래할 수 있다.
- [0004] 일반적으로, 매트릭스 재료로서 사용되는 이들 재료의 경우에, 특히 수명 및 산화 민감성에 관하여, 뿐만 아니라 소자의 효율 및 작동 전압에 관하여 개선에 대한 필요가 여전히 존재한다.
- [0005] 본 발명의 목적은 인광 또는 형광 OLED 에서, 특히 매트릭스 재료로서, 사용하기에 적합한 화합물을 제공하는 것이다. 더욱 특히, 본 발명의 목적은 적색-, 황색- 및 녹색-인광을 발하는 OLED 에 및 가능하게는 또한 청색-인광을 발하는 OLED 에 적합고, 긴 수명, 양호한 효율 및 낮은 작동 전압을 초래하는 매트릭스 재료를 제공하는 것이다. 특히 매트릭스 재료의 특성은 역시 유기 전계발광 소자의 수명 및 효율에 대해 본질적 영향을 갖는다.
- [0006] 놀랍게도, 하기 화학식 (1) 또는 (2) 의 화합물을 함유하는 전계발광 소자가, 특히 인광 도판트용 매트릭스 재료로서 사용될 때, 선행 기술에 비해 개선점을 갖는다는 것이 밝혀졌다.
- [0007] JP 2012-049518 은 디페닐아민에 의해 치환되어 있고 또한 카르바졸에 의해 치환되어 있는 디벤조푸란을 개시한다.
- [0008] WO 2013/120577 은 디벤조푸란을 기로서 보유할 수 있는 적어도 하나의 아민에 의해 치환된 9,9'-스피로바이플루오렌을 개시한다.

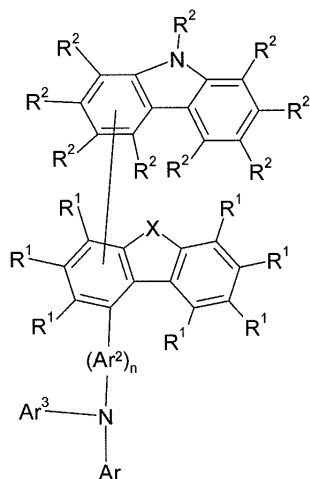
## 발명의 내용

- [0009] 본 발명은 그러므로 하기 화학식 (1) 또는 (2) 의 화합물을 제공한다:



화학식 (1)

[0010]



화학식 (2)

[0011]

[0012]

식에서 사용된 기호는 다음과 같음:

[0013]

X 는 O 또는 S 이며;

[0014]

Ar 은 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계이며;

[0015]

Ar<sup>1</sup> 은 각 경우에 동일 또는 상이하고, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계이며;

[0016]

Ar<sup>2</sup> 는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수 있는 이가 방향족 또는 헤테로방향족 고리계이며;

[0017]

Ar<sup>3</sup> 은 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계이며;

[0018]

R 은 각 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO<sub>2</sub>, C(=O)R<sup>4</sup>, C(=O)Ar<sup>1</sup>, P(=O)(Ar<sup>1</sup>)<sub>2</sub>, P(Ar<sup>1</sup>)<sub>2</sub>, B(Ar<sup>1</sup>)<sub>2</sub>, N(R<sup>4</sup>)<sub>2</sub>, N(Ar<sup>1</sup>)<sub>2</sub>, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 (이들 각각은 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 비인접 CH<sub>2</sub> 기는 R<sup>4</sup>C=CR<sup>4</sup>, C=O, C=S, C=NR<sup>4</sup>, P(=O)(R<sup>4</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>4</sup>, O, S 또는 CONR<sup>4</sup> 로 대체될 수 있고, 여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO<sub>2</sub> 로 대체될 수 있음), 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬 기로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 동일한 탄소 원자에 또는 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의 R 치환기가 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭 지방족 또는 방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하며;

[0019]

R<sup>1</sup> 은 각 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO<sub>2</sub>, C(=O)R<sup>4</sup>, C(=O)Ar<sup>1</sup>, P(=O)(Ar<sup>1</sup>)<sub>2</sub>, P(Ar<sup>1</sup>)<sub>2</sub>, B(Ar<sup>1</sup>)<sub>2</sub>, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 (이들 각각은 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 비인접 CH<sub>2</sub> 기는



$R^4C=CR^4$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=NR^4$ ,  $P(=O)(R^4)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^4$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $CONR^4$  로 대체될 수 있고, 여기에서 하나 이상의 수소 원자는  $D$ ,  $F$ ,  $Cl$ ,  $Br$ ,  $I$ ,  $CN$  또는  $NO_2$  로 대체될 수 있음), 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬 기로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의  $R^1$  치환기가 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하며;

[0020]  $R^2$  는 각 경우에 동일 또는 상이하고,  $H$ ,  $D$ ,  $F$ ,  $Cl$ ,  $Br$ ,  $I$ ,  $CN$ ,  $NO_2$ ,  $C(=O)Ar^1$ ,  $C(=O)R^4$ ,  $P(=O)(Ar^1)_2$ ,  $P(Ar^1)_2$ ,  $B(Ar^1)_2$ ,  $N(R^4)_2$ , 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 (이들 각각은 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는  $R^4C=CR^4$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=NR^4$ ,  $P(=O)(R^4)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^4$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $CONR^4$  로 대체될 수 있고, 여기에서 하나 이상의 수소 원자는  $D$ ,  $F$ ,  $Cl$ ,  $Br$ ,  $I$ ,  $CN$  또는  $NO_2$  로 대체될 수 있음), 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬 기로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의  $R^2$  치환기가 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하며;

[0021]  $R^4$  는 각 경우에 동일 또는 상이하고,  $H$ ,  $D$ ,  $F$ ,  $Cl$ ,  $Br$ ,  $I$ ,  $CN$ ,  $NO_2$ ,  $N(R^5)_2$ ,  $C(=O)R^5$ , 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 (이들 각각은 하나 이상의  $R^5$  라디칼로 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는  $R^5C=CR^5$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=NR^5$ ,  $P(=O)(R^5)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^5$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $CONR^5$  로 대체될 수 있고, 여기에서 하나 이상의 수소 원자는  $D$ ,  $F$ ,  $Cl$ ,  $Br$ ,  $I$ ,  $CN$  또는  $NO_2$  로 대체될 수 있음), 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의  $R^5$  라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^5$  라디칼로 치환될 수 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^5$  라디칼로 치환될 수 있는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬 기로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 동일한 탄소 원자 또는 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의  $R^4$  치환기가 하나 이상의  $R^5$  라디칼로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하며;

[0022]  $R^5$  는 각 경우에 동일 또는 상이하고,  $H$ ,  $D$ ,  $F$ ,  $CN$ , 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드로카르빌 라디칼, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (여기에서 하나 이상의 수소 원자는  $D$ ,  $F$ ,  $Cl$ ,  $Br$ ,  $I$  또는  $CN$  로 대체될 수 있고, 이는 1 내지 4 개의 탄소 원자를 각각 갖는 하나 이상의 알킬 기로 치환될 수 있음) 로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 둘 이상의 인접  $R^5$  치환기가 함께 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 고리계를 형성하는 것이 가능하며;

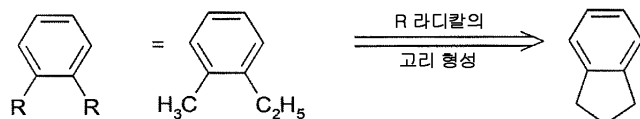
[0023]  $n$  은 0 또는 1 이며;

[0024] 여기에서 화학식 (1) 에서 하나의  $R^2$ , 및 화학식 (2) 에서 탄소 원자에 결합된 하나의  $R^1$  및 하나의  $R^2$  는 단일 결합에 의해 치환되며, 즉 화학식 (1) 에서 하나의 라디칼  $R^2$  및 화학식 (2) 에서 탄소 원자에 결합된 하나의 라디칼  $R^1$  및 하나의 라디칼  $R^2$  는 존재하지 않고 단일 결합으로 대체됨.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

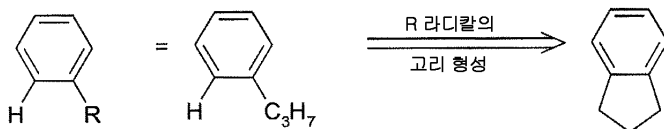
[0025] 인접한 탄소 원자는 본 발명의 맥락에서 서로에게 직접 결합된 탄소 원자이다.

[0026] 둘 이상의 라디칼이 함께 고리를 형성할 수 있다는 표현은, 본 명세서의 맥락에서, 특히, 두 개의 라디칼이 두 개의 수소 원자의 형식적 제거에 의한 화학 결합에 의해 서로에게 연결된다는 것을 의미하는 것으로 이해될 것이다. 이는 하기 반응식에 의해 도시된다:



[0027]

[0028] 또한, 그러나, 위에서 언급된 표현은 또한 두 개의 라디칼 중 하나가 수소인 경우에, 두번째 라디칼은 수소 원자가 결합된 위치에 결합하여, 고리를 형성한다는 것을 의미하는 것으로 이해될 것이다. 이는 하기 반응식에 의해 도시된다:



[0029]

[0030] 융합된 아릴 기는 본 발명의 맥락에서, 예를 들어, 나프탈렌에서와 같이, 둘 이상의 방향족 기가 공통되는 모서리를 따라 서로에게 융합되어 있는, 즉 어닐레이트되어 있는 (annellated) 기이다. 이와 반대로, 예를 들어, 플루오렌은 본 발명의 맥락에서 융합된 아릴 기가 아니며, 이는 플루오렌에서의 두 개의 방향족 기가 공통의 모서리를 갖지 않기 때문이다.

[0031] 아릴 기는 본 발명의 맥락에서 6 내지 40 개의 탄소 원자를 함유하고; 헤테로아릴 기는 본 발명의 맥락에서 2 내지 40 개의 탄소 원자 및 적어도 하나의 헤테로원자를 함유하며, 다만 탄소 원자 및 헤테로원자의 총합계는 적어도 5 이다. 헤테로원자는 바람직하게는 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 아릴 기 또는 헤테로아릴 기는 여기에서 단순한 방향족 사이클, 즉 벤젠, 또는 단순한 헤테로방향족 사이클, 예를 들어 피리딘, 피리미딘, 티오펜 등, 또는 융합된 아릴 또는 헤테로아릴 기, 예를 들어 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 퀴놀린, 이소퀴놀린 등을 의미하는 것으로 이해된다.

[0032] 방향족 고리계는 본 발명의 맥락에서 6 내지 40 개의 탄소 원자를 고리계에 함유한다. 헤테로방향족 고리계는 본 발명의 맥락에서 1 내지 40 개의 탄소 원자 및 적어도 하나의 헤테로원자를 고리계에 함유하며, 다만 탄소 원자 및 헤테로원자의 총합계는 적어도 5 이다. 헤테로원자는 바람직하게는 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 방향족 또는 헤테로방향족 고리계는 본 발명의 맥락에서 오직 아릴 또는 헤테로아릴 기를 반드시 함유하지는 않으나, 둘 이상의 아릴 또는 헤테로아릴 기가 비방향족 단위 (바람직하게는 10% 미만의 H 이외의 원자), 예를 들어 탄소, 질소 또는 산소 원자 또는 카르보닐 기에 의해 중단되는 것이 또한 가능한 시스템을 의미하는 것으로 이해될 것이다. 예를 들어, 9,9'-스피로바이플루오렌, 9,9'-디아릴플루오렌, 트리아릴아민, 디아릴 에테르, 스틸벤 등과 같은 시스템은 따라서 또한 본 발명의 맥락에서의 방향족 고리계, 및 또한 둘 이상의 아릴 기가, 예를 들어, 선형 또는 시클릭 알킬 기에 의해 또는 실릴 기에 의해, 중단되어 있는 시스템으로서 여겨질 것이다. 게다가, 둘 이상의 아릴 또는 헤테로아릴 기가 서로에게 직접 결합되어 있는 시스템, 예를 들어 바이페닐, 테르페닐, 콰테르페닐 또는 바이피리딘도, 또한 방향족 또는 헤테로방향족 고리계로서 여겨질 것이다.

[0033] 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시 기는 본 발명의 맥락에서 모노시클릭, 바이시클릭 또는 폴리시클릭 기를 의미하는 것으로 이해된다.

[0034] 본 발명의 맥락에서, 개별 수소 원자 또는  $CH_2$  기가 또한 위에서 언급된 기로 치환될 수 있는  $C_1$ - 내지  $C_{20}$ -알킬

기는, 예를 들어, 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, 시클로프로필, n-부틸, i-부틸, s-부틸, t-부틸, 시클로부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, s-펜틸, t-펜틸, 2-펜틸, 네오펀틸, 시클로펜틸, n-헥실, s-헥실, t-헥실, 2-헥실, 3-헥실, 네오헥실, 시클로헥실, 1-메틸시클로펜틸, 2-메틸펜틸, n-헵틸, 2-헵틸, 3-헵틸, 4-헵틸, 시클로헵틸, 1-메틸시클로헥실, n-옥틸, 2-에틸헥실, 시클로옥틸, 1-바이시클로[2.2.2]옥틸, 2-바이시클로[2.2.2]옥틸, 2-(2,6-디메틸)옥틸, 3-(3,7-디메틸)옥틸, 아다만틸, 트리플루오로메틸, 펜타플루오로에틸, 2,2,2-트리플루오로에틸, 1,1-디메틸-n-헥스-1-일, 1,1-디메틸-n-헵트-1-일, 1,1-디메틸-n-옥트-1-일, 1,1-디메틸-n-데스-1-일, 1,1-디메틸-n-도데스-1-일, 1,1-디메틸-n-테트라데스-1-일, 1,1-디메틸-n-헥사데스-1-일, 1,1-디메틸-n-옥타데스-1-일, 1,1-디에틸-n-헥스-1-일, 1,1-디에틸-n-헵트-1-일, 1,1-디에틸-n-옥트-1-일, 1,1-디에틸-n-데스-1-일, 1,1-디에틸-n-도데스-1-일, 1,1-디에틸-n-테트라데스-1-일, 1,1-디에틸-n-헥사데스-1-일, 1,1-디에틸-n-옥타데스-1-일, 1-(n-프로필)시클로헥스-1-일, 1-(n-부틸)시클로헥스-1-일, 1-(n-헥실)시클로헥스-1-일, 1-(n-옥틸)시클로헥스-1-일 및 1-(n-데실)시클로헥스-1-일 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다.

알케닐 기는, 예를 들어, 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 시클로펜테닐, 헥세닐, 시클로헥세닐, 헵테닐, 시클로헵테닐, 옥테닐, 시클로옥테닐 또는 시클로옥타디에닐을 의미하는 것으로 이해된다. 알킬닐 기는, 예를 들어, 에틸닐, 프로필닐, 부틸닐, 펜틸닐, 헥실닐, 헵틸닐 또는 옥틸닐을 의미하는 것으로 이해된다. C<sub>1</sub>- 내지 C<sub>40</sub>-알콕시 기는, 예를 들어, 메톡시, 트리플루오로메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, s-부톡시, t-부톡시 또는 2-메틸부톡시를 의미하는 것으로 이해된다.

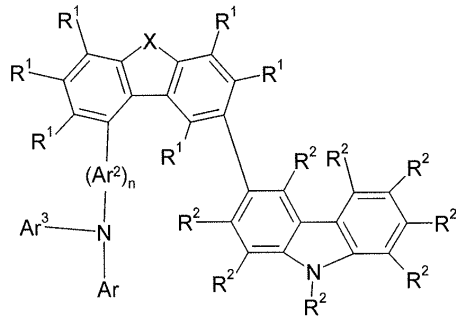
[0035] 5-40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 또한 각 경우에 위에서 언급된 라디칼로 치환될 수 있고 방향족 또는 헤테로방향족 시스템에 임의의 요망되는 위치를 통해 연결될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계는, 예를 들어, 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센, 페난트렌, 벤조페난트렌, 피렌, 크리센, 페틸렌, 플루오란텐, 벤조플루오란텐, 나프타센, 펜타센, 벤조피렌, 바이페닐, 바이페닐렌, 테르페닐, 테르페닐렌, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 디히드로페난트렌, 디히드로피렌, 테트라히드로피렌, 시스- 또는 트랜스-인덴오플루오렌, 시스- 또는 트랜스-모노벤조인덴오플루오렌, 시스- 또는 트랜스-디벤조인덴오플루오렌, 트록센, 이소트록센, 스피로트록센, 스피로이소트록센, 푸란, 벤조푸란, 이소벤조푸란, 디벤조푸란, 티오펀, 벤조티오펀, 이소벤조티오펀, 디벤조티오펀, 피롤, 인돌, 이소인돌, 카르바졸, 인돌로카르바졸, 인덴로카르바졸, 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, 퀴놀살린이미다졸, 옥사졸, 벤족사졸, 나프톡사졸, 안트톡사졸, 페난트톡사졸, 이속사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴놀살린, 1,5-디아자안트라센, 2,7-디아자피렌, 2,3-디아자피렌, 1,6-디아자피렌, 1,8-디아자피렌, 4,5-디아자피렌, 4,5,9,10-테트라아자페틸렌, 피라진, 페나진, 페녹사진, 페노티아진, 플루오루빈, 나프티리딘, 아자카르바졸, 벤조카르볼린, 페난트롤린, 1,2,3-트리아졸, 1,2,4-트리아졸, 벤조트리아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아졸, 1,2,5-옥사디아졸, 1,3,4-옥사디아졸, 1,2,3-티아디아졸, 1,2,4-티아디아졸, 1,2,5-티아디아졸, 1,3,4-티아디아졸, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 1,2,3-트리아진, 테트라졸, 1,2,4,5-테트라진, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,3,5-테트라진, 퓨린, 프테리딘, 인돌리진 및 벤조티아디아졸에서 유래하는 기를 의미하는 것으로 이해된다.

[0036] 본 발명의 하나의 실시양태에서, n 이 0 일 때, Ar 및 Ar<sup>3</sup> 이 둘다 페닐은 아니다.

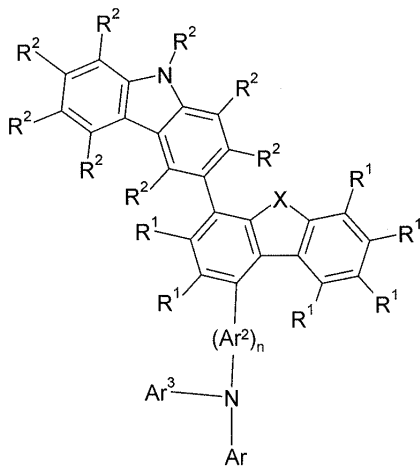
[0037] Ar 및 Ar<sup>3</sup> 기는 질소 원자를 통하는 것 이외의 결합에 의해 서로에게 연결되어 있지 않다.

[0038] 본 발명의 하나의 실시양태에서, 화학식 (1) 에서 카르바졸릴 기는 그의 2 위치를 통해 디벤조푸란 또는 디벤조티오펀에 결합되어 있지 않다.

[0039] 본 발명의 바람직한 실시양태에서, 화합물은 화학식 (1-1) 또는 화학식 (2-1) 의 화합물이다:



화학식 (1-1)

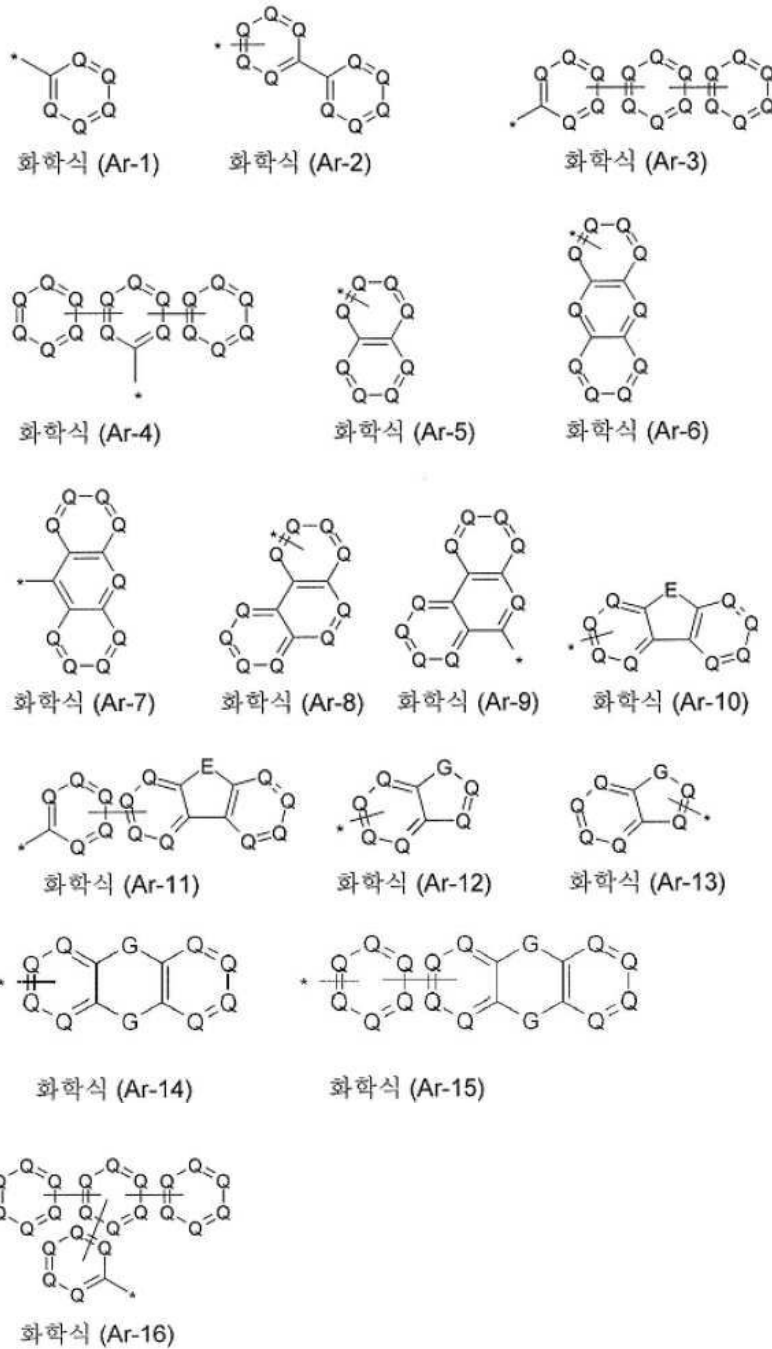


화학식 (2-1)

[0041] 식에서 지수 및 기호는 화학식 (1) 및 (2) 의 지수 및 기호에 상응한다.

[0043] 본 발명의 추가의 바람직한 실시양태에서, Ar 및/또는 Ar<sup>3</sup> 은 각 경우에 동일 또는 상이하고, 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자, 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계이고, 더욱 바람직하게는 6 내지 12 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리계 또는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리계 (이들 각각은 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수 있으나, 바람직하게는 치환되지 않음) 이다. 적합한 Ar 및 Ar<sup>3</sup> 기의 예는 각 경우에 동일 또는 상이하고, 페닐, 오르토-, 메타- 또는 파라-바이페닐, 테르페닐, 특히 분지형 테르페닐, 콰테르페닐, 특히 분지형 콰테르페닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-플루오레닐, 피리딜, 피리미디닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-디벤조푸라닐 및 1-, 2-, 3- 또는 4-디벤조티에닐 (이들 각각은 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수 있으나, 바람직하게는 치환되지 않음) 로 이루어지는 군으로부터 선택된다.

[0044] 본 발명의 바람직한 실시양태에서, Ar 및 Ar<sup>3</sup> 은 각 경우에 동일 또는 상이하고, 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-16) 의 구조로부터 선택된다:



[0045]

[0046]

[0047]

[0048]

[0049]

[0050]

[0051]

[0052]

식에서 기호는 화학식 (1) 의 기호에 상응하고, 게다가,

Q 는 각 경우에 동일 또는 상이하고, CR<sup>4</sup> 또는 N 이며, 여기에서 사이클 당 3 개 이하의 Q 기호가 N 이고;

E 는 각 경우에 동일 또는 상이하고, NR<sup>4</sup>, C(R<sup>4</sup>)<sub>2</sub>, O, S 또는 C=O 이고;

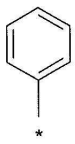
G 는 각 경우에 NR<sup>4</sup>, C(R<sup>4</sup>)<sub>2</sub>, O, S 또는 C=O 이고;

\* 는 질소 원자에 대한 결합을 나타낸다.

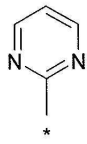
바람직하게는, 최대 하나의 Q 가 N 이다. 더욱 바람직하게는, 어떠한 Q 도 N 이 아니다.

추가 바람직한 실시양태에서, Ar 및 Ar<sup>3</sup> 기는 각 경우에 일반식이 하기 화학식 (Ar-1-1) 내지 (Ar-16-6) 의 각각의 특히 바람직한 실시양태에 의해 대체되어 있는 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-16) 의 구조를 갖는 기로부터 선

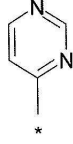
택된다 (예를 들어, 화학식 (Ar-1) 은 화학식 (Ar-1-1) 내지 (Ar-1-9) 중 하나에 의해 대체되어 있음):



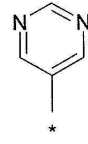
화학식 (Ar-1-1)



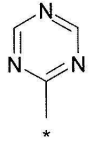
화학식 (Ar-1-2)



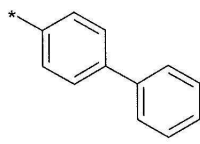
화학식 (Ar-1-3)



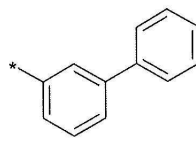
화학식 (Ar-1-4)



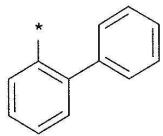
화학식 (Ar-1-5)



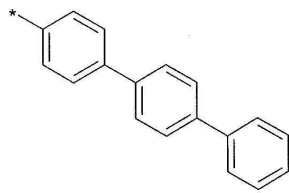
화학식 (Ar-2-1)



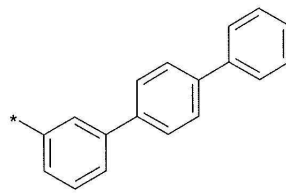
화학식 (Ar-2-2)



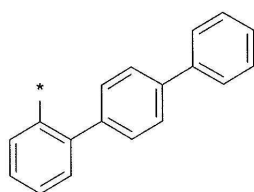
화학식 (Ar-2-3)



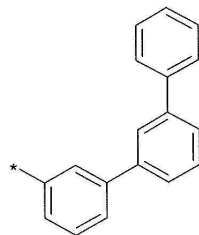
화학식 (Ar-3-1)



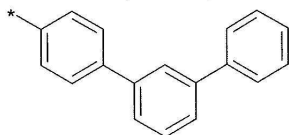
화학식 (Ar-3-2)



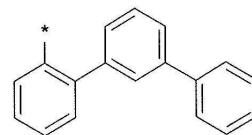
화학식 (Ar-3-3)



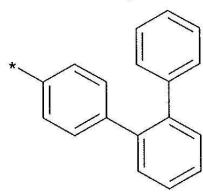
화학식 (Ar-3-4)



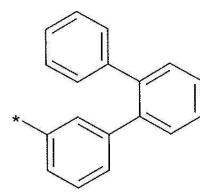
화학식 (Ar-3-5)



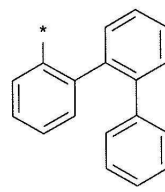
화학식 (Ar-3-6)



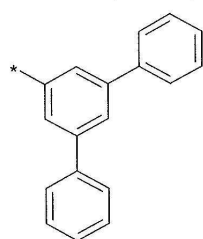
화학식 (Ar-3-7)



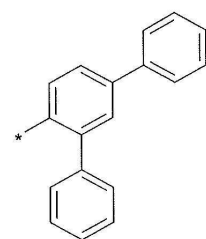
화학식 (Ar-3-8)



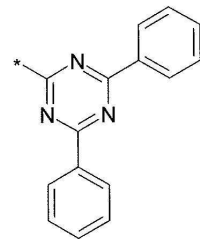
화학식 (Ar-3-9)



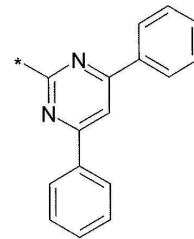
화학식 (Ar-4-1)



화학식 (Ar-4-2)



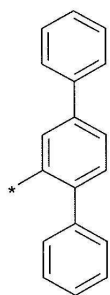
화학식 (Ar-4-3)



화학식 (Ar-4-4)

[0053]

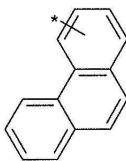
[0054]



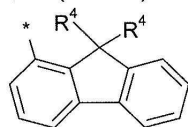
화학식 (Ar-4-5)



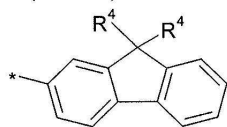
화학식 (Ar-5-1)



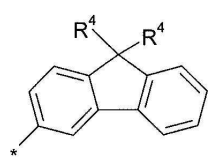
화학식 (Ar-8-1)



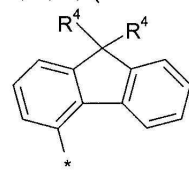
화학식 (Ar-10-1)



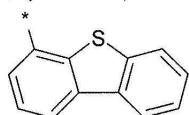
화학식 (Ar-10-2)



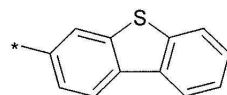
화학식 (Ar-10-3)



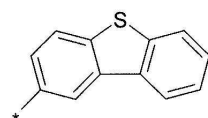
화학식 (Ar-10-4)



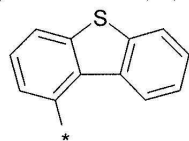
화학식 (Ar-10-5)



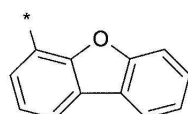
화학식 (Ar-10-6)



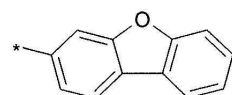
화학식 (Ar-10-7)



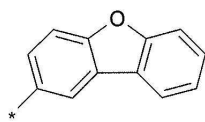
화학식 (Ar-10-8)



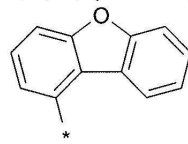
화학식 (Ar-10-9)



화학식 (Ar-10-10)



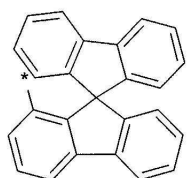
화학식 (Ar-10-11)



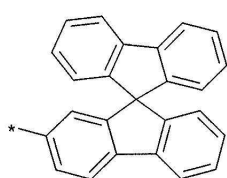
화학식 (Ar-10-12)

[0055]

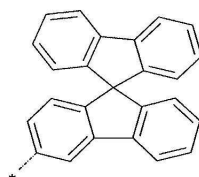




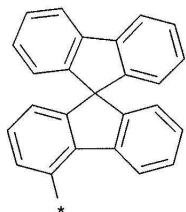
화학식 (Ar-10-13)



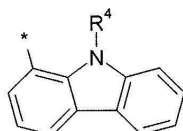
화학식 (Ar-10-14)



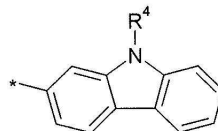
화학식 (Ar-10-15)



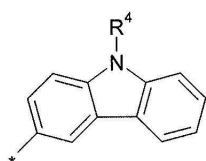
화학식 (Ar-10-16)



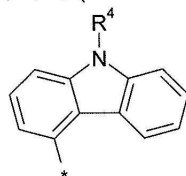
화학식 (Ar-10-17)



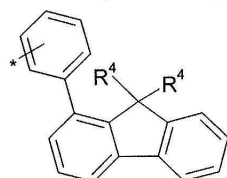
화학식 (Ar-10-18)



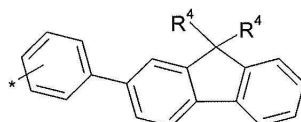
화학식 (Ar-10-19)



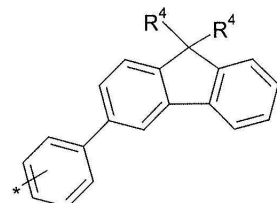
화학식 (Ar-10-20)



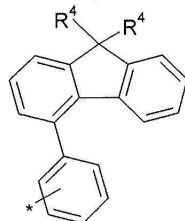
화학식 (Ar-11-1)



화학식 (Ar-11-2)



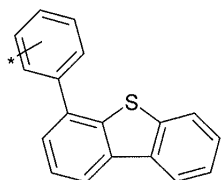
화학식 (Ar-11-3)



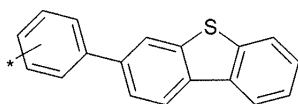
화학식 (Ar-11-4)

[0056]

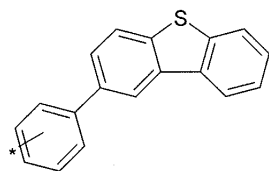




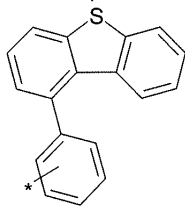
화학식 (Ar-11-5)



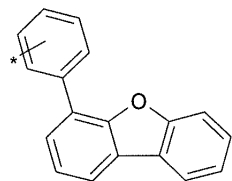
화학식 (Ar-11-6)



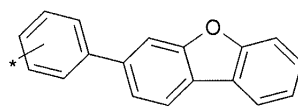
화학식 (Ar-11-7)



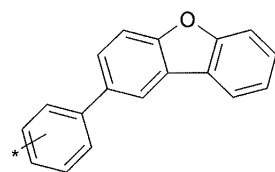
화학식 (Ar-11-8)



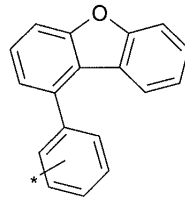
화학식 (Ar-11-9)



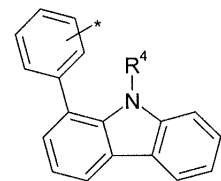
화학식 (Ar-11-10)



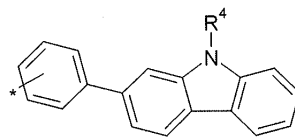
화학식 (Ar-11-11)



화학식 (Ar-11-12)

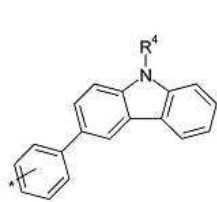


화학식 (Ar-11-13)

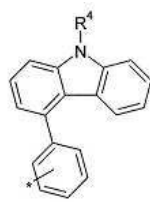


화학식 (Ar-11-14)

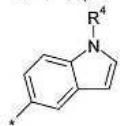
[0057]



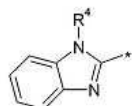
화학식 (Ar-11-15)



화학식 (Ar-11-16)

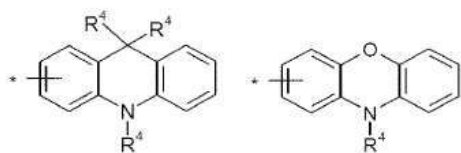


화학식 (Ar-12-1)

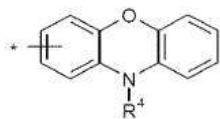


화학식 (Ar-13-1)

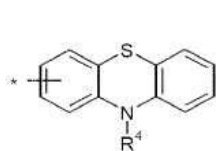
[0058]



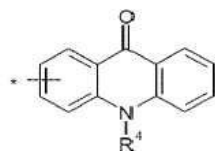
화학식 (Ar-14-1)



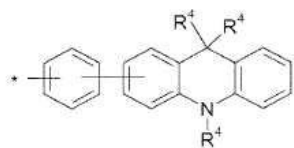
화학식 (Ar-14-2)



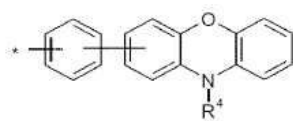
화학식 (Ar-14-3)



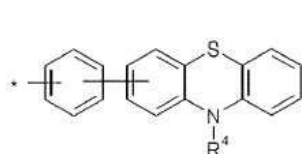
화학식 (Ar-14-4)



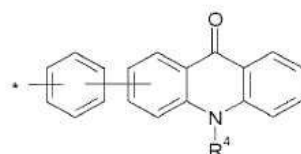
화학식 (Ar-15-1)



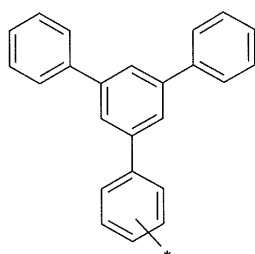
화학식 (Ar-15-2)



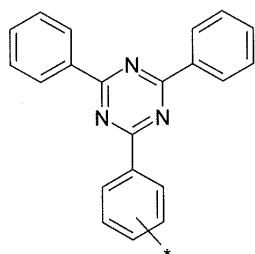
화학식 (Ar-15-3)



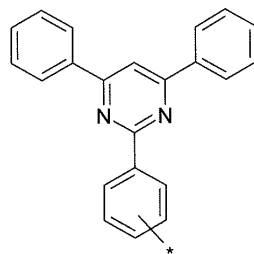
화학식 (Ar-15-4)



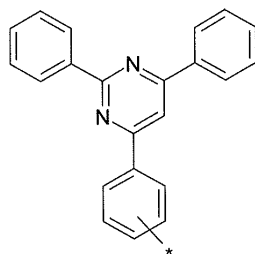
화학식 (Ar-16-1)



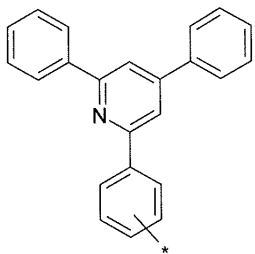
화학식 (Ar-16-2)



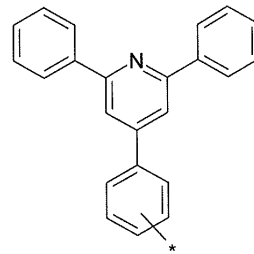
화학식 (Ar-16-3)



화학식 (Ar-16-4)



화학식 (Ar-16-5)



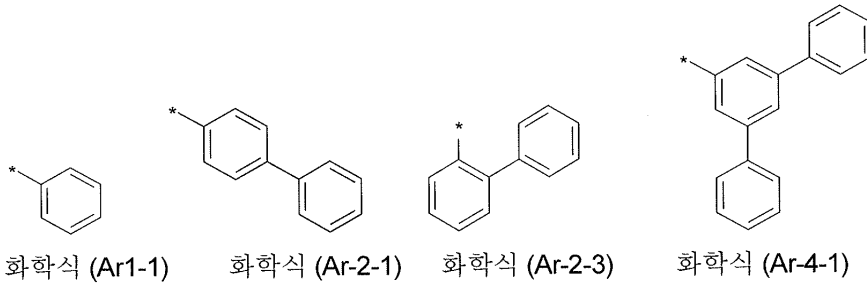
화학식 (Ar-16-6)

[0059]

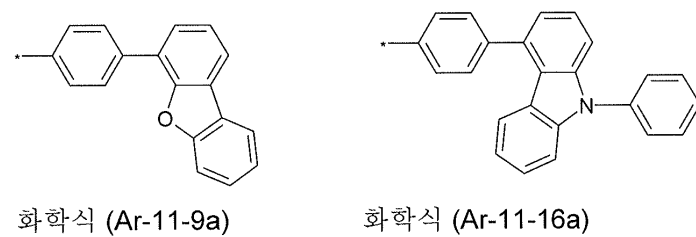
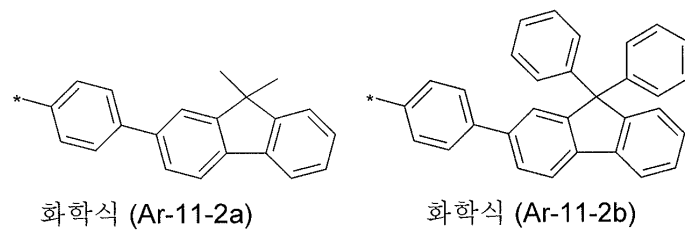
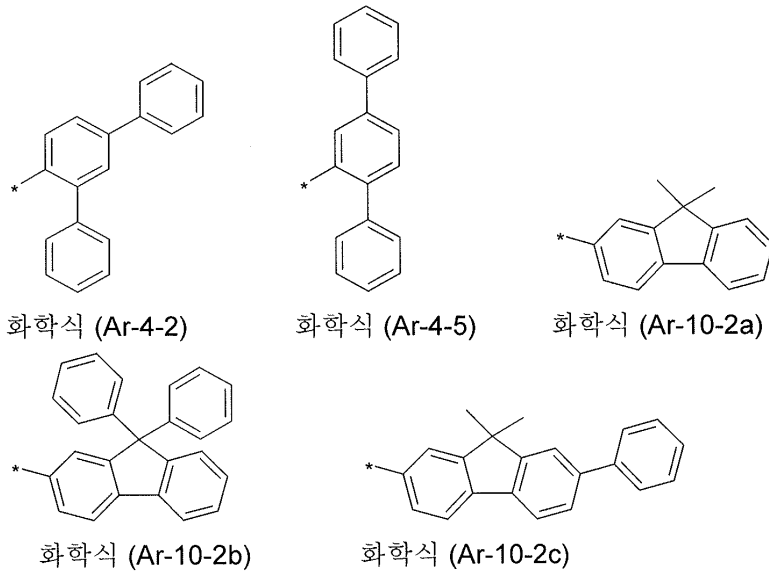
[0060]

식에서 기호는 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-16) 에서의 기호에 상응한다. 화학식은 자유 위치에서  $R^4$  에 의해 치환될 수 있다.

[0061] 본 발명의 추가의 바람직한 실시양태에서, Ar 은 화학식 (Ar-1-1) 내지 (Ar-11-16a)로부터 선택된다:



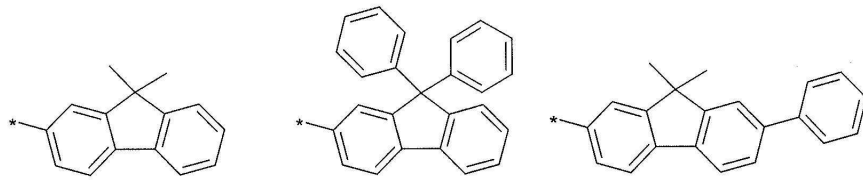
[0062]



[0063]

[0064] 식에서 기호는 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-16)에서의 기호에 상응한다. 화학식은 자유 위치에서  $R^4$ 에 의해 치환될 수 있다; 그들은 바람직하게는 치환되지 않는다.

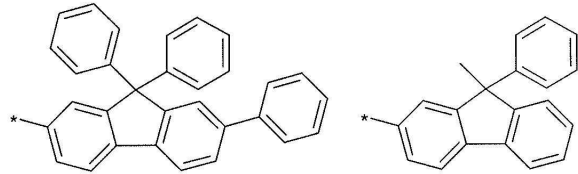
[0065] 본 발명의 추가의 실시양태에서, Ar<sup>3</sup> 은 화학식 (Ar-10-2a) 내지 (Ar-11-16a)로부터 선택된다:



화학식 (Ar-10-2a)

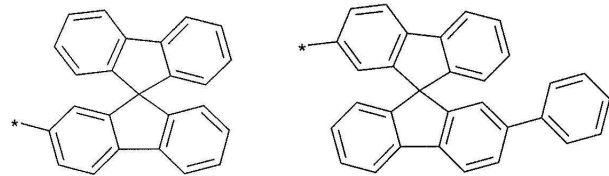
화학식 (Ar-10-2b)

화학식 (Ar-10-2c)



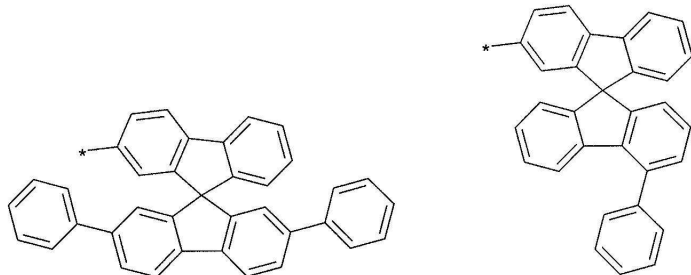
화학식 (Ar-10-2d)

화학식 (Ar-10-2e)



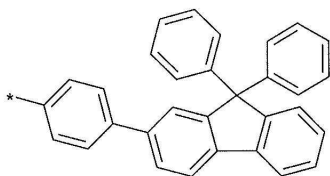
화학식 (Ar-10-14)

화학식 (Ar-10-14a)



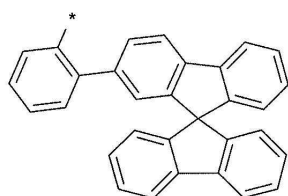
화학식 (Ar-10-14b)

화학식 (Ar-10-14c)

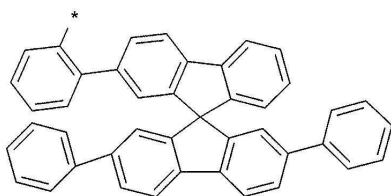


화학식 (Ar-11-2b)

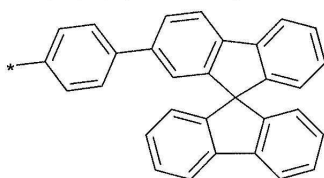
[0066]



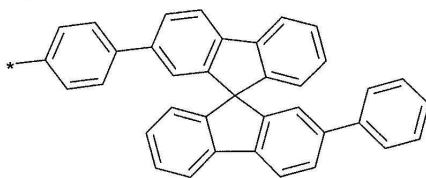
화학식 (Ar-11-2c)



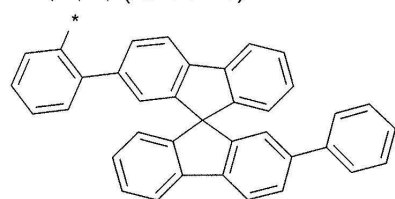
화학식 (Ar-11-2d)



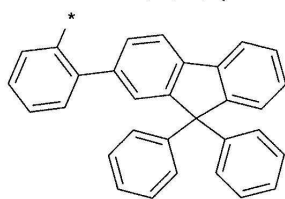
화학식 (Ar-11-2e)



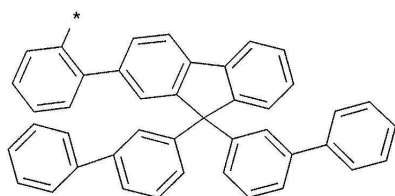
화학식 (Ar-11-2f)



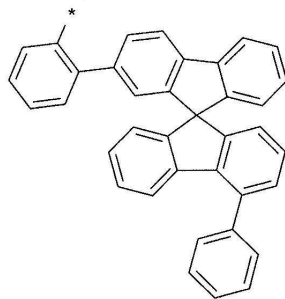
화학식 (Ar-11-2g)



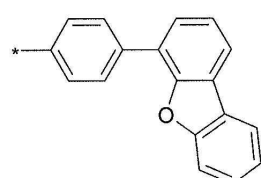
화학식 (Ar-11-2h)



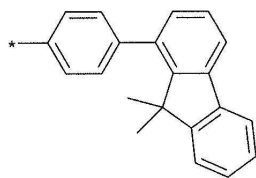
화학식 (Ar-11-2i)



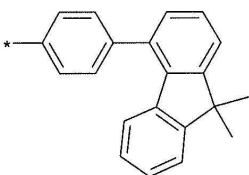
화학식 (Ar-11-2j)



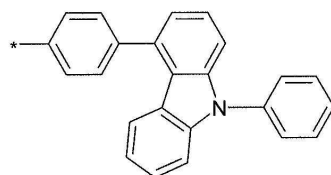
화학식 (Ar-11-9a)



화학식 (Ar-11-1a)



화학식 (Ar-11-4a)

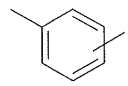


화학식 (Ar-11-16a)

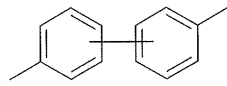
식에서 기호는 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-16) 에서의 기호에 상응한다. 화학식은 자유 위치에서  $R^4$  에 의해 치환될 수 있다; 그들은 바람직하게는 치환되지 않음.

추가 실시양태에서,  $Ar^2$  는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수 있는, 바람직하게는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 더욱 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 이가 방향족 고리계이다.

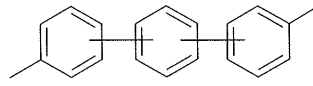
[0071] 본 발명의 추가의 실시양태에서, 지수  $n$  은 1 이고,  $Ar^2$  기는 하기 화학식 (Ar2-1) 내지 (Ar2-8) 중 하나의 기이다:



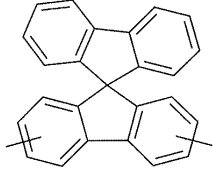
화학식 (Ar2-1)



화학식 (Ar2-2)



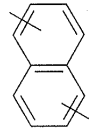
화학식 (Ar2-3)



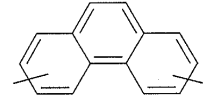
화학식 (Ar2-4)



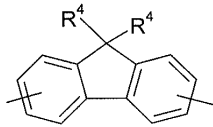
화학식 (Ar2-5)



화학식 (Ar2-6)



화학식 (Ar2-7)



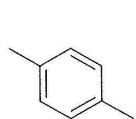
화학식 (Ar2-8)

[0072]

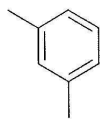
[0073] 식에서 사용된 기호는 화학식 (1) 에 관해 제시된 정의를 갖고, 두 개의 말단 단일 결합은 인접 기에 대한 결합이다. 기는 자유 위치에서  $R^4$  에 의해 치환될 수 있다. 그들은 바람직하게는 치환되지 않는다.

[0074] 바람직하게는,  $Ar^2$  는 각 경우에 화학식 (Ar2-1) 및 (Ar2-2) 의 구조로부터 선택된다.

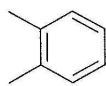
[0075] 상기 화학식의 바람직한 실시양태는 하기 화학식 (Ar2-1a) 내지 (Ar2-8b) 엔 의해 제시된다:



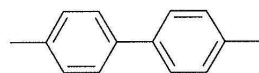
화학식 (Ar2-1a)



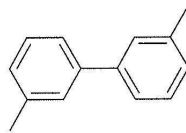
화학식 (Ar2-1b)



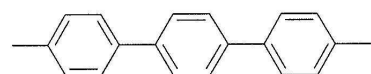
화학식 (Ar2-1c)



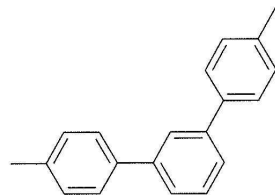
화학식 (Ar2-2a)



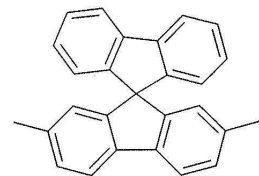
화학식 (Ar2-2b)



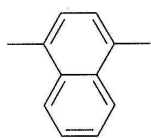
화학식 (Ar2-3a)



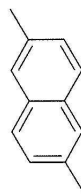
화학식 (Ar2-3b)



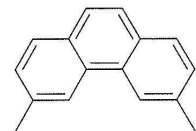
화학식 (Ar2-4a)



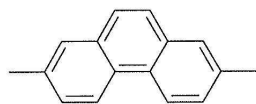
화학식 (Ar2-5a)



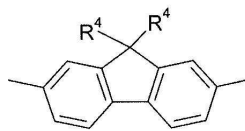
화학식 (Ar2-6a)



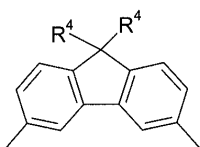
화학식 (Ar2-7a)



화학식 (Ar2-7b)



화학식 (Ar2-8a)



화학식 (Ar2-8b)

[0077]

[0078]

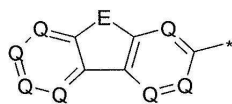
식에서 사용된 기호는 제시된 정의를 갖고, 두 개의 말단 단일 결합은 인접 기에 대한 결합을 나타낸다. 기는 자유 위치에서  $R^4$  에 의해 치환될 수 있다. 그들은 바람직하게는 치환되지 않는다.

[0079]

본 발명의 하나의 실시양태에서, Ar 또는  $Ar^3$  은, 바람직하게는  $n=0$  일 때, 화학식 (Ar-10-13), (Ar-10-14), (Ar-10-15), (Ar-10-16) 중 하나의 기이다; 특히, Ar 또는  $Ar^3$  은 9,9'-스피로바이플루오렌 기를 포함한다.

[0080]

하나의 실시양태에서,  $Ar^3$  이 E 가  $C(R^4)_2$  인 화학식 (Ar-10) 의 기인 경우에, 질소 원자에 대한 결합은 화학식 (Ar-10a) 에 따른다:



화학식 (Ar-10a)

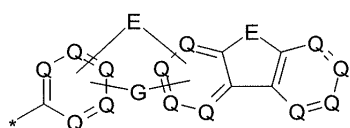
[0081]

- [0082] 본 발명의 추가의 실시양태에서, Ar 및  $Ar^3$  이 화학식 (Ar-10) 의 기인 경우에, 각 경우에 질소 원자에 대한 결합은 화학식 (Ar-10a) 에 따른다.
- [0083] 본 발명의 추가의 실시양태에서,  $Ar^3$  이 화학식 (Ar-10) 또는 (Ar-11) 의 기일 때,  $Ar^3$  은 화학식 (Ar-10-2), (Ar-10-14) 및 (Ar-11-2) 중 하나의 기이다.
- [0084] 본 발명의 추가의 실시양태에서,  $Ar^3$  및 Ar 이 화학식 (Ar-10) 또는 (Ar-11) 의 기일 때,  $Ar^3$  및 Ar 은 화학식 (Ar-10-2), (Ar-10-14) 및 (Ar-11-2) 중 하나의 기이다.
- [0085] 본 발명의 추가의 실시양태에서,  $Ar^3$  및 Ar 은, n 이 0 일 때, 각각 E 가 0 또는 S 인 화학식 (Ar-10) 의 기가 아니다.
- [0086] 본 발명의 추가의 실시양태에서, n 이 0 일 때,  $Ar^3$  및 Ar 은 각각 E 가 0, S 및,  $C(R^4)_2$  의 경우에 화학식 (Ar-10) 의 화합물, 두 개의  $R^4$  가 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하지 않을 때 화학식 (Ar-10a) 의 기가 아니고, 그렇지 않으면,  $C(R^4)_2$  의 경우에, 화학식 (Ar-10) 의 기이다.
- [0087] 본 발명의 추가의 실시양태에서  $Ar^3$  또는 Ar 은, n 이 0 일 때, 적어도 하나의 카르바졸릴 기 또는 적어도 하나의 9,9'-스피로바이폴루오렌 기, 바람직하게는 적어도 하나의 9,9'-스피로바이폴루오렌 기를 포함한다.
- [0088] 본 발명의 추가의 실시양태에서,  $R^1$  및  $R^2$  는 각 경우에 동일 또는 상이하고, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계의 경우에, 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-16) 중 하나로부터 선택되며, 여기에서 기호의 정의는 Ar 에 관해 정의된 바와 같은 기호에 상응하고, \* 는 카르바졸 또는 디벤조푸란 또는 디벤조티오펜에 대한 결합이다.
- [0089] 바람직하게는, Ar,  $Ar^2$  및  $Ar^3$  에 결합된 R 치환기는 H, D, F, CN,  $N(Ar^1)_2$ , 1 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 기, 또는 3 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기, 또는 2 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 (이는 각 경우에 하나 이상의  $R^4$  라디칼에 의해 치환될 수 있으나, 바람직하게는 치환되지 않음), 또는 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 더욱 바람직하게는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이들 각각은 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있으나, 바람직하게는 치환되지 않음) 로 이루어지는 군으로부터 선택되며; 동시에, 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의 R 치환기가 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있으나, 바람직하게는 치환되지 않는 모노시클릭 또는 폴리시클릭 지방족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하다.
- [0090] 바람직하게는,  $R^1$  치환기는 H, D, F, CN, 1 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 기, 또는 3 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기, 또는 2 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 (이는 각 경우에 하나 이상의  $R^4$  라디칼에 의해 치환될 수 있으나, 바람직하게는 치환되지 않음), 또는 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 더욱 바람직하게는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이들 각각은 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있으나, 바람직하게는 치환되지 않음) 로 이루어지는 군으로부터 선택되며; 동시에, 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의  $R^1$  치환기가 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있으나, 바람직하게는 치환되지 않는 모노시클릭 또는 폴리시클릭 지방족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하다.
- [0091] 바람직하게는,  $R^2$  치환기는 H, D, F, CN, 1 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 기, 또는 3 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기, 또는 2 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 2, 3 또는

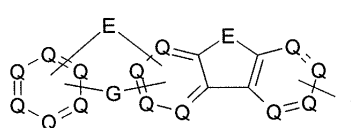


4 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 (이는 각 경우에 하나 이상의  $R^4$  라디칼에 의해 치환될 수 있으나, 바람직하게는 치환되지 않음), 또는 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 더욱 바람직하게는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이들 각각은 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있으나, 바람직하게는 치환되지 않음) 로 이루어지는 군으로부터 선택되며; 동시에, 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의  $R^2$  치환기가 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있으나, 바람직하게는 치환되지 않는 모노시클릭 또는 폴리시클릭 지방족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하다.

[0092] 본 발명의 추가의 실시양태에서, R,  $R^1$  또는  $R^2$  는 각 경우에 동일 또는 상이하고, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계의 경우에, 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-16) 의 구조, 또는 그의 바람직한 실시양태, 및 화학식 (Ar-17) 및 (Ar-18) 의 구조로부터 선택된다:



화학식 (Ar-17)



화학식 (Ar-18)

[0093]

[0094] 식에서 기호는 화학식 (1) 의 기호에 상응하고, 게다가, 화학식 (Ar-17) 및 (Ar-18) 에서:

[0095] Q 는 각 경우에 동일 또는 상이하고,  $CR^4$  또는 N 이며, 여기에서 사이클 당 3 개 이하의 Q 기호가 N 이고;

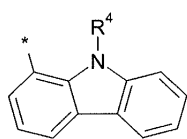
[0096] E 는 각 경우에 동일 또는 상이하고,  $NR^4$ ,  $C(R^4)_2$ , O, S 또는 C=O 이고;

[0097] G 는 각 경우에  $NR^4$ ,  $C(R^4)_2$ , O, S 또는 C=O 이고;

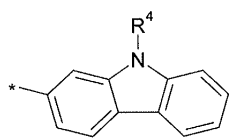
[0098] \* 는 방향족 고리계에 대한 결합을 나타낸다.

[0099] 바람직하게는, 어떠한 Q 도 N 이 아니다.

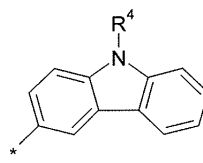
[0100] 추가의 바람직한 실시양태에서, R,  $R^1$  또는  $R^2$  기는 각 경우에, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계의 경우에, 일 반식이 하기 화학식 (Ar-1-1) 내지 (Ar-16-6) 의 각각의 특히 바람직한 실시양태에 의해 대체되어 있는 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-18) 의 구조를 갖는 기로부터 선택되며 (예를 들어, 화학식 (Ar-1) 은 화학식 (Ar-1-1) 내지 (Ar-1-9) 중 하나에 의해 대체되어 있음), 부가적으로 하기 화학식이 바람직하다:



화학식 (Ar-10-17)

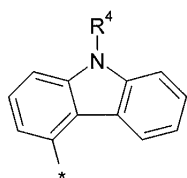


화학식 (Ar-10-18)

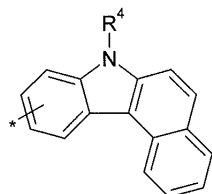


화학식 (Ar-10-19)

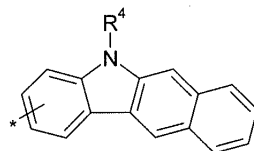
[0101]



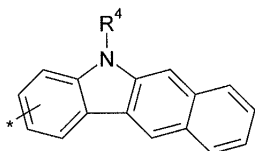
화학식 (Ar-10-20)



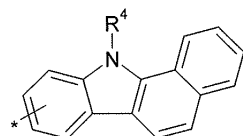
화학식 (Ar-10-21)



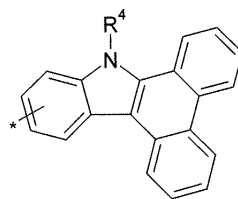
화학식 (Ar-10-22)



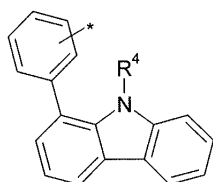
화학식 (Ar-10-23)



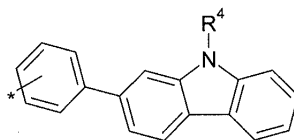
화학식 (Ar-10-24)



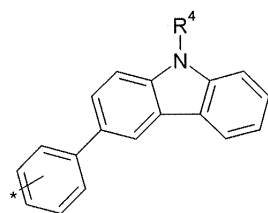
화학식 (Ar-10-25)



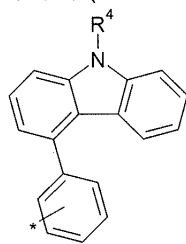
화학식 (Ar-11-13)



화학식 (Ar-11-14)



화학식 (Ar-11-15)



화학식 (Ar-11-16)

[0102]

[0103]

식에서 기호는 화학식 (1) 의 기호에 상응한다.

[0104]

바람직하게는,  $R^4$  치환기는 H, D, F, CN, 1 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 기, 또는 3 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기, 또는 2 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 (이는 각 경우에 하나 이상의  $R^4$  라디칼에 의해 치환될 수 있으나, 바람직하게는 치환되지 않음), 또는 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 더욱 바람직하게는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이들 각각은 하나 이상의 비방향족  $R^5$  라디칼로 치환될 수 있으나, 바람직하게는 치환되지 않음) 로 이루어지는 군으로부터 선택되며; 동시에, 동일한 탄소 원자에 또는 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의  $R^4$  치환기가 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수 있는, 그러나 바람직하게는 치환되지 않는 모노시클릭 또는 폴리시클릭 지방족 또는 방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하다.

[0105]

E 또는 G 가  $NR^4$  일 때, 이러한 질소 원자에 결합된  $R^4$  라디칼이 각 경우에 동일 또는 상이하고, 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의  $R^5$  라디칼에 의해 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계, 더욱 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^5$  라디칼에 의해 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계일 때가 바람직하다. 적합한  $R^4$  치환기의 예는 페닐, 오르토-, 메타- 또는 파라-바이페닐, 테르페닐, 특히 분지형 테르페닐, 콰테르페닐, 특히 분지형 콰테르페닐, 1-, 2-, 3- 또는

4-플루오레닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-스피로바이플루오레닐, 피리딜, 피리미디닐, 1,3,5-트리아지닐, 4,6-디페닐-1,3,5-트리아지닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-디벤조푸라닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-디벤조티에닐 및 1-, 2-, 3- 또는 4-카르바졸릴로 이루어지는 군으로부터 선택되며, 여기에서 카르바졸릴 기는 질소 원자 상에서 H 또는 D 이외의 R<sup>5</sup> 라디칼에 의해 치환된다. 이들 기는 각각 하나 이상의 R<sup>5</sup> 라디칼에 의해 치환될 수 있으나, 바람직하게는 치환되지 않는다.

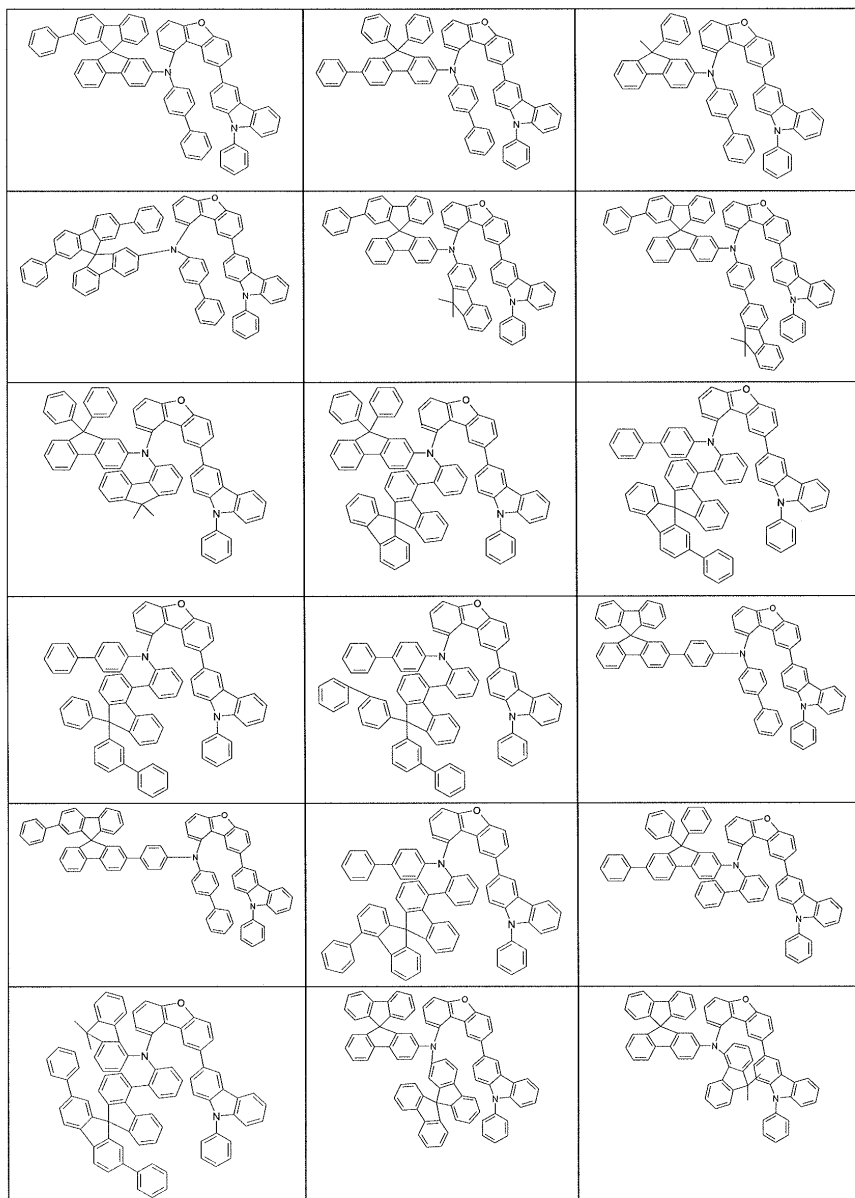
[0106] E 가 C(R<sup>4</sup>)<sub>2</sub> 일 때, 이러한 탄소 원자에 결합된 R<sup>4</sup> 라디칼은 각 경우에 동일 또는 상이하고, 1 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 기, 또는 3 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기, 또는 2 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 (이는 각 경우에 하나 이상의 R<sup>5</sup> 라디칼에 의해 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 비인접 CH<sub>2</sub> 기는 O 로 대체될 수 있고, 여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D 또는 F 로 대체될 수 있음), 또는 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 더욱 바람직하게는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이들 각각은 하나 이상의 R<sup>5</sup> 라디칼로 치환될 수 있음) 이며; 동시에, 두 개의 R<sup>4</sup> 치환기가 하나 이상의 R<sup>5</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭 지방족 또는 방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능할 때가 바람직하다. 두 개의 R<sup>4</sup> 치환기 사이의 고리 형성은 스피로 시스템을 형성한다.

[0107] 본 발명의 추가의 실시양태에서, 화합물은 중심 질소 원자에서 떨어져 있는 임의의 추가의 비가교 아민을 포함하지 않는다. 이는, 예를 들어, 어떠한 라디칼도 N(R<sup>4</sup>)<sub>2</sub> 이 아니라는 것을 의미한다.

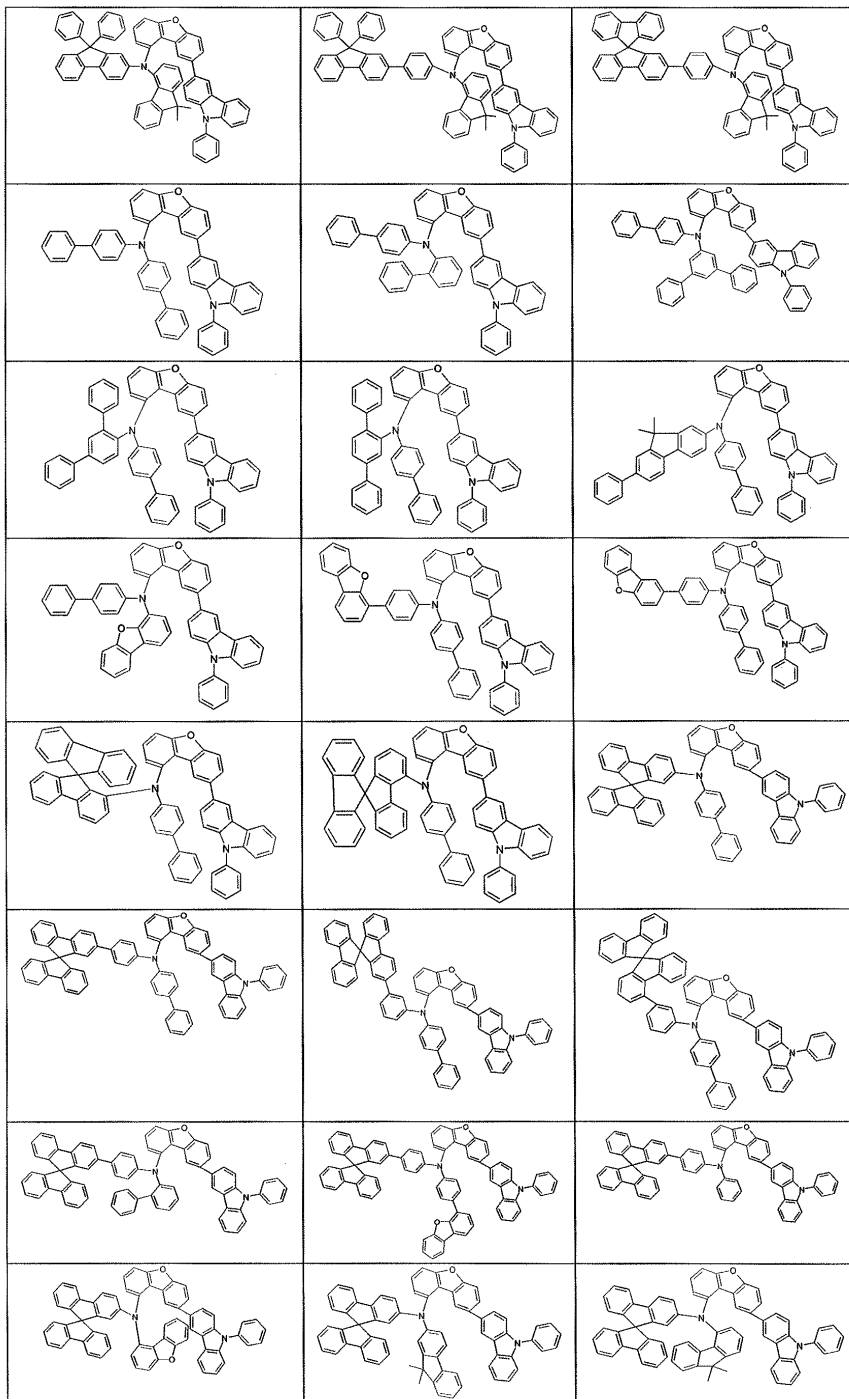
[0108] 본 발명의 추가의 실시양태에서, 화합물에서의 어떠한 라디칼도 N(R<sup>4</sup>)<sub>2</sub> 또는 N(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub> 가 아니다. 화합물은 그 러므로 - 화학식 (1) 또는 (2) 에 기초하여 - 질소 원자를 통해 결합되어 있는 임의의 추가의 비가교 또는 가교 아민을 포함하지 않는다.

[0109] 위에서 언급된 선호도는 개별적으로 또는 함께 존재할 수 있다. 위에서 언급된 선호도가 함께 존재할 때가 바람직하다.

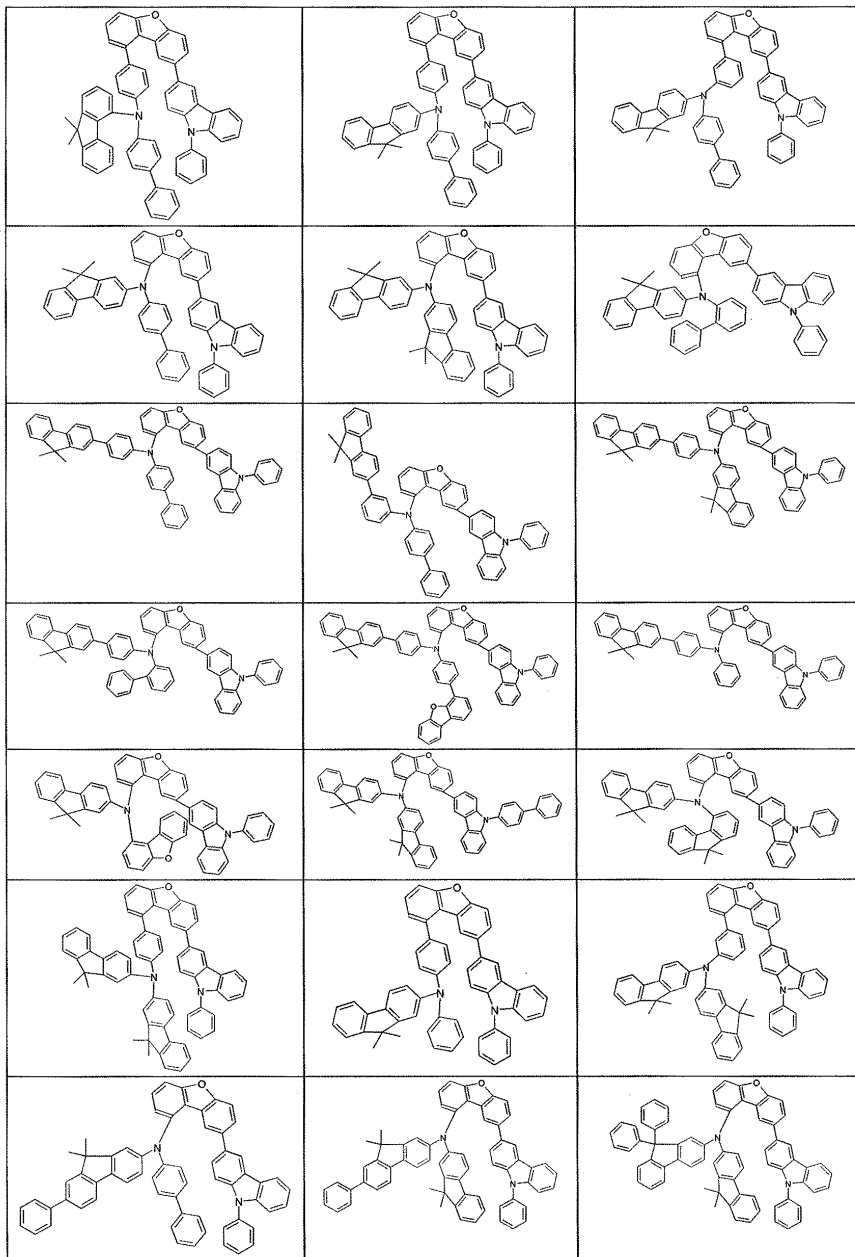
[0110] 본 발명의 적합한 화합물의 예는 아래 제시된 구조이다.



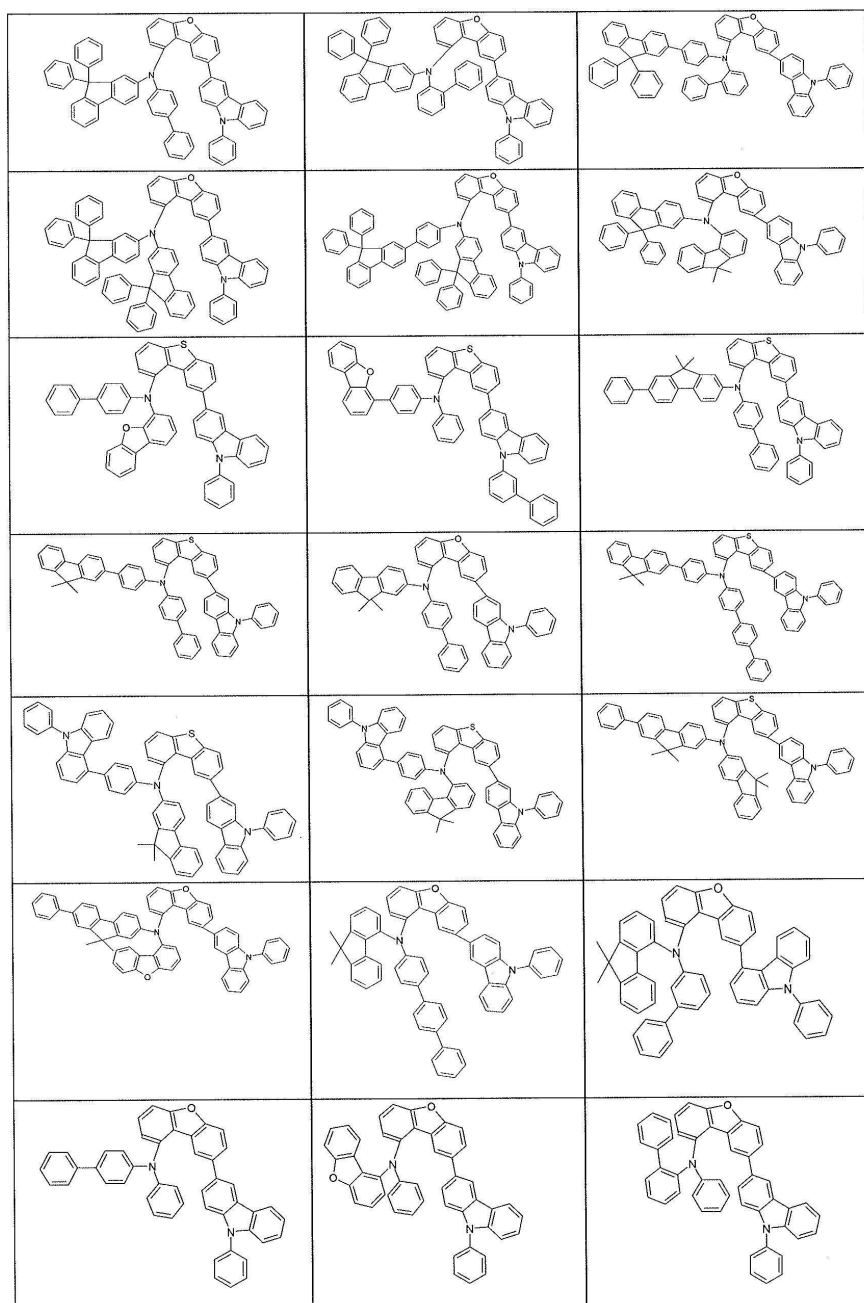
[0111]



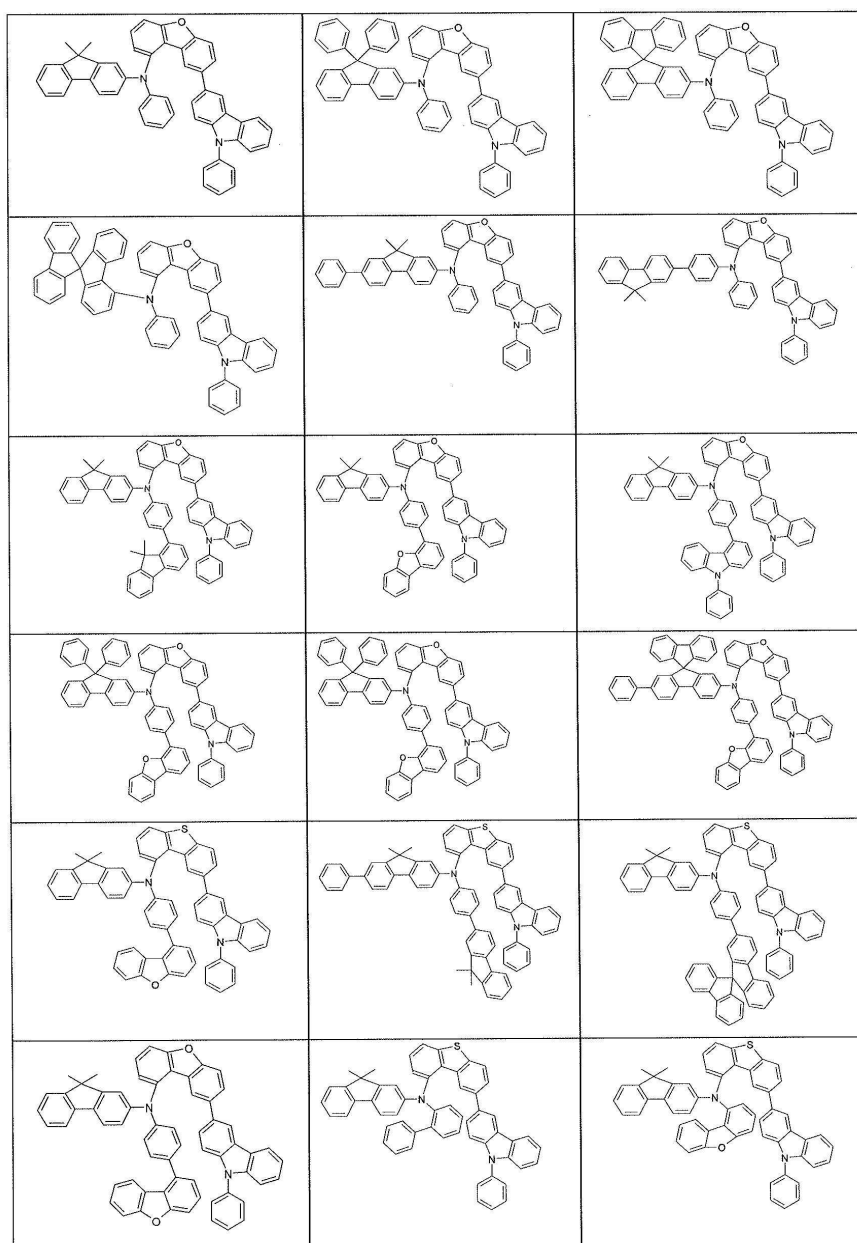
[0112]



[0113]

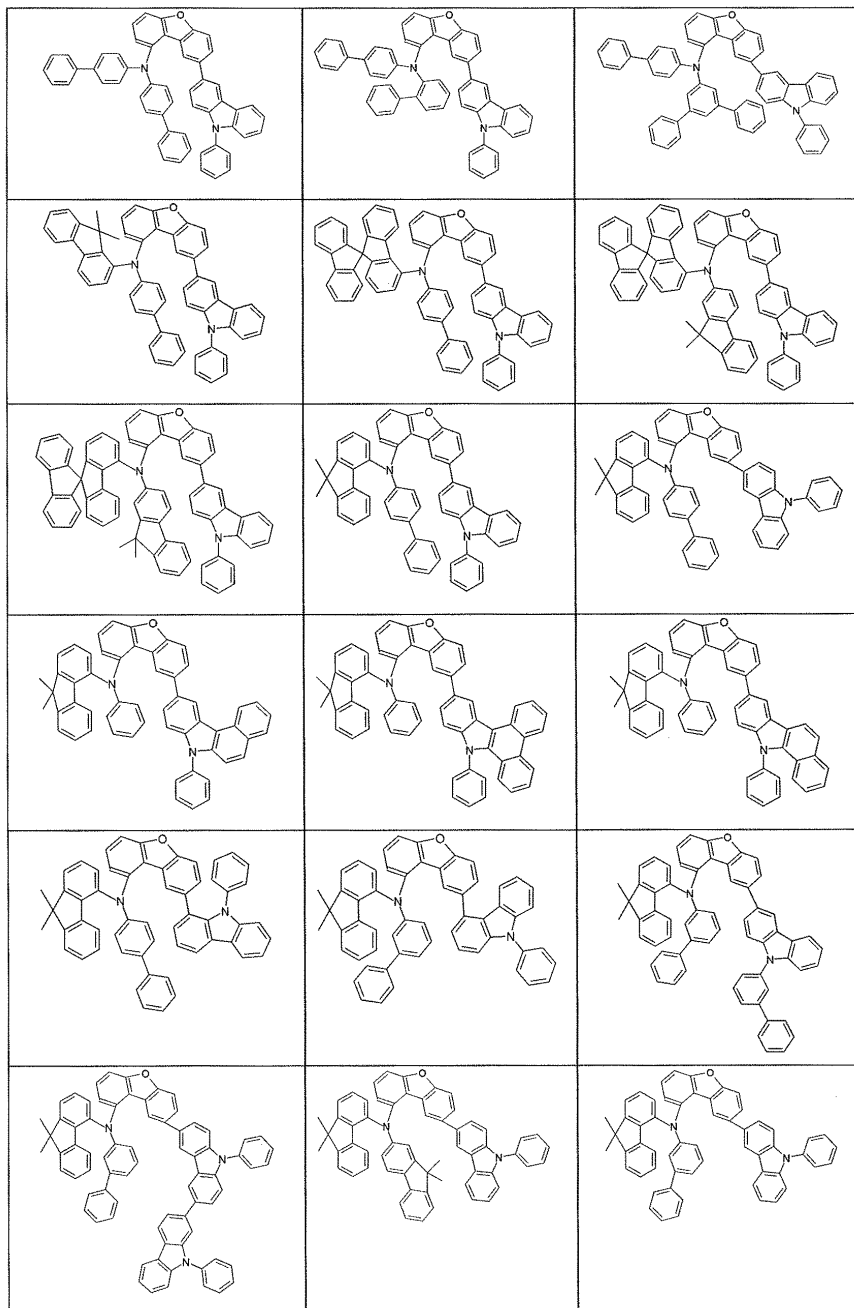


[0114]

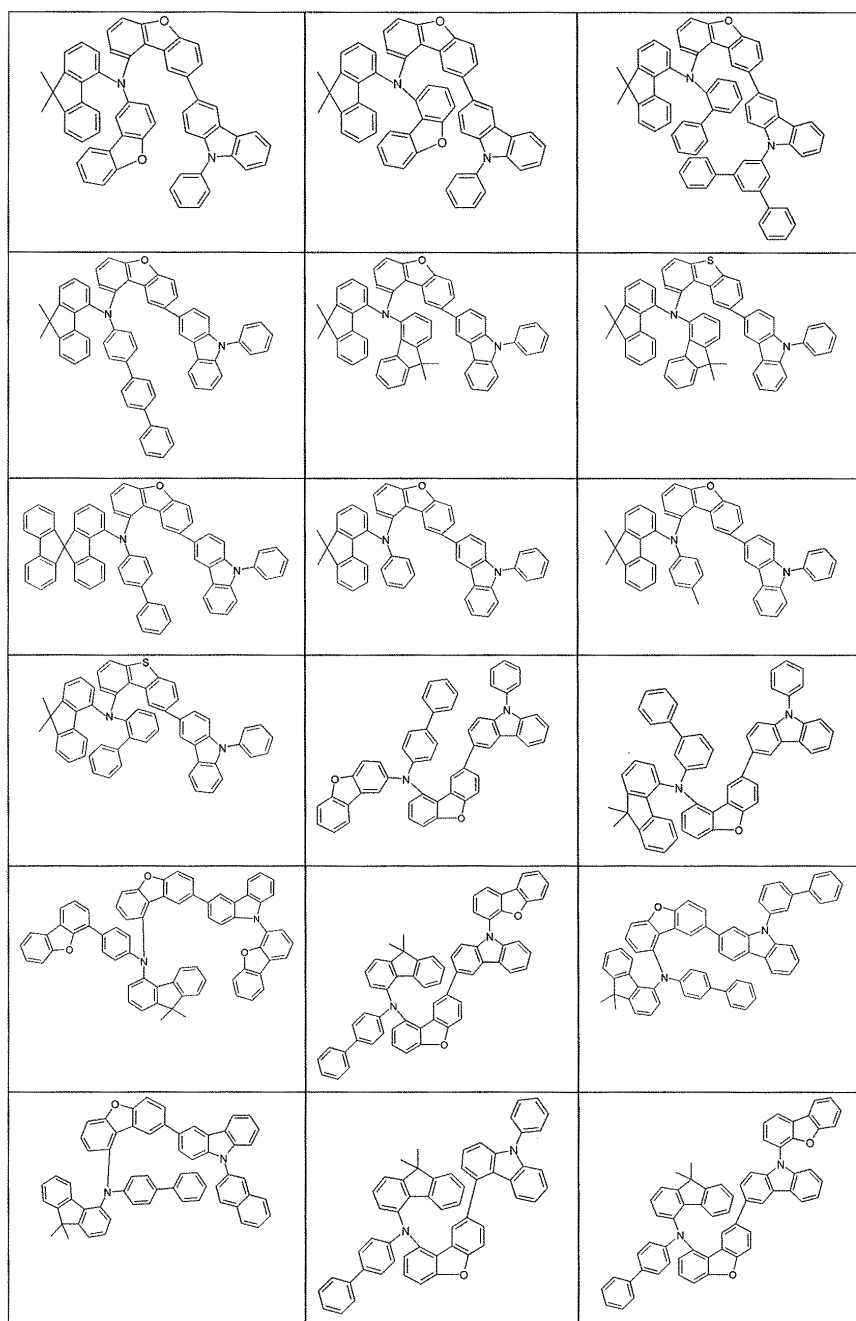


[0115]

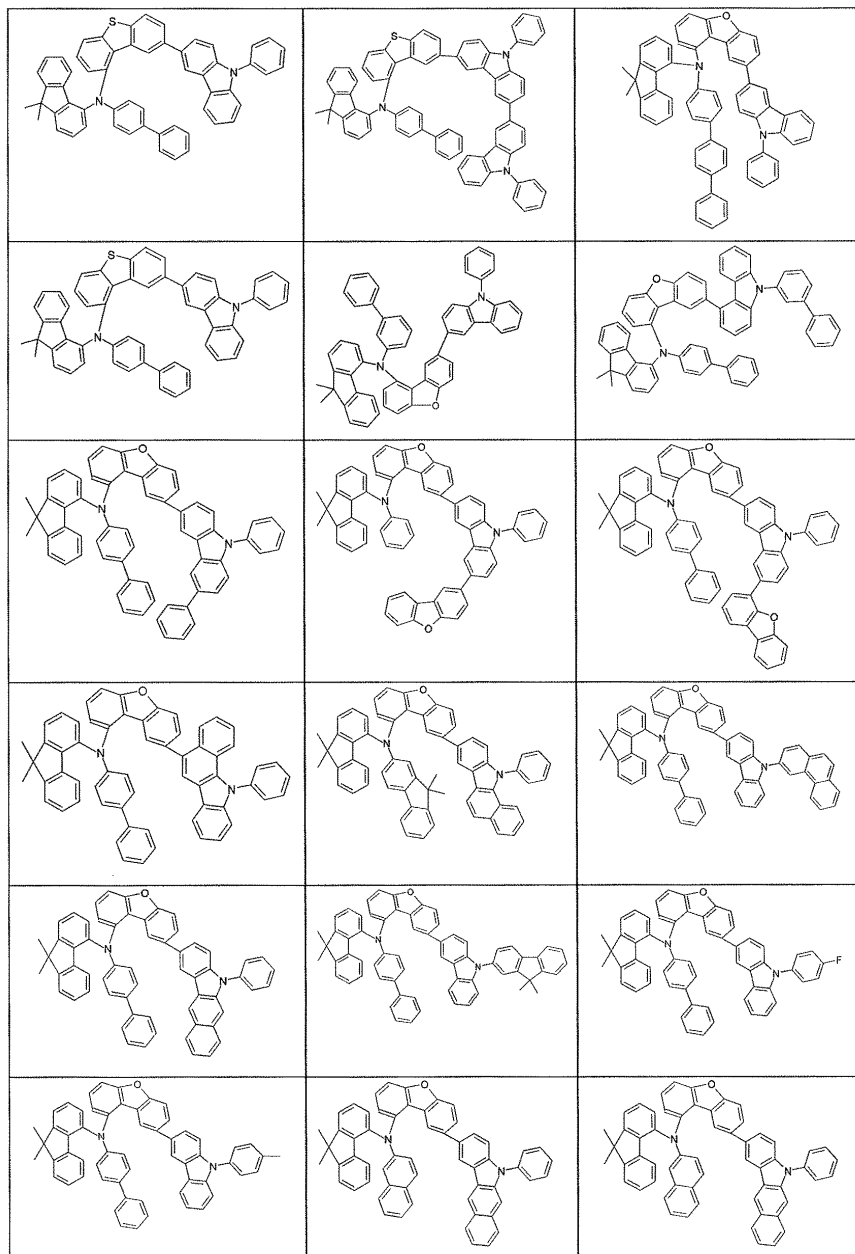




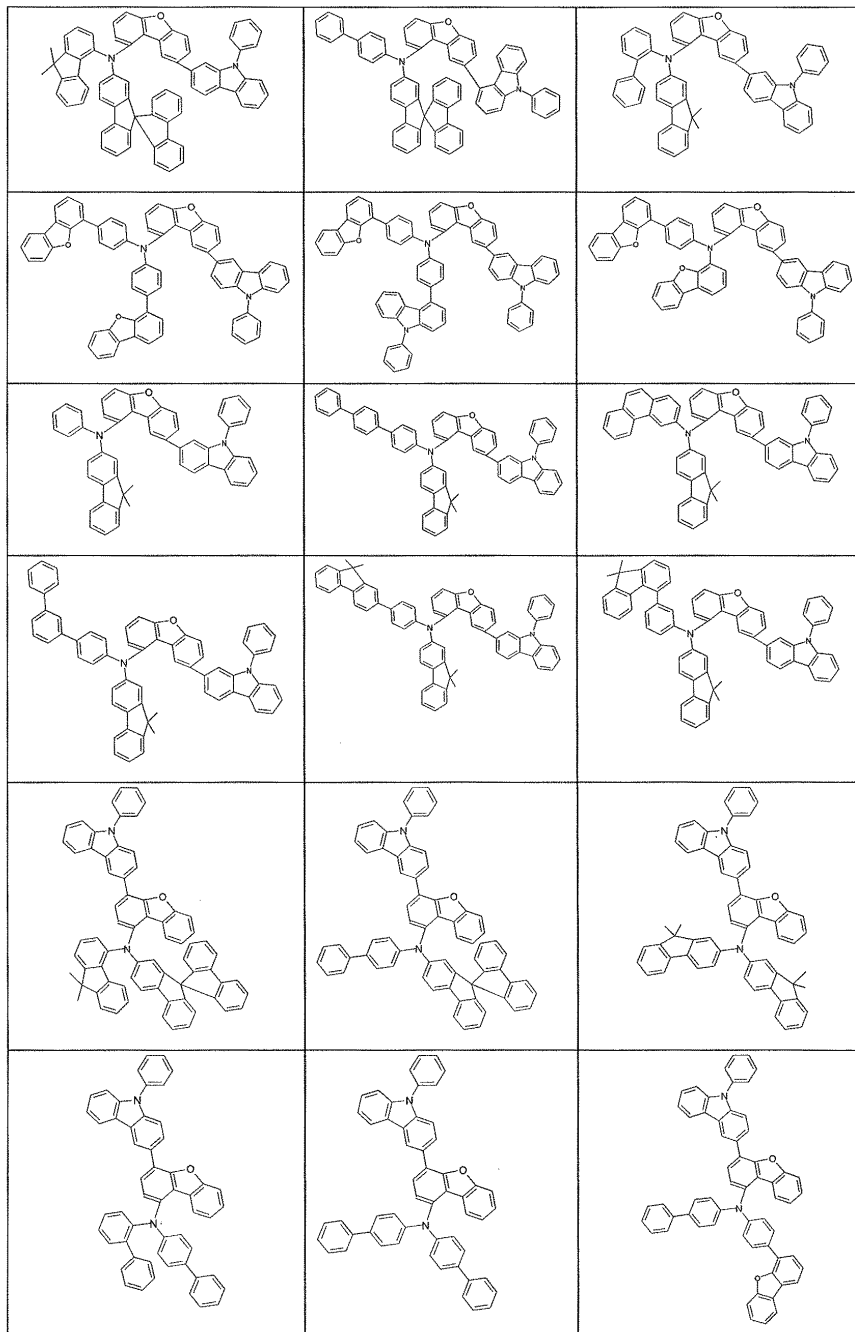
[0116]



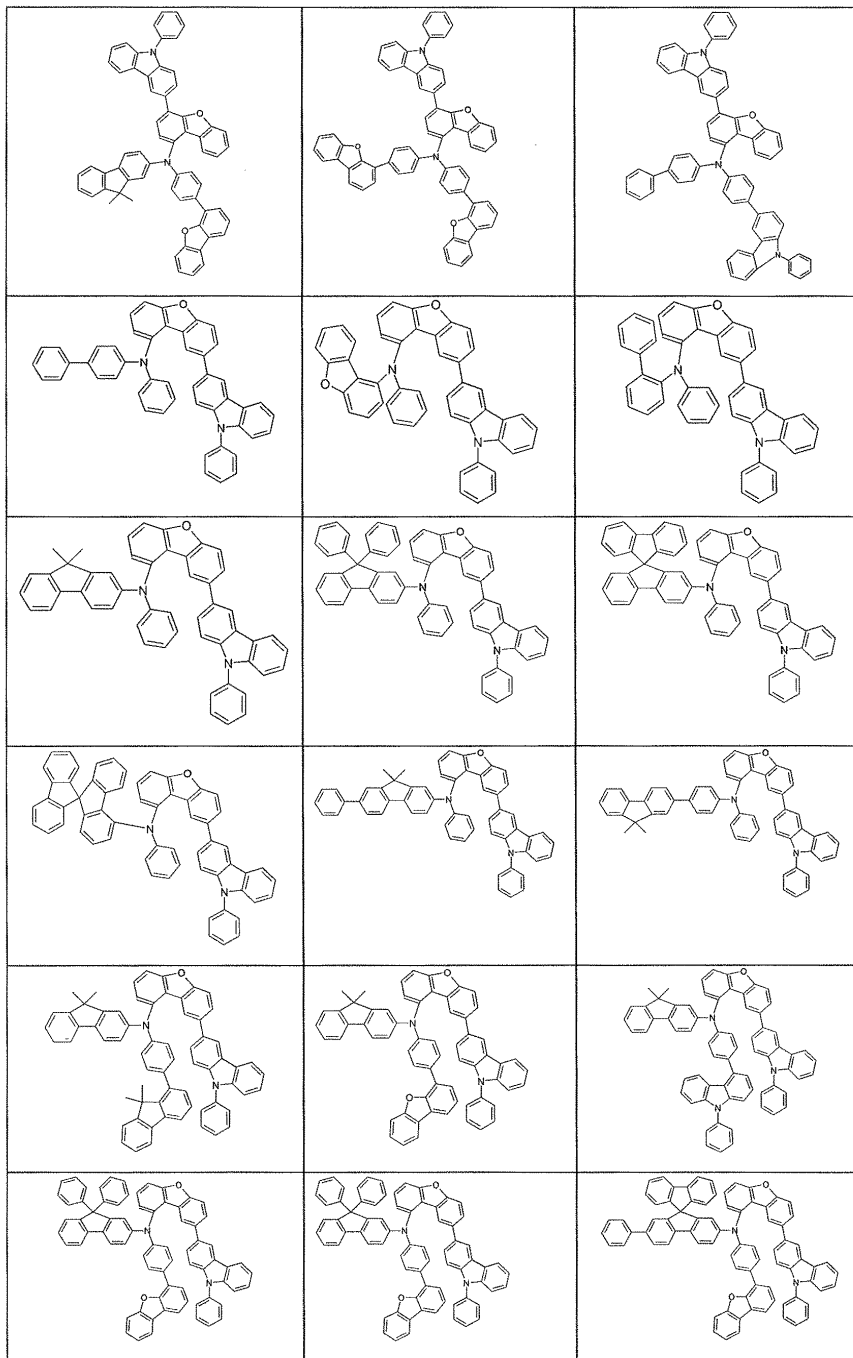
[0117]



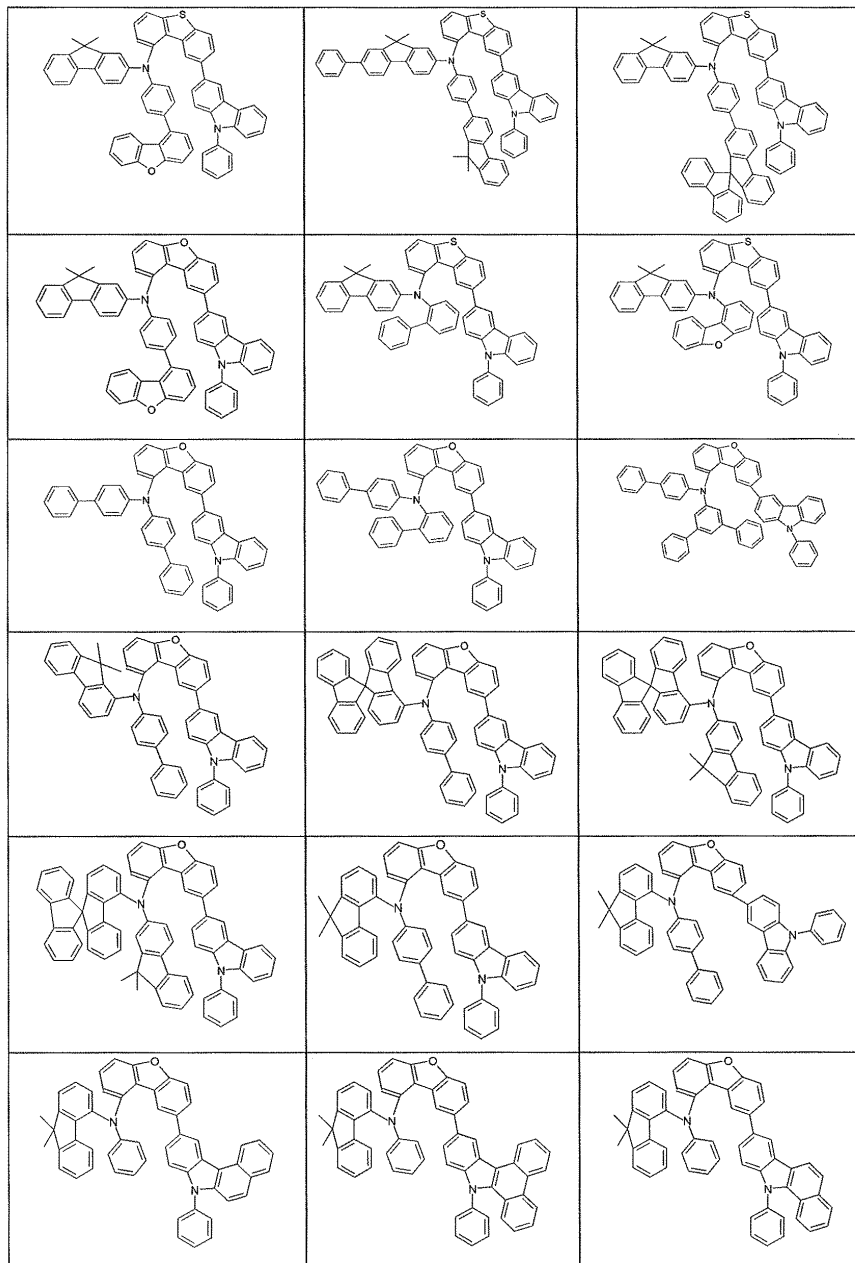
[0118]



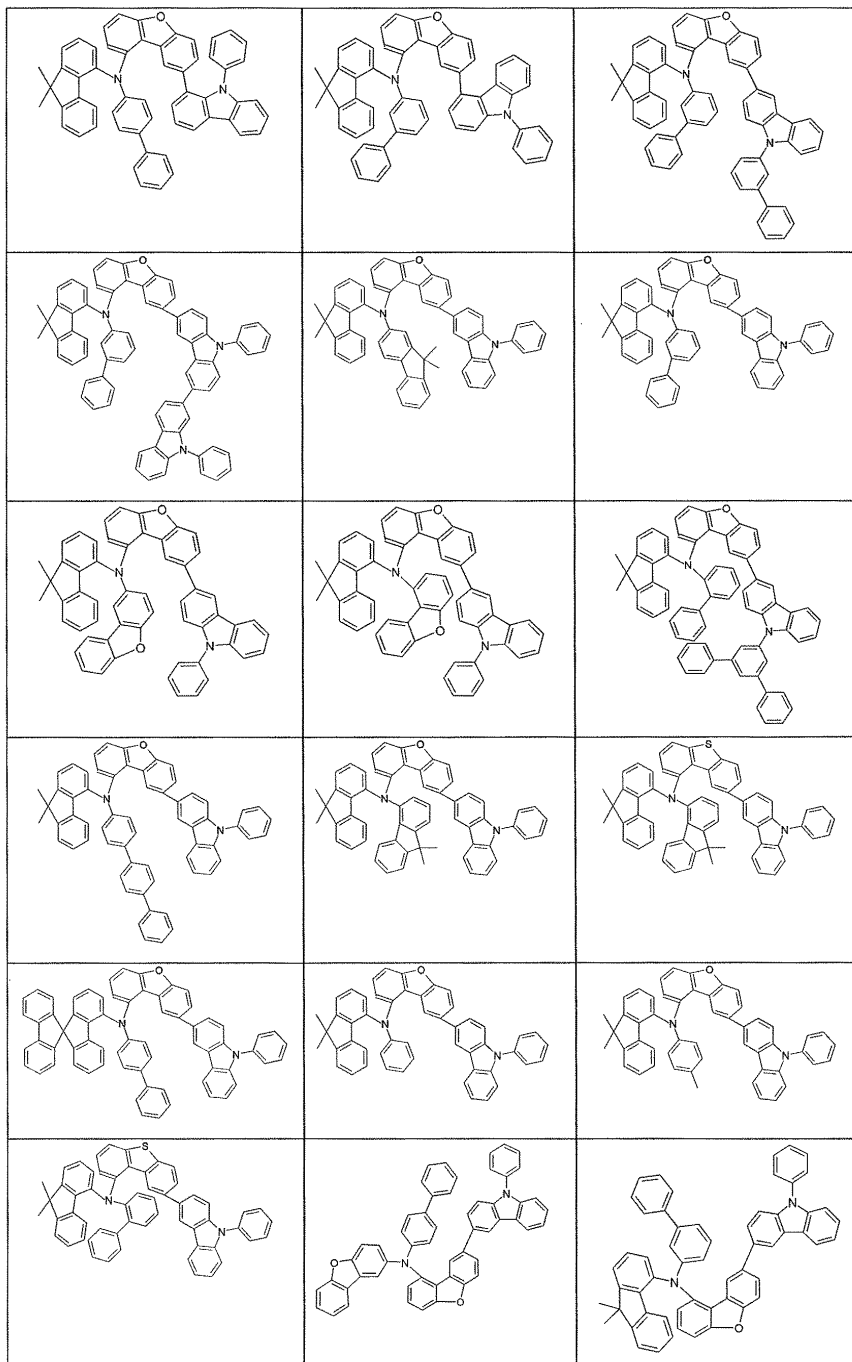
[0119]



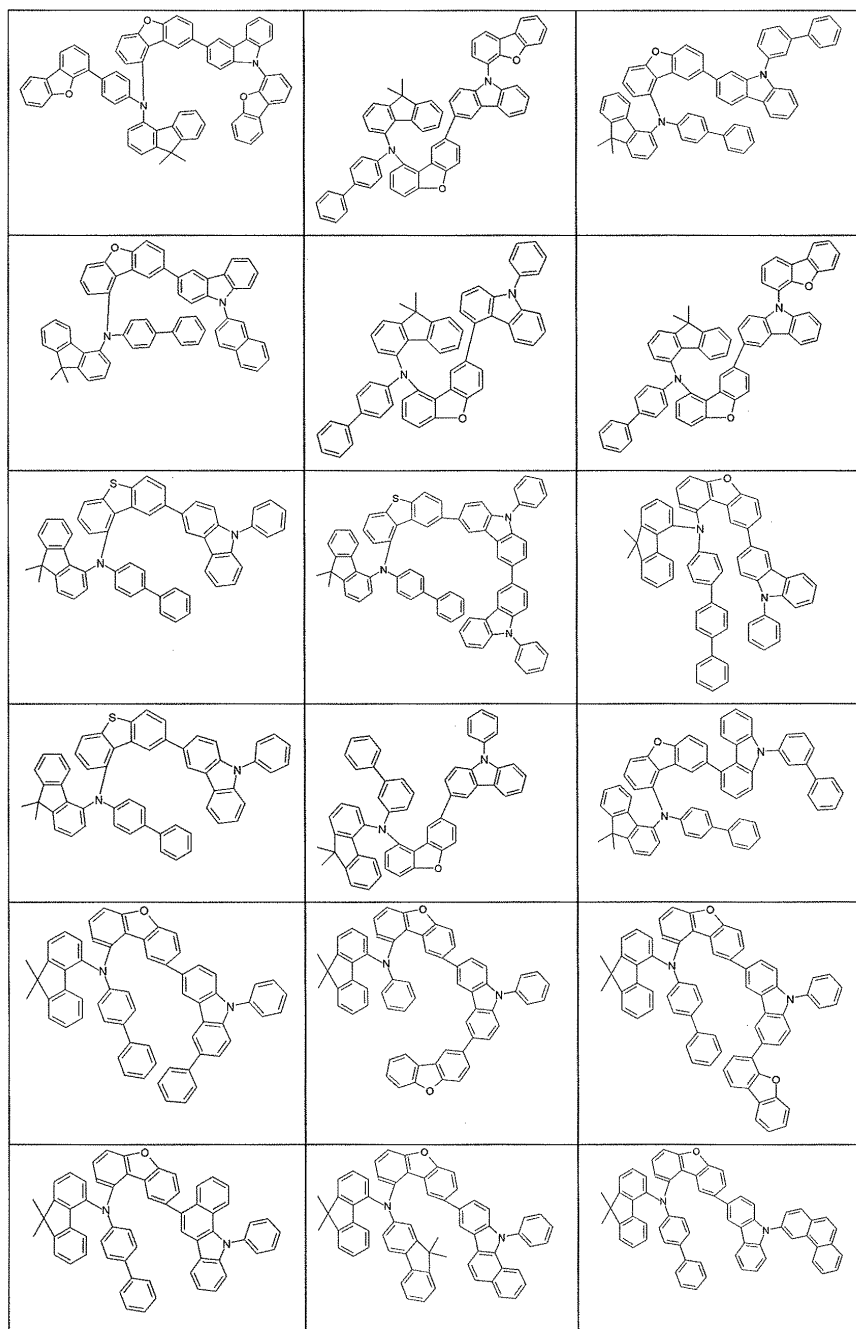
[0120]



[0121]

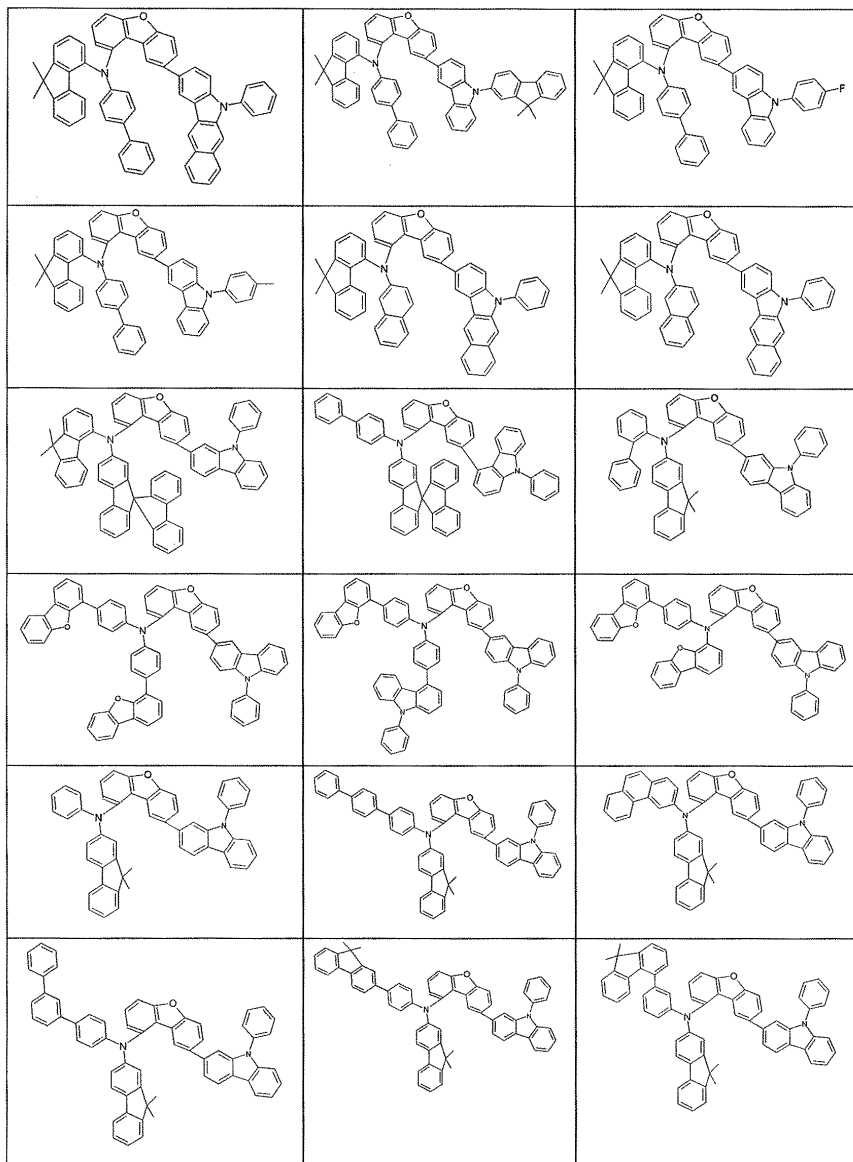


[0122]

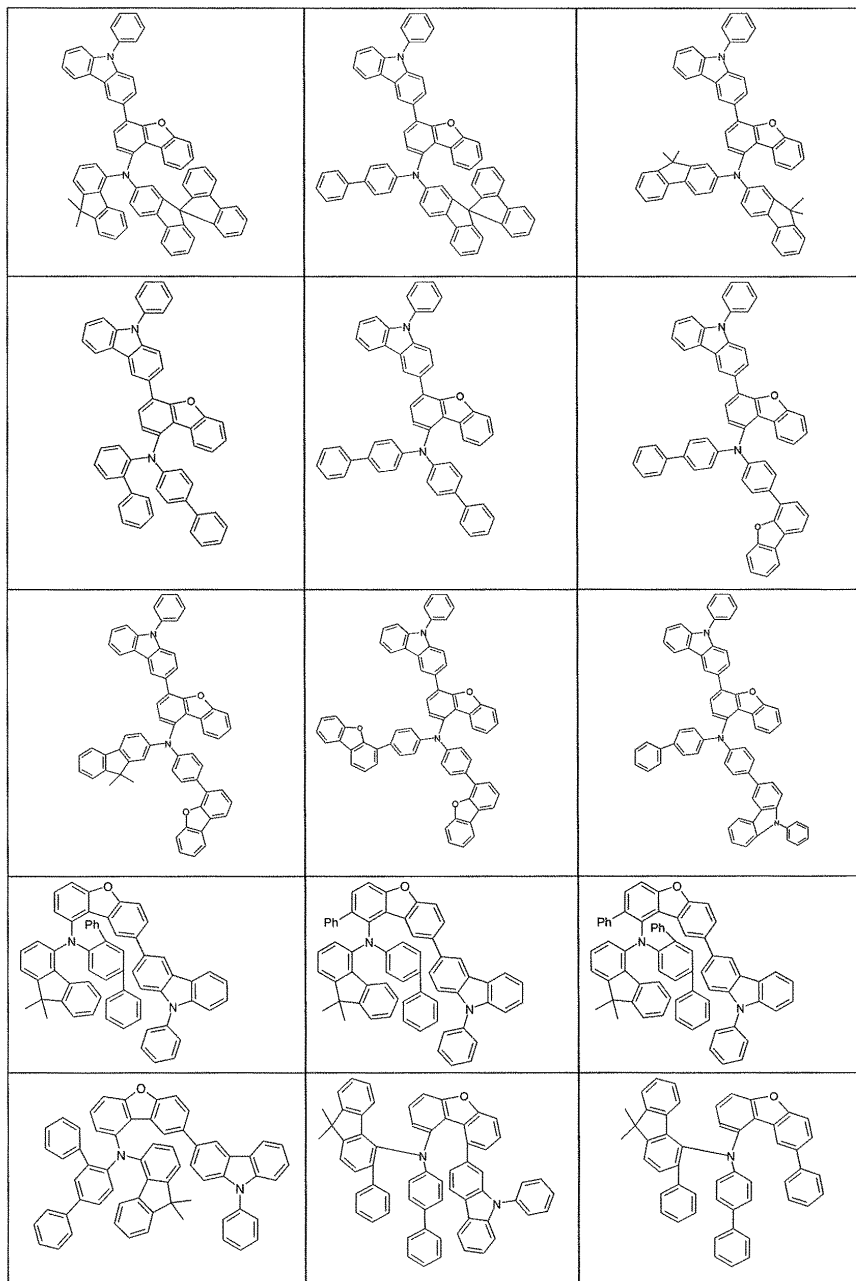


[0123]

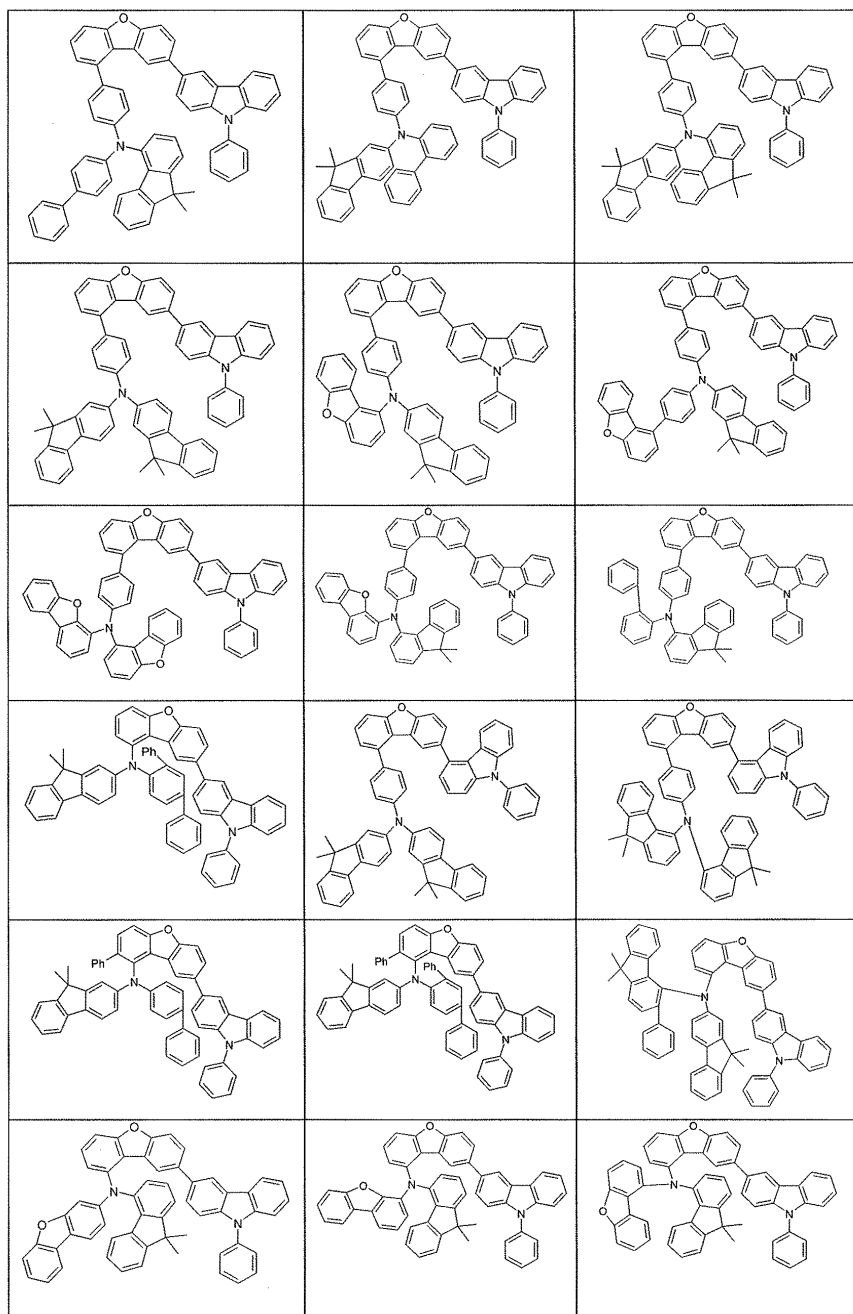




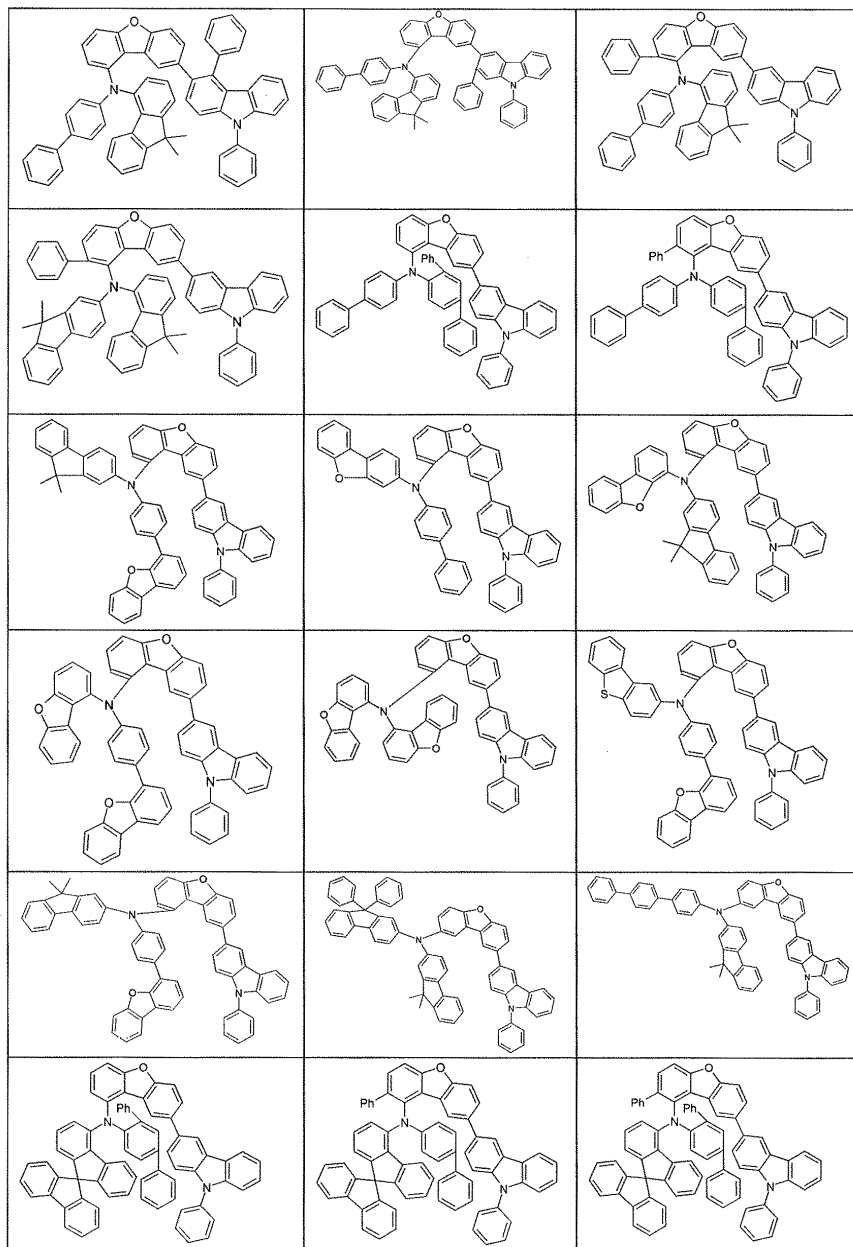
[0124]



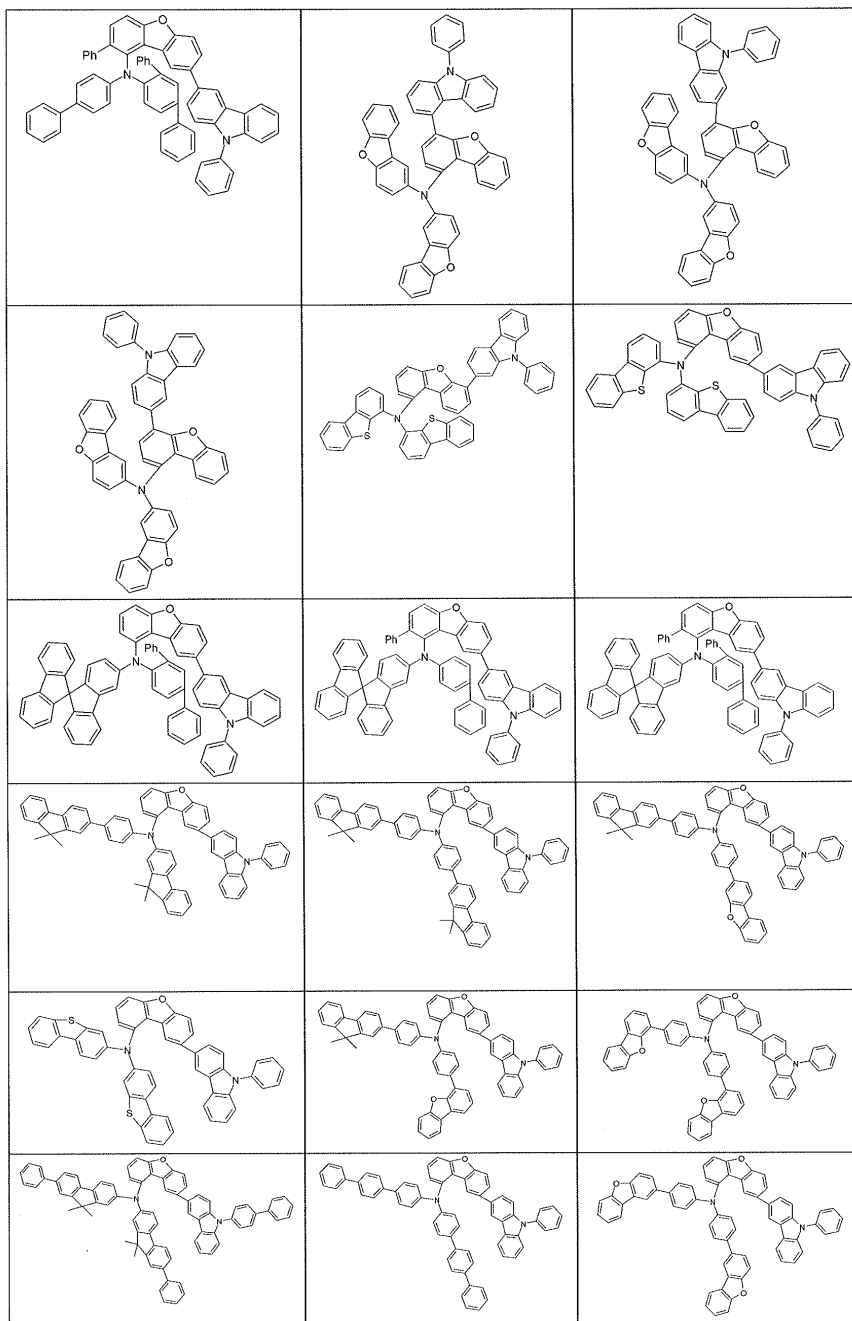
[0125]



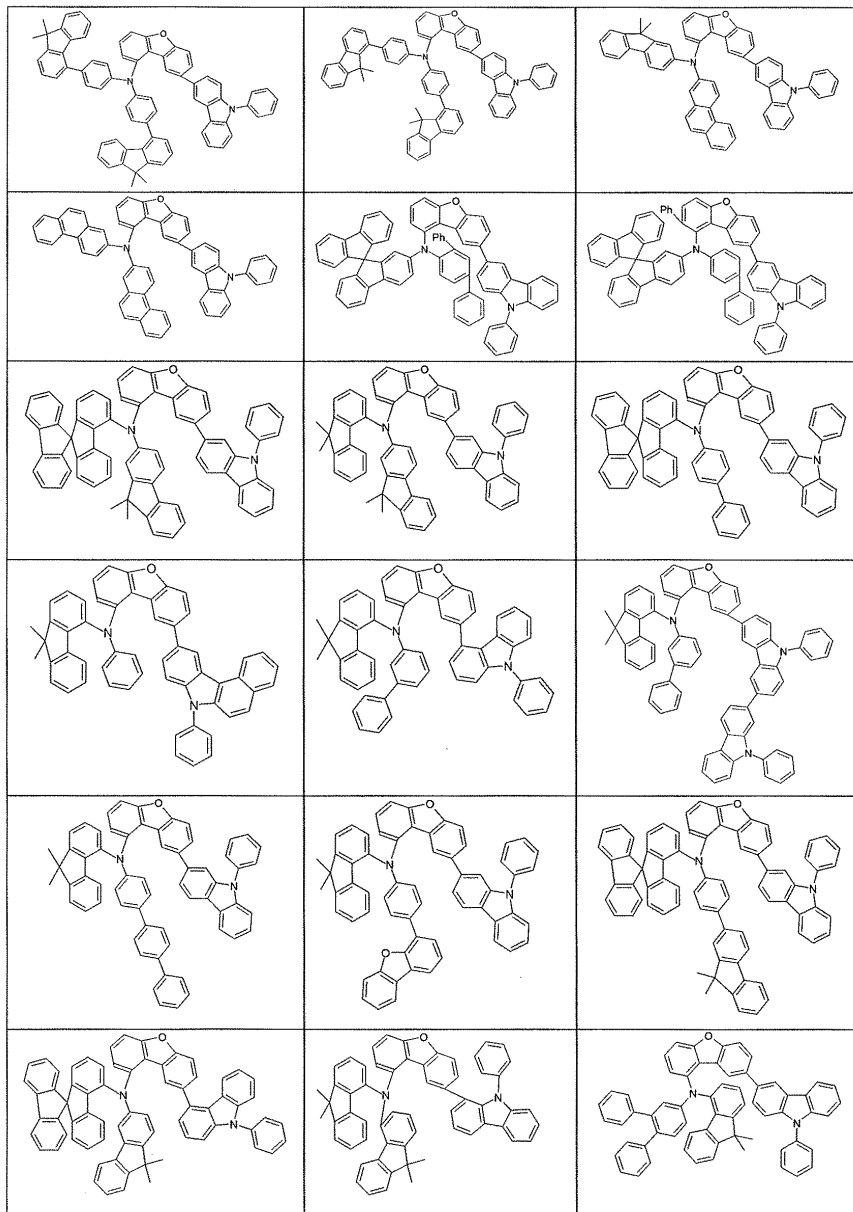
[0126]



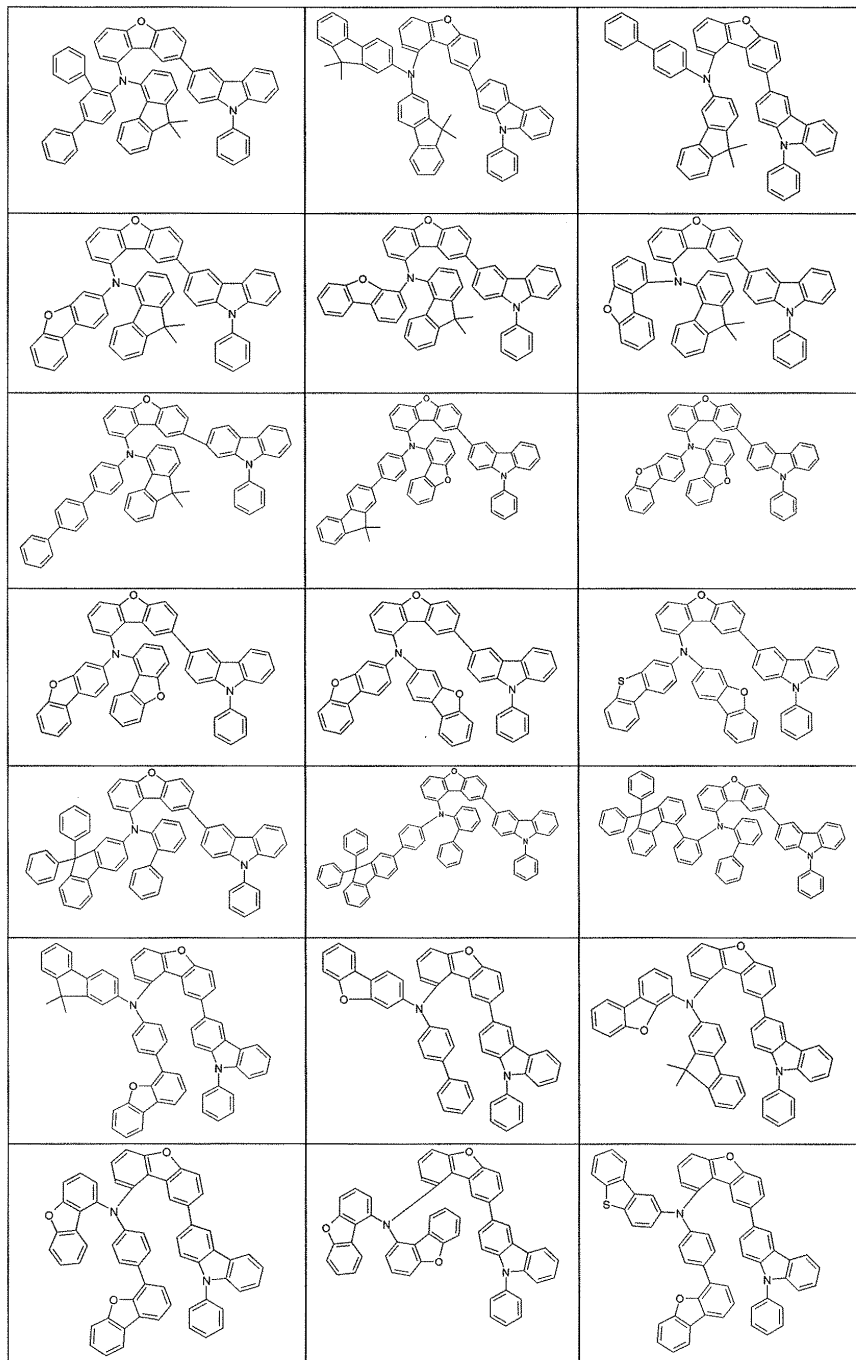
[0127]



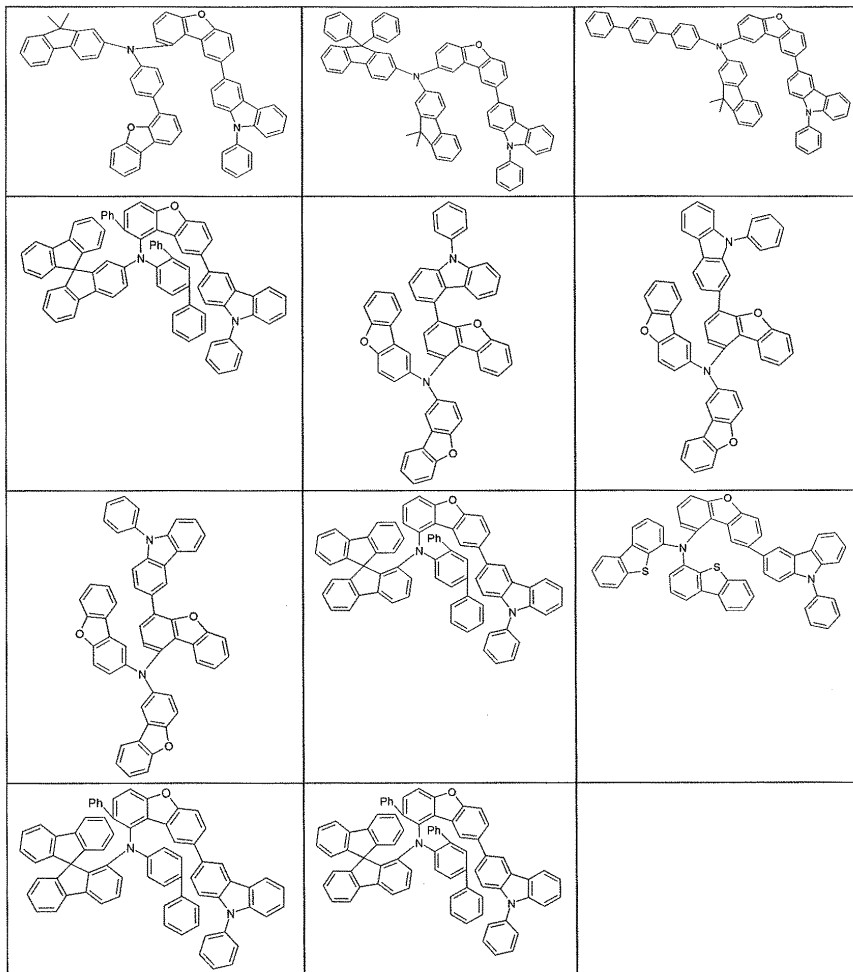
[0128]



[0129]



[0130]



[0131]

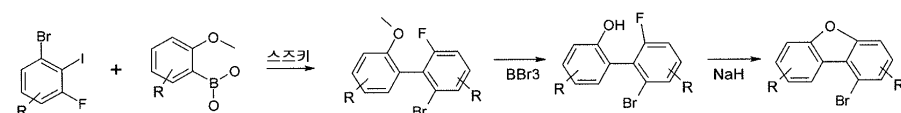
[0132]

본 발명의 화합물은 당업자에게 알려져 있는 합성 단계, 예를 들어 브롬화, 스즈키 커플링, 울만 커플링, 하르트위그-부흐발트 커플링 등에 의해 제조될 수 있다. 적합한 합성 방법은 일반적으로 하기 반응식 1 및 하기 반응식 2 에 보여진다:

[0133]

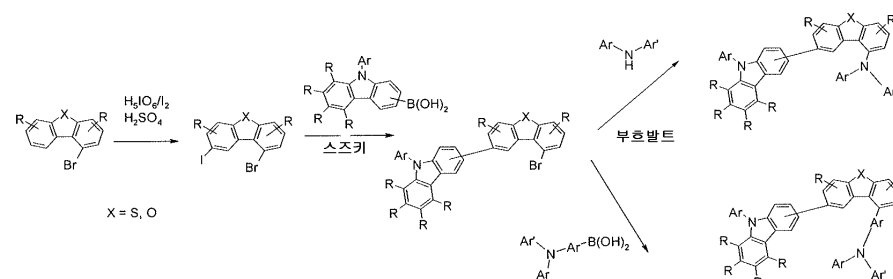
반응식 1

[0134]



[0135]

반응식 2



[0136]

[0137]

이들 반응식에서, R 은, 화학식 (1) 또는 (2) 에 따르면, R, R<sup>1</sup> 또는 R<sup>2</sup> 이고, Ar, Ar<sup>1</sup> 은 Ar 또는 Ar<sup>3</sup> 이다.

[0138]

예를 들어 스핀-코팅에 의해 또는 프린팅 방법에 의해 액체 상으로부터 본 발명의 화합물을 가공하기 위해서, 본 발명의 화합물의 제형이 요구된다. 이들 제형은, 예를 들어, 용액, 분산물 또는 에멀전일 수 있다. 이러한 목적을 위해, 둘 이상의 용매의 혼합물을 사용하는 것이 바람직할 수 있다. 적합한 바람직한



용매는, 예를 들어, 톨루엔, 아니솔, o-, m- 또는 p-자일렌, 메틸 벤조에이트, 메시틸렌, 테트라린, 베라트론, THF, 메틸-THF, THP, 플로로벤젠, 디옥산, 페녹시톨루엔, 특히 3-페녹시톨루엔, (-)-펜톤, 1,2,3,5-테트라메틸벤젠, 1,2,4,5-테트라메틸벤젠, 1-메틸나프탈렌, 2-메틸벤조티아졸, 2-페녹시에탄올, 2-피롤리딘온, 3-메틸아니솔, 4-메틸아니솔, 3,4-디메틸아니솔, 3,5-디메틸아니솔, 아세트페논, α-테르피네올, 벤조티아졸, 부틸 벤조에이트, 큐멘, 시클로헥산올, 시클로헥사논, 시클로헥실벤젠, 데칼린, 도데실벤젠, 에틸 벤조에이트, 인단, 메틸 벤조에이트, NMP, p-시멘, 페넨톨, 1,4-디이소프로필벤젠, 디벤질 에테르, 디에틸렌 글리콜 부틸 메틸 에테르, 트리에틸렌 글리콜 부틸 메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디부틸 에테르, 트리에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르, 트리프로필렌 글리콜 디메틸 에테르, 테트라에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 2-이소프로필나프탈렌, 펜틸벤젠, 헥실벤젠, 헵틸벤젠, 옥틸벤젠, 1,1-비스(3,4-디메틸페닐)에탄, 헥사메틸인단 또는 이들 용매의 혼합물이다.

- [0139] 본 발명은 그러므로 본 발명의 화합물 및 적어도 하나의 추가의 화합물을 포함하는 제형을 추가로 제공한다. 추가의 화합물은, 예를 들어, 용매, 특히 위에서 언급된 용매 중 하나 또는 이들 용매의 혼합물일 수 있다. 추가의 화합물은 대안적으로 또한 전자 소자에서 사용되는 적어도 하나의 추가의 유기 또는 무기 화합물, 예를 들어 방사 화합물, 특히 인광 도판트, 및/또는 추가의 매트릭스 재료일 수 있다. 적합한 방사 화합물 및 추가의 매트릭스 재료는 유기 전계발광 소자와 관련하여 위에서 열거되어 있다. 이러한 추가의 화합물은 또한 중합체성일 수 있다.
- [0140] 본 발명의 화합물 및 혼합물은 전자 소자에서 사용하기에 적합하다. 전자 소자는 적어도 하나의 유기 화합물을 함유하는 적어도 하나의 층을 함유하는 소자를 의미하는 것으로 이해된다. 이러한 부품은 또한 무기 재료 또는 무기 재료로 전적으로 형성된 층을 포함할 수 있다.
- [0141] 본 발명은 그러므로 추가로 전자 소자에 있어서의, 특히 유기 전계발광 소자에 있어서의 본 발명의 화합물 및 혼합물의 용도를 제공한다.
- [0142] 본 발명은 또한 추가로 위에서 상술된 본 발명의 화합물 또는 혼합물 중 적어도 하나를 포함하는 전자 소자를 제공한다. 이 경우에, 위에서 화합물에 관해 상술된 선호도는 또한 전자 소자에 적용된다.
- [0143] 전자 소자는 바람직하게는 유기 전계발광 소자 (OLED, PLED), 유기 집적 회로 (O-IC), 유기 전계-효과 트랜지스터 (O-FET), 유기 박막 트랜지스터 (O-TFT), 유기 발광 트랜지스터 (O-LET), 유기 태양 전지 (O-SC), 유기 염료 감응형 태양 전지, 유기 광학 검출기, 유기 광수용기, 유기 전계-켄치 소자 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 유기 플라스몬 방사 소자, 바람직하게는 유기 전계발광 소자 (OLED, PLED), 특히 인광 OLED 로 이루어지는 군으로부터 선택된다.
- [0144] 유기 전계발광 소자는 캐소드, 애노드 및 적어도 하나의 방사 층을 포함한다. 이들 층 외에, 그것은 또한 추가의 층, 예를 들어 각 경우에 하나 이상의 정공 주입 층, 정공 수송 층, 정공 차단자 층, 전자 수송 층, 전자 주입 층, 여기자 차단자 층, 전자 차단자 층 및/또는 전하 생성 층을 포함할 수 있다. 또한 여기자-차단 기능을 갖는 중간층이, 예를 들어, 두 개의 방사 층 사이에 도입되는 것이 가능하다. 그러나, 이들 층 모두가 반드시 존재할 필요가 있는 것은 아니라는 점에 유념해야 한다. 이 경우에, 유기 전계발광 소자가 방사 층을 함유하는 것, 또는 그것이 복수의 방사 층을 함유하는 것이 가능하다. 복수의 방사 층이 존재하는 경우에, 이들은 바람직하게는 전체적으로 380 nm 내지 750 nm 의 여러 방사 최대를 가져서, 전체적 결과는 백색 방사이다; 다시 말하면, 형광 또는 인광을 발할 수 있는 다양한 방사 화합물이 방사 층에서 사용된다. 특히 바람직한 것은 세 개의 방사 층을 갖는 시스템이며, 여기에서 세 개의 층은 청색, 녹색 및 오렌지색 또는 적색 방사를 나타낸다. 또한 적합한 것은 탠덤 OLED 이다. 이들은 형광 또는 인광 방사 층 또는 형광 및 인광 방사 층이 서로와 조합되어 있는 하이브리드 시스템일 수 있다. 백색-방사 전계발광 소자는, 예를 들어, 조명 응용물에서, 뿐만 아니라 색 필터와의 조합으로 풀 컬러 디스플레이에서 사용될 수 있다.
- [0145] 위에서 상술된 실시양태에 따른 본 발명의 화합물은 상이한 층에서, 정확한 구조에 따라, 사용될 수 있다. 형광 또는 인광 방사체용 또는 TADF (열 활성화되는 지연된 형광) 을 발하는 방사체용, 특히 인광 방사체용 매트릭스 재료로서, 및/또는 전자 수송 층에 및/또는 전자-차단 또는 여기자-차단 층 및/또는 정공 수송 층에 및/또는 정공 주입 층에, 정확한 치환에 따라 화학식 (1) 또는 화학식 (2) 의 또는 바람직한 실시양태에 따른 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 이러한 맥락에서, 위에서 상술된 바람직한 실시양태는 또한 유기 전자 소자에 있어서의 재료의 용도에 적용된다.
- [0146] 본 발명의 바람직한 실시양태에서, 화학식 (1) 또는 화학식 (2) 의 또는 바람직한 실시양태에 따른 화합물은 방

사 층에서, 형광 또는 인광 화합물용, 특히 인광 화합물용 매트릭스 재료로서 사용된다. 이 경우에, 유기 전계발광 소자는 방사 층을 함유할 수 있거나, 또는 그것은 복수의 방사 층을 함유할 수 있으며, 여기에서 적어도 하나의 방사 층은 매트릭스 재료로서 적어도 하나의 본 발명의 화합물을 함유한다.

[0147] 화학식 (1) 또는 화학식 (2) 의 또는 바람직한 실시양태에 따른 화합물이 방사 화합물용 매트릭스 재료로서 방사 층에서 사용될 때, 그것은 바람직하게는 하나 이상의 인광 재료 (삼중항 방사체) 와의 조합으로 사용된다.

인광은 본 발명의 맥락에서 스핀 다중도 > 1 를 갖는 여기된 상태로부터의, 특히 여기된 삼중항 상태로부터의 발광을 의미하는 것으로 이해된다. 이 출원의 맥락에서, 모든 발광 전이 금속 착물 및 발광 란탄계열원소 착물, 특히 모든 이리듐, 백금 및 구리 착물이 인광 화합물로서 여겨질 것이다.

[0148] 화학식 (1) 또는 화학식 (2) 의 또는 바람직한 실시양태에 따른 화합물 및 방사 화합물의 혼합물은 방사체 및 매트릭스 재료의 전체적 혼합물에 기초하여 99 부피% 내지 1 부피%, 바람직하게는 98 부피% 내지 10 부피%, 더욱 바람직하게는 97 부피% 내지 60 부피%, 특히 95 부피% 내지 80 부피% 의 화학식 (1) 또는 화학식 (2) 의 또는 바람직한 실시양태에 따른 화합물을 함유한다. 따라서, 혼합물은 방사체 및 매트릭스 재료의 전체적 혼합물에 기초하여 1 부피% 내지 99 부피%, 바람직하게는 2 부피% 내지 90 부피%, 더욱 바람직하게는 3 부피% 내지 40 부피%, 특히 5 부피% 내지 20 부피% 의 방사체를 함유한다. 화합물이 용액으로부터 가공되는 경우에, 위에 명시된 부피% 의 양 보다는 상응하는 중량% 의 양을 사용하는 것이 바람직하다.

[0149] 적합한 인광 화합물 (= 삼중항 방사체) 은 특히, 적합하게 여기될 때, 바람직하게는 가시 영역에서, 빛을 방사하고, 또한 20 초과, 바람직하게는 38 초과 및 84 미만, 더욱 바람직하게는 56 초과 및 80 미만의 원자 번호의 적어도 하나의 원자, 특히 이러한 원자 번호를 갖는 금속을 함유하는 화합물이다. 사용되는 바람직한 인광 방사체는 구리, 몰리브덴, 텅스텐, 레늄, 루테튬, 오스뮴, 로듐, 이리듐, 팔라듐, 백금, 은, 금 또는 유로퓸을 함유하는 화합물, 특히 이리듐 또는 백금을 함유하는 화합물이다. 본 발명의 맥락에서, 위에서 언급된 금속을 함유하는 모든 발광 화합물은 인광 화합물로 여겨진다.

[0150] 위에 기재된 방사체의 예는 출원 WO 00/70655, WO 2001/41512, WO 2002/02714, WO 2002/15645, EP 1191613, EP 1191612, EP 1191614, WO 05/033244, WO 05/019373, US 2005/0258742, WO 2009/146770, WO 2010/015307, WO 2010/031485, WO 2010/054731, WO 2010/054728, WO 2010/086089, WO 2010/099852, WO 2010/102709, WO 2011/032626, WO 2011/066898, WO 2011/157339, WO 2012/007086, WO 2014/008982, WO 2014/023377, WO 2014/094961, WO 2014/094960, WO 2015/036074, WO 2015/104045, WO 2015/117718, WO 2016/015815 및 WO 2016/124304 에서 찾을 수 있다. 일반적으로, 선행 기술에 따르면 유기 전계발광 분야의 당업자에게 알려져 있는 인광 OLED 에 사용되는 모든 인광 착물이 적합하고, 당업자는 발명의 재능을 발휘하지 않으면서 추가의 인광 착물을 사용할 수 있을 것이다.

[0151] 본 발명의 추가의 바람직한 실시양태는 추가의 매트릭스 재료와의 조합으로의 인광 방사체용 매트릭스 재료로서의 화학식 (1) 또는 화학식 (2) 의 또는 바람직한 실시양태에 따른 화합물의 용도이다. 본 발명의 바람직한 실시양태에서, 추가의 매트릭스 재료는 정공-수송 화합물이다. 본 발명의 추가의 바람직한 실시양태에서, 추가의 매트릭스 재료는 전자-수송 화합물이다. 또 추가의 바람직한 실시양태에서, 추가의 매트릭스 재료는 층에서의 정공 및 전자 수송에서, 한다 하더라도, 상당한 정도로 관여되지 않는 큰 밴드 갭을 갖는 화합물이다.

[0152] 화학식 (1) 또는 화학식 (2) 또는 바람직한 실시양태에 따른 화합물과의 조합으로 사용될 수 있는 적합한 매트릭스 재료는 방향족 케톤, 방향족 포스핀 옥시드 또는 방향족 술폰옥시드 또는 술폰 (예를 들어 WO 2004/013080, WO 2004/093207, WO 2006/005627 또는 WO 2010/006680 에 따름), 트리아릴아민, 특히 모노아민 (예를 들어 WO 2014/015935 에 따름), 카르바졸 유도체, 예를 들어 CBP (N,N-비스카르바졸릴바이페닐) 또는 카르바졸 유도체 (WO 2005/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527 또는 WO 2008/086851 에 공개됨), 인돌로카르바졸 유도체 (예를 들어 WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따름), 인테노카르바졸 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), 이극성 매트릭스 재료 (예를 들어 WO 2007/137725 에 따름), 실란 (예를 들어 WO 2005/111172 에 따름), 아자보롤 또는 봉산 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 2009/062578 에 따름), 디아자실롤 또는 테트라아자실롤 유도체 (예를 들어 WO 2010/054729 에 따름), 디아자포스폴 유도체 (예를 들어 WO 2010/054730 에 따름), 가교된 카르바졸 유도체 (예를 들어 US 2009/0136779, WO 2010/050778, WO 2011/042107, WO 2011/088877 또는 WO 2012/143080 에 따름), 트리페닐렌 유도체 (예를 들어 WO 2012/048781 에 따름), 락탐 (예를 들어 WO 2011/116865, WO 2011/137951 또는 WO

2013/064206 에 따름), 또는 4-스피로카르바졸 유도체 (예를 들어 WO 2014/094963 또는 WO 2015/192939 에 따름) 이다. 실제의 방사체보다 더 짧은 파장에서 방사하는 추가의 인광 방사체가 혼합물에 코-호스트로서 존재하는 것이 또한 가능하다.

[0153] 바람직한 코-호스트 재료는 트리아릴아민 유도체, 특히 모노아민, 인데노카르바졸 유도체, 4-스피로카르바졸 유도체, 락탐 및 카르바졸 유도체이다.

[0154] 본 발명의 추가의 실시양태에서, 본 발명의 유기 전계발광 소자는 임의의 별개의 정공 주입 층 및/또는 정공 수송 층 및/또는 정공 차단자 층 및/또는 전자 수송 층을 함유하지 않으며, 이는 방사 층이 정공 주입 층 또는 애노드에 바로 인접해 있고/거나, 방사 층이 전자 수송 층 또는 전자 주입 층 또는 캐소드에 바로 인접해 있다는 것을 의미하며, 이는, 예를 들어, WO 2005/053051 에 기재되어 있다. 방사 층에 바로 인접해 있는 정공 수송 또는 정공 주입 재료로서 방사 층에서의 금속 착물과 동일 또는 유사한 금속 착물을 사용하는 것이 부가적으로 가능하며, 이는, 예를 들어, WO 2009/030981 에 기재되어 있다.

[0155] 게다가, 본 발명의 화합물을 정공 수송 또는 전자 차단자 층에 사용하는 것이 가능하다.

[0156] 본 발명의 유기 전계발광 소자의 추가의 층에, 선행 기술에 따라 전형적으로 사용되는 임의의 재료를 사용하는 것이 가능하다. 당업자는 그러므로, 발명의 재능을 발휘하지 않으면서, 화학식 (1) 또는 화학식 (2) 의 또는 바람직한 실시양태에 따른 본 발명의 화합물과의 조합으로 유기 전계발광 소자에 관해 알려진 임의의 재료를 사용할 수 있다.

[0157] 부가적으로 바람직한 것은 하나 이상의 층이 승화 공정에 의해 코팅되어 있는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 소자이다. 이 경우에, 재료는  $10^{-5}$  mbar 미만, 바람직하게는  $10^{-6}$  mbar 미만의 초기 압력에서 진공 승화 시스템에서 증착에 의해 적용된다. 또한 초기 압력이 더 낮거나 더 높은, 예를 들어  $10^{-7}$  mbar 미만인 것이 가능하다.

[0158] 하나 이상의 층이 OVPD (유기 증기 상 침적) 방법에 의해 또는 운반 기체 승화의 도움으로 코팅되는 것을 특징으로 하는, 유기 전계발광 소자가 또한 바람직하다. 이 경우에, 재료는  $10^{-5}$  mbar 내지 1 bar 의 압력에서 적용된다. 이러한 방법의 특수한 경우는 재료가 노즐에 의해 직접 적용되고 그에 따라 구조화되는 OVJP (유기 증기 제트 프린팅) 방법이다.

[0159] 하나 이상의 층이 용액으로부터, 예를 들어 스핀-코팅에 의해, 또는 임의의 프린팅 방법, 예를 들어 잉크젯 프린팅, LITI (광 유도 열 이미징, 열 전자 프린팅), 스크린 프린팅, 플렉소그래픽 프린팅, 오프셋 프린팅 또는 노즐 프린팅에 의해 생성되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 소자가 부가적으로 바람직하다. 이 목적을 위해, 예를 들어, 적합한 치환을 통해, 수득되는 가용성 화합물이 필요하다.

[0160] 본 발명의 화합물은, 특히 관습적으로 사용되는 디아민과 비교할 때, 특히 용액에서, 개선된 산화 안정성을 갖는다. 이는 특히 프린팅 공정에서 중요하다. 본 발명의 화합물은 또한 높은 열 안정성이 특색이고, 따라서 고진공 하에서 분해 없이 증발될 수 있다. 열 안정성은 또한 화합물의 가동 수명을 증가시킨다.

[0161] 게다가, 예를 들어, 하나 이상의 층이 용액으로부터 적용되고 하나 이상의 추가의 층이 증착에 의해 적용되는, 하이브리드 방법이 가능하다. 예를 들어, 방사 층을 용액으로부터 적용하고 전자 수송 층을 증착에 의해 적용하는 것이 가능하다.

[0162] 이들 방법은 일반적으로 당업자에게 알려져 있고, 당업자에 의해 발명의 재능을 발휘하지 않으면서 본 발명의 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자에 적용될 수 있다.

[0163] 본 발명의 화합물은 일반적으로 유기 전계발광 소자에서 사용시에 매우 양호한 특성을 갖는다. 특히 본 발명의 화합물을 유기 전계발광 소자에서 사용하는 경우에, 수명은 선행 기술에 따른 유사한 화합물과 비교할 때 유의하게 더 양호하다. 동시에, 유기 전계발광 소자의 추가의 특성, 특히 효율 및 전압은, 또한 더 양호하거나 또는 적어도 비슷하다.

[0164] 본 발명은 이제 뒤따르는 실시예에 의해 상세히 설명되며, 본 발명을 실시예에 의해 제한하려는 의도는 전혀 없다.

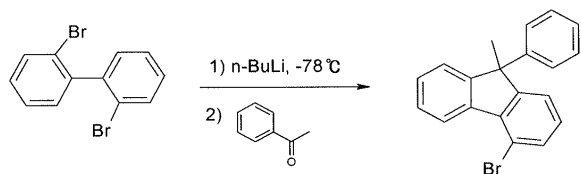
# [0165] 실시예

[0166] 뒤따르는 합성은, 다르게 언급되지 않으면, 건조된 용매에서 보호성 기체 분위기 하에 수행된다. 용매 및

시약은, 예를 들어, Sigma-ALDRICH 또는 ABCR로부터 구입할 수 있다. 문헌으로부터 알려진 화합물에 관해, 상응하는 CAS 번호가 또한 각 경우에 보고된다.

[0167] 합성예

[0168] a) 4-브로모-9-메틸-9-페닐-9H-플루오렌



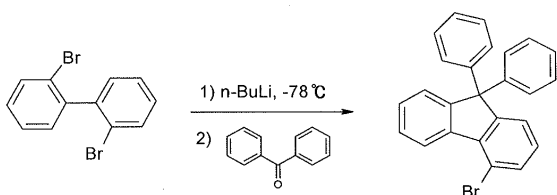
[0169]

[0170]

30 g (94 mmol)의 2,2'-디브로모바이페닐을 베이크트-아웃 플라스크에서 200 ml의 건조된 THF에 용해시킨다. 반응 혼합물을 -78°C로 냉각시킨다. 이 온도에서, 헥산 중 n-부틸리튬 (94 mmol)의 2.5 M 용액 37.7 ml을 서서히 적가한다 (약 1 h에 걸쳐). 혼합물을 -70°C에서 추가의 1 h 동안 교반한다. 후속적으로, 11.1 ml의 아세트페논 (94 mmol)을 100 ml의 THF에 용해시키고, -70°C에서 적가한다. 첨가를 종료한 후에, 반응 혼합물을 점진적으로 실온으로 데우고, NH<sub>4</sub>Cl로 킬링하고, 그 후 회전 증발기에서 농축시킨다. 300 ml의 아세트산을 농축된 용액에 조심스럽게 첨가하고, 그 후 50 ml의 발연 HCl을 첨가한다. 혼합물을 75°C로 6 h 동안 가열한다. 이 시간 동안, 백색 고체가 침전되어 나온다. 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 침전된 고체를 석션으로 여과해내고, 메탄올로 세정한다. 잔류물을 40°C에서 감압 하에 건조시킨다. 수율: 25.3 g (75 mmol) (이론의 80%).

[0171]

b) 4-브로모-9,9-디페닐-9H-플루오렌



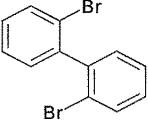

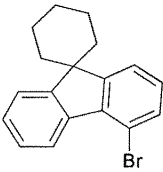
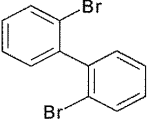

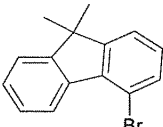
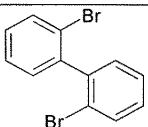
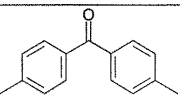
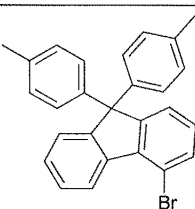
[0172]

[0173]

37 g (152 mmol)의 2,2'-디브로모바이페닐을 베이크트-아웃 플라스크에서 300 ml의 건조된 THF에 용해시킨다. 반응 혼합물을 -78°C로 냉각시킨다. 이 온도에서, 헥산 중 n-부틸리튬 (119 mmol)의 15% 용액 75 ml을 서서히 적가한다 (약 1 h에 걸쳐). 혼합물을 -70°C에서 추가의 1 h 동안 교반한다. 후속적으로, 21.8 g의 벤조페논 (119 mmol)을 100 ml의 THF에 용해시키고 -70°C에서 적가한다. 첨가를 종료한 후에, 반응 혼합물을 점진적으로 실온으로 데우고, NH<sub>4</sub>Cl로 킬링하고, 그 후 회전 증발기에서 농축시킨다. 510 ml의 아세트산을 농축된 용액에 조심스럽게 첨가하고, 그 후 100 ml의 발연 HCl을 첨가한다. 혼합물을 75°C로 4 h 동안 가열한다. 이 시간 동안, 백색 고체가 침전되어 나온다. 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 침전된 고체를 석션으로 여과해내고, 메탄올로 세정한다. 잔류물을 40°C에서 감압 하에 건조시킨다. 수율: 33.2 g (83 mmol) (이론의 70%).

[0174]

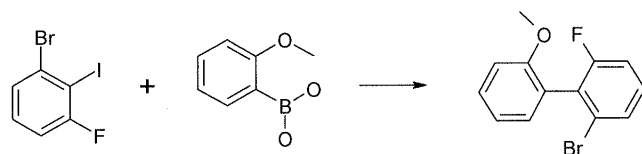
하기 화합물을 유사한 방식으로 제조한다:

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

[0175]

[0176]

c) 6-브로모-2-플루오로-2'-메톡시바이페닐



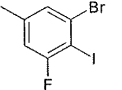
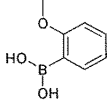
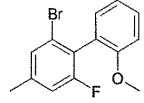
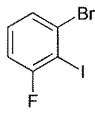
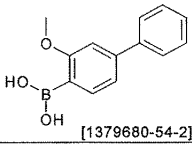
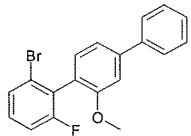
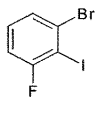
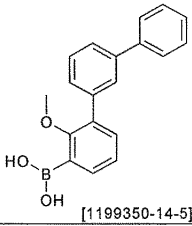
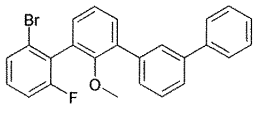
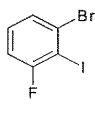
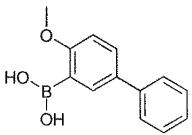
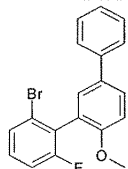
[0177]

[0178]

200 g (664 mmol)의 1-브로모-3-플루오로-2-아이오도벤젠, 101 g (664 mmol)의 2-메톡시페닐보론산 및 137.5 g (997 mmol)의 소듐 테트라보레이트를 1000 ml의 THF 및 600 ml의 물에 용해시키고, 탈기한다. 9.3 g (13.3 mmol)의 비스(트리페닐포스핀)팔라듐(II) 클로라이드 및 1 g (20 mmol)의 히드라지늄 히드록시드를 첨가한다. 반응 혼합물을 그 후 보호성 기체 분위기 하에 70℃에서 48 h 동안 교반한다. 냉각된 용액에 톨루엔을 보충하고, 물로 반복 세정하고, 건조시키고, 농축시킨다. 생성물을 칼럼 크로마토그래피를 통해 실리카 겔 상에서 톨루엔/헵탄 (1:2)으로 정제한다. 수율: 155 g (553 mmol), 이론의 83%.

[0179]

하기 화합물을 유사한 방식으로 제조한다:

	반응물 1	반응물 2	생성물	수율
c1	 [1000576-09-9]			77%
c2		 [1379680-54-2]		74%
c3		 [1199350-14-5]		76%
c4		 [1114496-44-4]		71%

[0180]

[0181]

d) 6'-브로모-2'-플루오로바이페닐-2-올



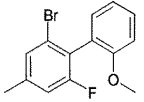
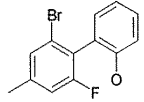
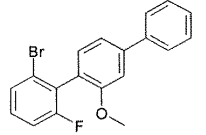
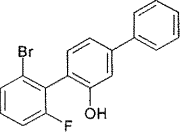
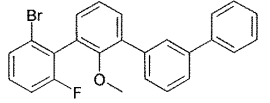
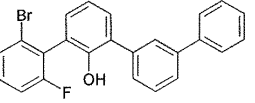
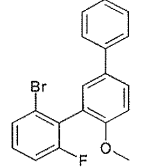
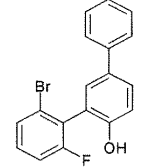
[0182]

[0183]

112 g (418 mmol) 의 6-브로모-2-플루오로-2'-메톡시바이페닐을 2 l 의 디클로로메탄에 용해시키고, 5℃ 로 냉각시킨다. 41.01 ml (431 mmol) 의 보론 트리브로마이드를 이 용액에 90 min 내에 적가하고, 혼합물의 교반을 밤새 지속한다. 혼합물을 후속적으로 물과 점진적으로 혼합하고, 유기 상을 물로 3 회 세정하고, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 위에서 건조시키고, 회전 증발에 의해 농축시키고, 크로마토그래피에 의해 정제한다. 수율: 104 g (397 mmol), 이론의 98%.



[0184] 하기 화합물을 유사한 방식으로 제조한다:

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

[0185]

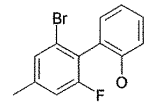
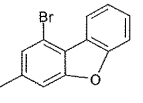
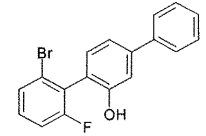
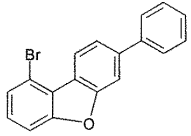
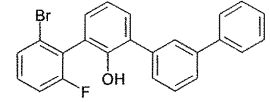
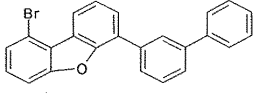
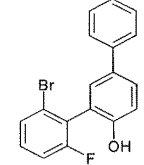
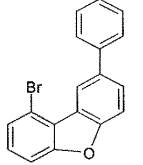
[0186] e) 1-브로모디벤조푸란



[0187]

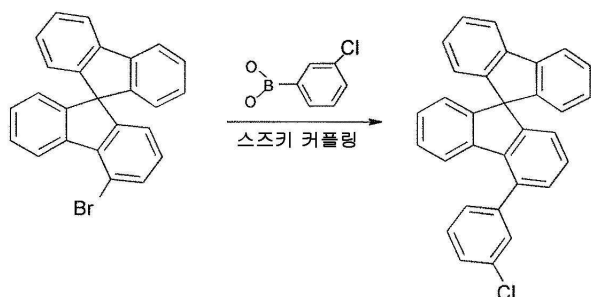
[0188] 111 g (416 mmol)의 6'-브로모-2'-플루오로바이페닐-2-올을 2 l의 DMF (최대 0.003% H<sub>2</sub>O) SeccoSolv®에 용해시키고, 5℃로 냉각시킨다. 20 g (449 mmol)의 소듐 하이드라이드 (파라핀 오일 중 60% 현탁액)을 이 용액에 일부분씩 첨가하고, 첨가가 종료되면 혼합물을 20 min 동안 교반하고, 그 후 혼합물을 100℃로 45 min 동안 가열한다. 냉각 후에, 500 ml의 에탄올을 혼합물에 점진적으로 첨가하고, 이것을 회전 증발에 의해 농축하고, 크로마토그래피에 의해 정제한다. 수율: 90 g (367 mmol), 이론의 88.5%.

[0189] 하기 화합물을 유사한 방식으로 제조한다:

	반응물 1	생성물	수율
e1			81%
e2			78%
e3			73%
e4			79%

[0190]

[0191] f) 4-(3-플로로페닐)-9,9-스피로바이플루오렌



[0192]

[0193] 21.7 g (139 mmol)의 4-플로로벤젠보론산, 50 g (126 mmol)의 4-브로모-9,9-스피로바이플루오렌 및 208 ml의 수성 2 M  $K_2CO_3$  용액 (416 mmol)을 300 ml의 테트라히드로푸란에 현탁시킨다. 이 현탁액에 1.45 g (1.26 mmol)의 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)을 첨가한다. 반응 혼합물을 환류 하에 16 h 동안 가열한다. 냉각 후에, 유기 상을 제거하고, 실리카 겔을 통해 여과하고, 300 ml의 물로 3 회 세정하고, 그 후 농축하여 건조시킨다. 미정제 생성물을 실리카 겔을 통해 헵탄/에틸 아세테이트 (20:1)로 여과한 후에, 48 g (89%)의 4-(3-플로로페닐)-9,9-스피로바이플루오렌이 수득된다.

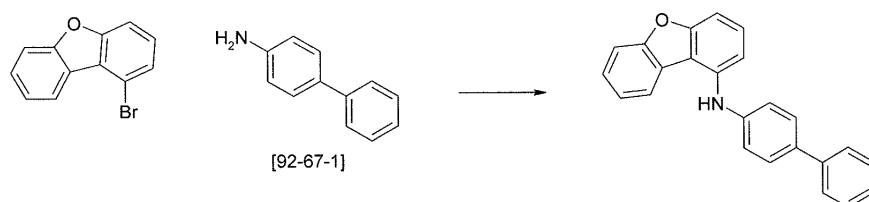
[0194]

하기 화합물을 유사한 방식으로 제조한다:

	반응물 1	반응물 2	생성물	수율
f3				88%
f2				85%
f3				89%

[0195]

[0196] g) 바이페닐-4-일디벤조푸란-1-일아민



[0197]

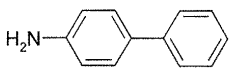
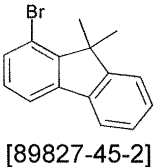
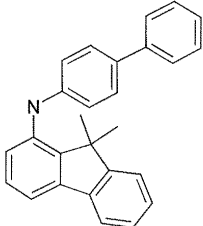
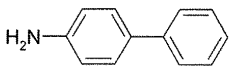

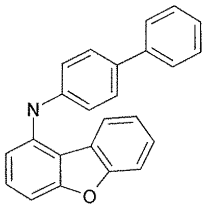
[0198] 30.0 g (177 mmol, 1.0 eq)의 4-아미노바이페닐을 600 ml의 순 (absolute) 톨루엔 중 43.7 g (177 mmol, 1.0 eq)의 1-브로모디벤조푸란 및 23.4 g (212 mmol, 1.20 eq)의 소듐 *tert*-펜톡사이드 [14593-46-5]와 함께 초기에 충전하고, 30 분 동안 탈기한다. 후속적으로, 398 mg (1.77 mmol, 0.01 eq)의 팔라듐(II) 아세테이트 [3375-31-3] 및 1.46 g (3.56 mmol, 0.02 eq)의 2-디시클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시바이페닐 SPHOS



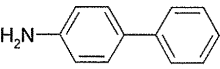
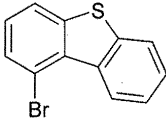
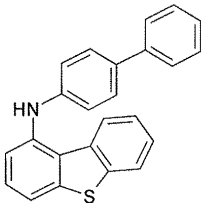
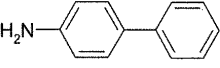
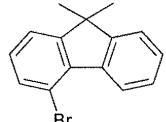
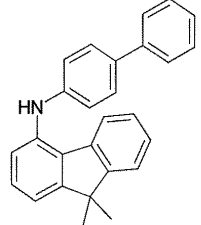
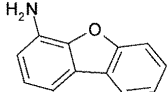
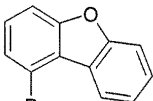
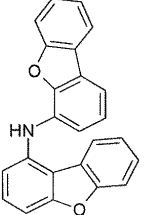
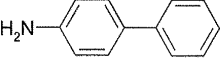
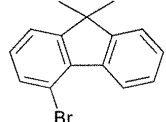
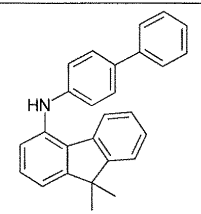
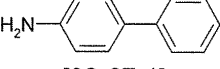
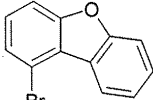
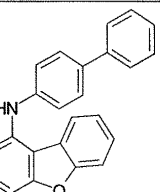
[657408-07-6] 을 첨가하고, 혼합물을 환류 하에 밤새 가열한다. 반응이 종료된 후에, 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 500 ml 의 물로 추출한다. 후속적으로, 수성 상을 톨루엔으로 3 회 세정하고, 조합된 유기 상을 소듐 설페이트 위에서 건조시키고, 용매를 회전 증발기에서 제거한다. 갈색 잔류물을 약 200 ml 의 톨루엔에 녹이고, 실리카 겔을 통해 여과한다. 추가의 정제를 위해, 톨루엔/헵탄으로부터의 재결정화를 수행한다. 수율: 44 g (133 mmol), 이론의 76%.

[0199]

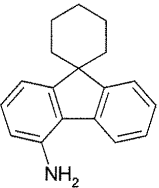
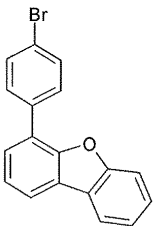
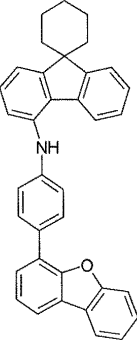
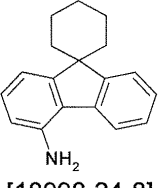

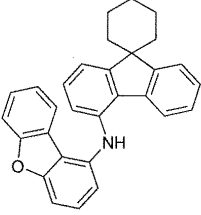
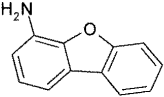
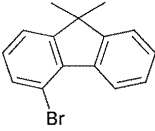
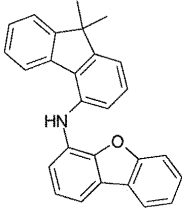
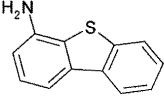
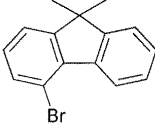
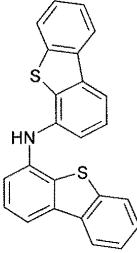
하기 화합물을 유사한 방식으로 제조한다:

	반응물 1	반응물 2	생성물 3	수율 [%]
g1	 [92-67-1]	 [89827-45-2]		45
g2	 [92-67-1]	 [50548-45-3]		61

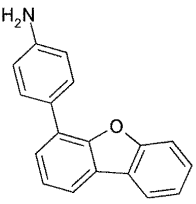
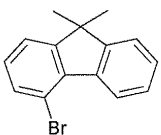
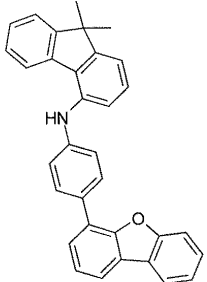
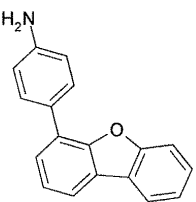
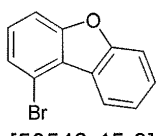
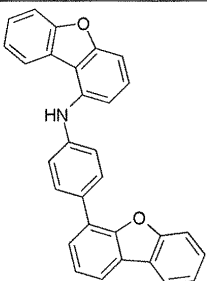
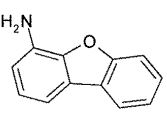
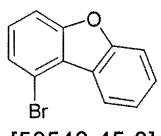
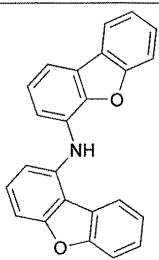
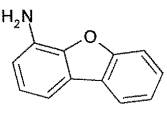
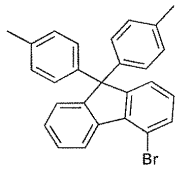
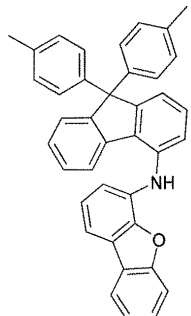
[0200]

g3	 [92-67-1]	 [65642-94-6 ]	 68
g4	 [92-67-1]	 [942615-32-9]	 34
g5	 [50548-43-1]	 [50548-45-3]	 73
g6	 [92-67-1]	 [942615-32-9]	 51
g7	 [92-67-1]	 [50548-45-3]	 65

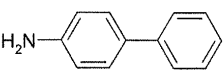
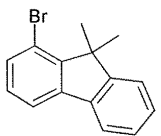
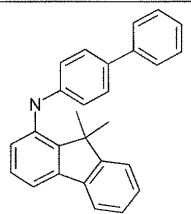
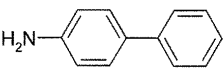
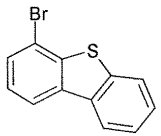
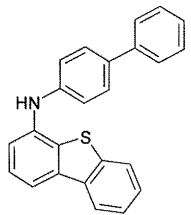
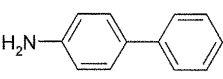
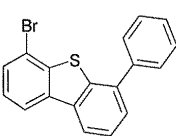
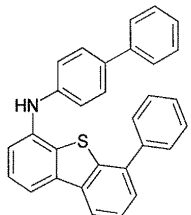
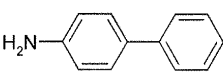
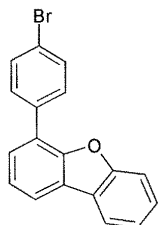
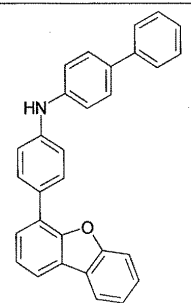
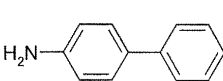
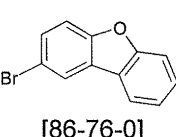
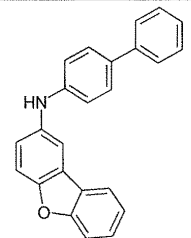
[0201]

g8	 [18998-24-8]	 [1225053-54-2]	 62
g9	 [18998-24-8]	 [50548-45-3]	 43
g10	 [50548-43-1]	 [942615-32-9]	 34
g11	 [72433-66-0]	 [942615-32-9]	 55

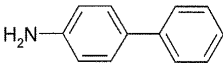
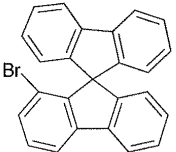
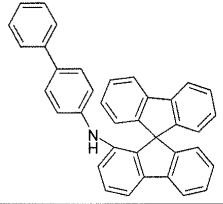
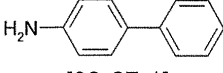
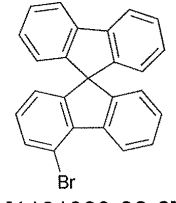
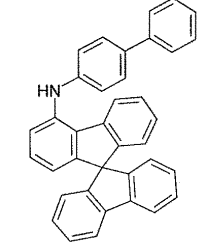
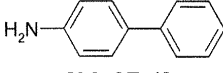
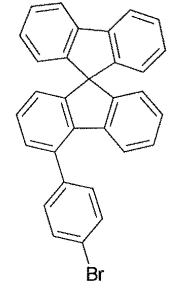
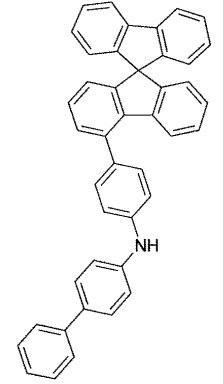
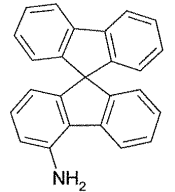
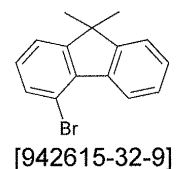
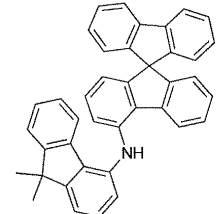
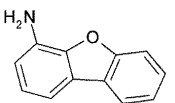
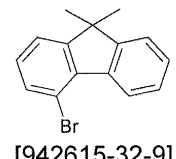
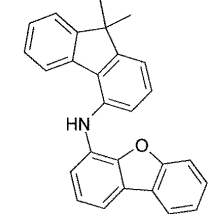
[0202]

g12	 [578027-21-1]	 [942615-32-9]		62
g13	 [578027-21-1]	 [50548-45-3]		70
g14	 [50548-43-1]	 [50548-45-3]		77
g15	 [50548-43-1]			75

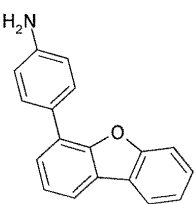
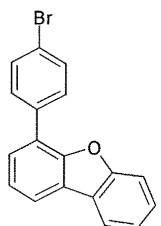
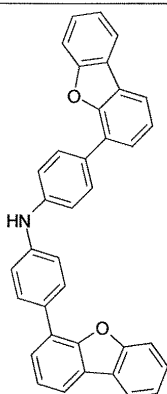
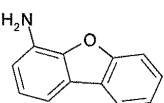
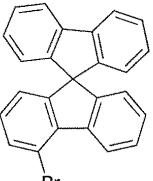
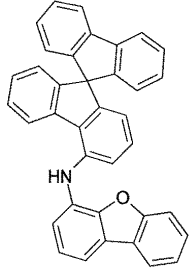
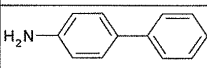
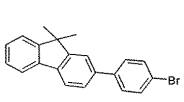
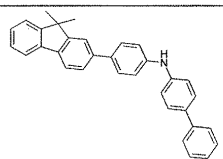
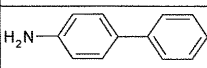
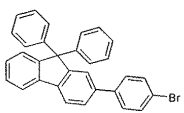
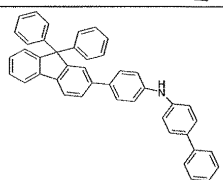
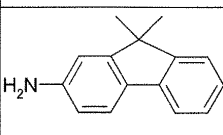
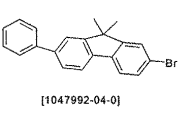
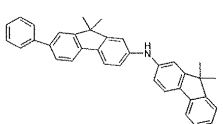
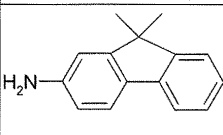
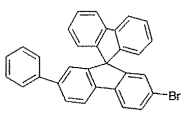
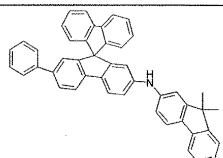
[0203]

g16	 [92-67-1]	 [89827-45-2]		45
g17	 [92-67-1]	 [97511-05-2]		68
g18	 [92-67-1]	 [1415844-67-5]		34
g19	 [92-67-1]	 [1225053-54-2]		78
g20	 [92-67-1]	 [86-76-0]		51

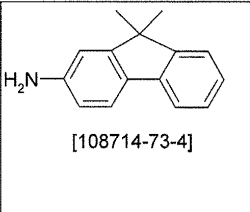
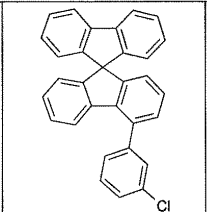
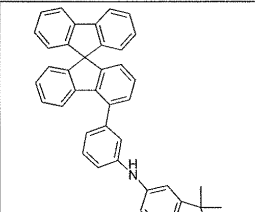
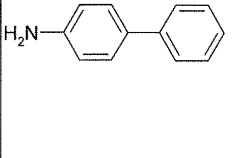
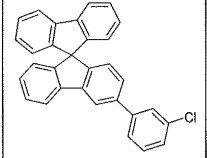
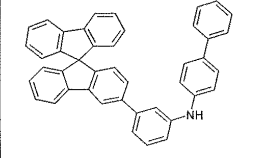
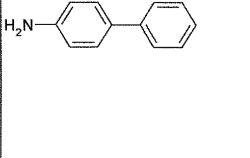
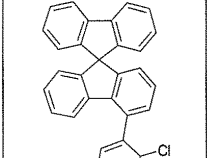
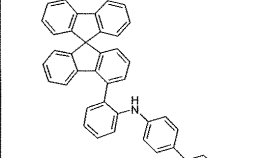
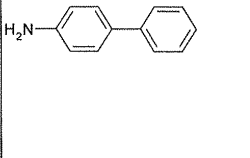
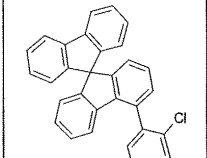
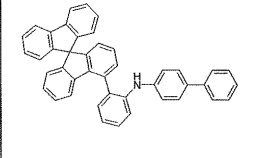
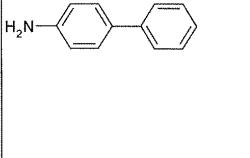
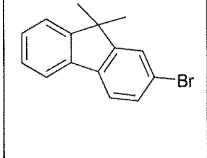
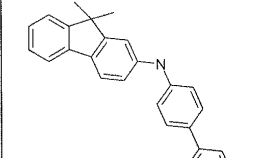
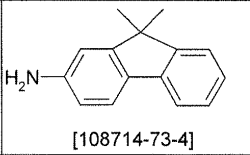
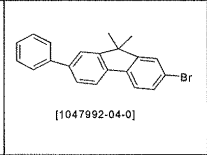
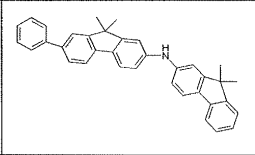
[0204]

g21	 [92-67-1]	 [1450933-18-2]		23
g22	 [92-67-1]	 [1161009-88-6]		55
g23	 [92-67-1]	 [1421789-08-3]		68
g24	 [1579281-06-3]	 [942615-32-9]		29
g25	 [50548-43-1]	 [942615-32-9]		34

[0205]

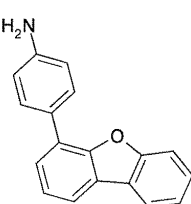
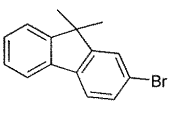
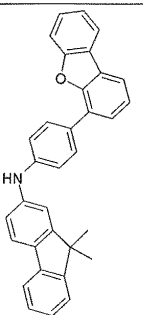
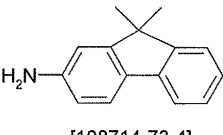
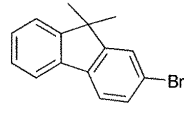
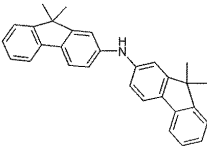
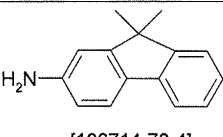
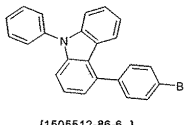
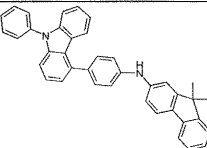
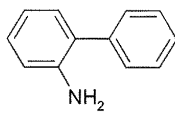
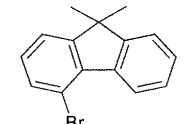
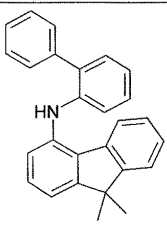
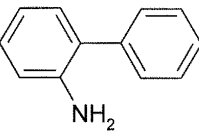
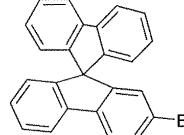
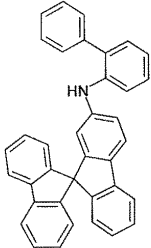
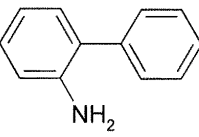
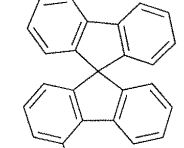
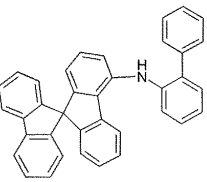
g26	 [578027-21-1]	 [1225053-54-2]		72
g27	 [50548-43-1]	 [1161009-88-6]		45
g28		 [574750-94-0]		56
g29		 [736928-23-7]		63
g30	 [108714-73-4]	 [1047992-04-0]		60
g31	 [108714-73-4]	 [1361305-38-3]		69

[0206]

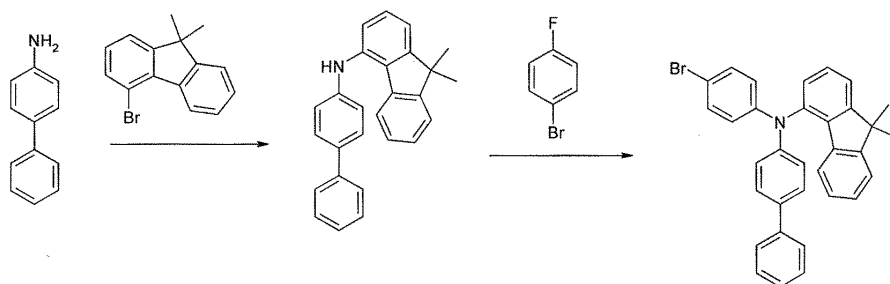
g32	 [108714-73-4]			66
g33				68
g34				71
g35				72
g36				77%
g37	 [108714-73-4]	 [1047992-04-0]		61

[0207]



g26	 [578027-21-1]			74
g27	 [108714-73-4]			66
g28	 [108714-73-4]	 [1505512-86-6]		60
g29	 [90-41-5]	 [942615-32-9]		64
g30	 [90-41-5]	 [171408-76-7]		60
g31	 [90-41-5]	 [1161009-88-6]		66

h) 바이페닐-4-일(4-브로모페닐)(9,9-디메틸-9H-플루오렌-4-일)아민

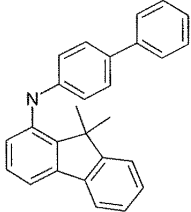
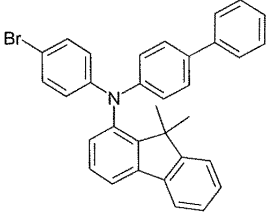


1 l 4-목 플라스크에 초기에 51.3 g (142 mmol, 1.00 eq) 의 바이페닐아민, 및 또한 75.6 g (426 mmol, 3.00 eq) 의 1-브로모-4-플루오로벤젠 [460-00-4] 및 92.5 g (284 mmol, 2.00 eq) 의 세슘 카르보네이트 [534-17-8] 를 충전하고, 500 ml 의 디메틸아세트아미드를 첨가한다. 반응 혼합물을 150℃ 에서 3 일 동안 교반한다.

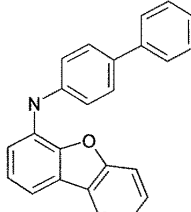
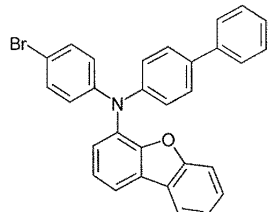
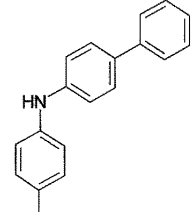
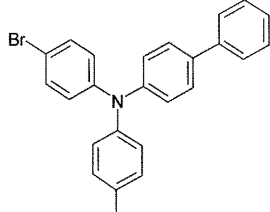
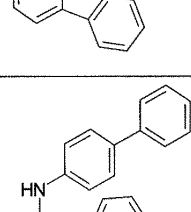
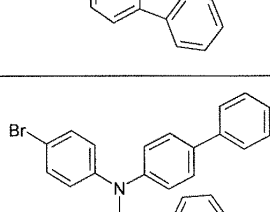
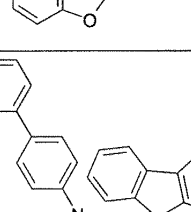
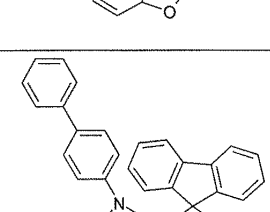
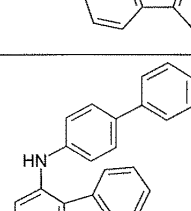
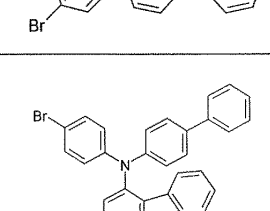
반응이 종료된 후에, 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 고체를 셀라이트를 통해 여과해낸다. 모액을 농축하고, 침전된 고체를 여과하고, 그 후 뜨거운 메탄올로 교반에 의해 추출한다. 건조 후에, 43.5 g (135 mmol, 95%) 의 무색 생성물이 수득된다.

[0212]

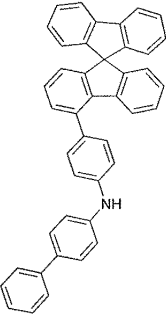
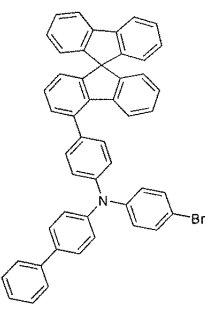
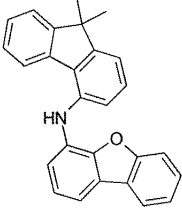
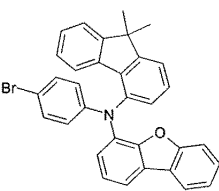
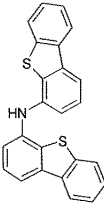
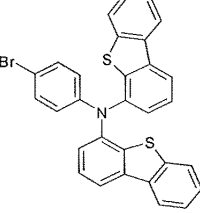
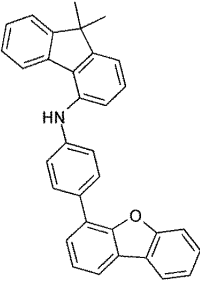
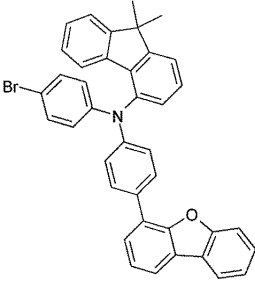
하기 화합물을 유사한 방식으로 제조한다:

	반응물 3	생성물 5	수율 [%]
h1			78

[0213]

h2			81
h3			71
h4			65
h5			26
h6			84

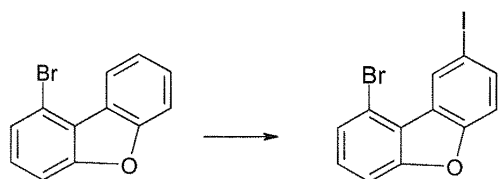
[0214]

h7			68
h8			67
h9			56
h10			44

[0215]

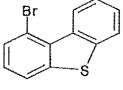
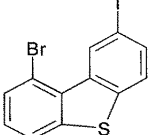
h11			25
h12			59
h13			74
h14			70

j) 1-브로모-8-아이오도디벤조푸란



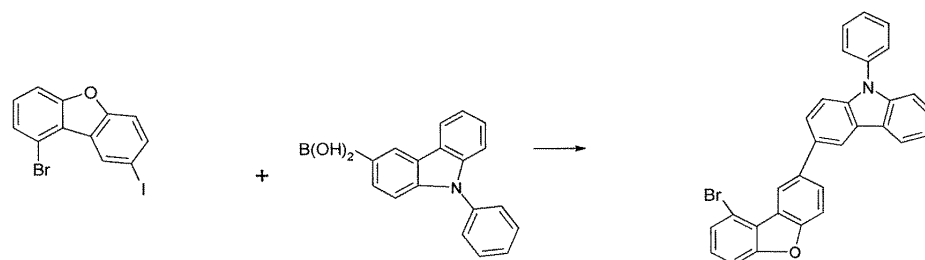
20 g (80 mmol)의 디벤조푸란-1-보론산, 2.06 g (40.1 mmol)의 요오드, 3.13 g (17.8 mmol)의 요오드산, 80 ml의 아세트산, 5 ml의 황산, 5 ml의 물 및 2 ml의 플로로포름을 65℃에서 3 h 동안 교반한다. 냉각 후에, 혼합물을 물과 혼합하고, 침전된 고체를 석션으로 여과해내고, 물로 3 회 세정한다. 잔류물을 톨루엔 으로부터 및 디클로로메탄/헵탄으로부터 재결정화시킨다. 수율은 25.6 g (68 mmol)이며, 이론의 85%에 상응한다.

[0220] 하기 화합물을 유사한 방식으로 제조한다:

	반응물 1	생성물	수율
j1	 [65642-94-6]		81%

[0221]

[0222] i) 3-(9-브로모디벤조푸란-2-일)-9-페닐-9H-카르바졸



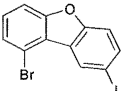
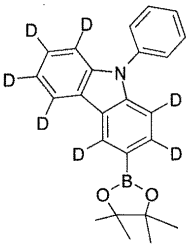
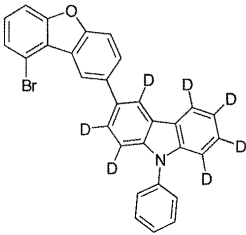
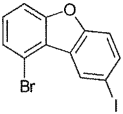
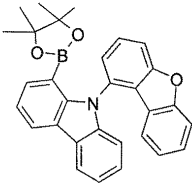
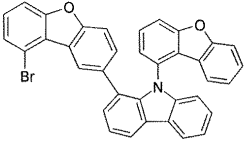
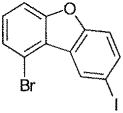
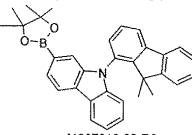
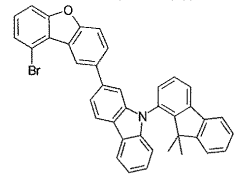
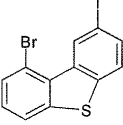
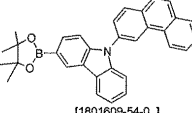
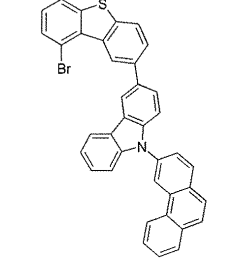
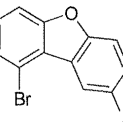
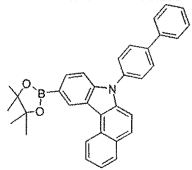
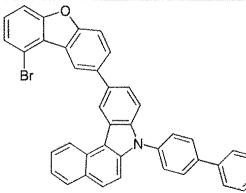
[0223]

[0224] 58 g (156 mmol)의 1-브로모-8-아이오도디벤조푸란, 50 g (172 mmol)의 N-페닐카르바졸-3-보론산 및 36 g (340 mmol)의 소듐 카르보네이트를 1000 ml의 에틸렌 글리콜 디메틸 에테르 및 280 ml의 물에 현탁시킨다.

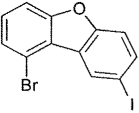
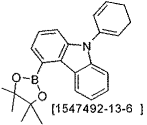
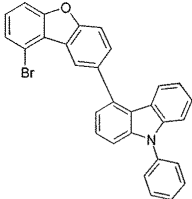
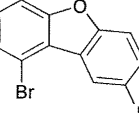
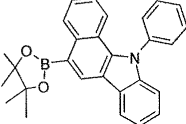
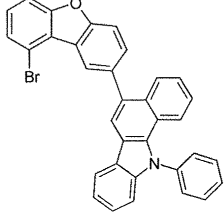
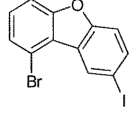
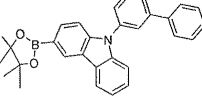
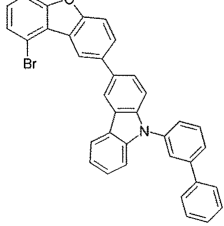
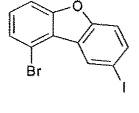
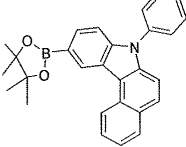
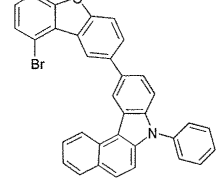
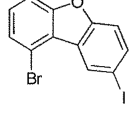
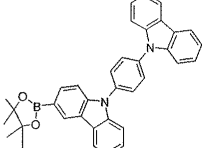
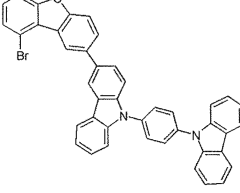
1.8 g (1.5 mmol)의 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)을 이 현탁액에 첨가하고, 반응 혼합물을 환류하에 16 h 동안 가열한다. 냉각 후에, 유기 상을 제거하고, 실리카 겔을 통해 여과하고, 200 ml의 물로 3회 세정하고, 그 후 농축하여 건조시킨다. 수율은 48 g (89 mmol)이며, 이론의 64%에 상응한다.

[0225]

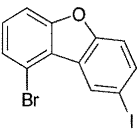
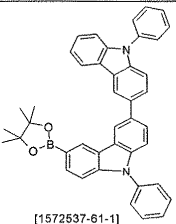
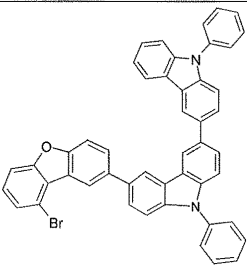
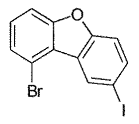
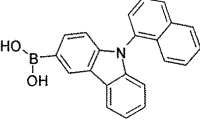
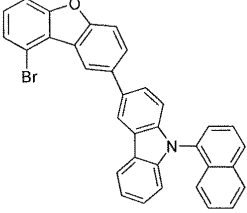
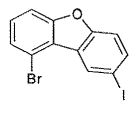
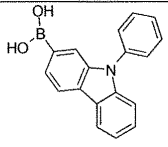
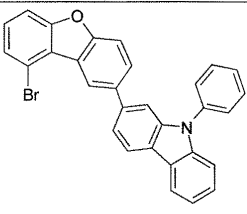
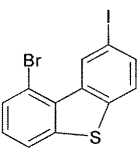
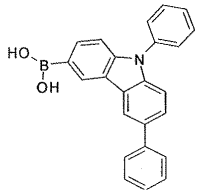
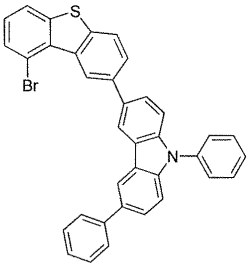
하기 화합물을 유사한 방식으로 제조한다:

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

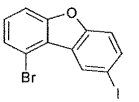
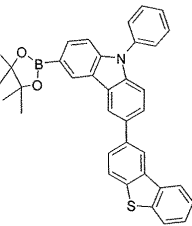
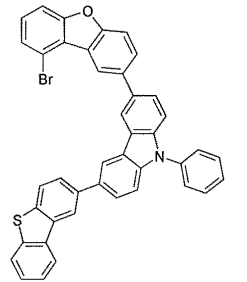
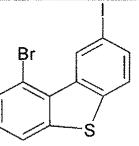
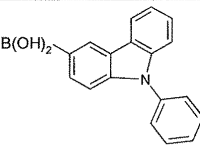
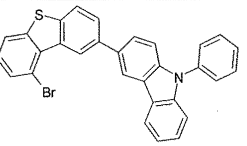
[0226]

i6		 [1547492-13-6 ]		60
i7		 [1493715-37-9 ]		56
i8		 [1416614-66-0 ]		68
i9		 [1246562-39-9 ]		67
i10		 [1240963-83-0 ]		66

[0227]

i11		 [1572537-61-1]		60
i12		 [1133057-97-2 ]		63
i13		 [1001911-63-2 ]		62
i14		 [1133058-06-6 ]		59

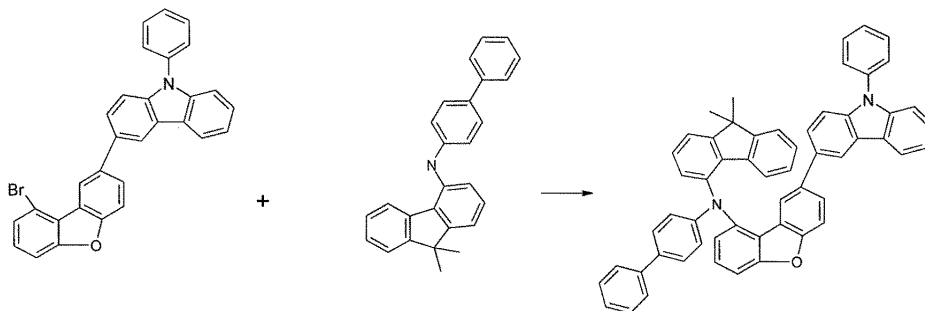
[0228]

i15		 [1582801-74-8 ]		65
i16		 854952-58-2		57

[0229]



[0230] k) 바이페닐-4-일-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-4-일)-[8-(9-페닐-9H-카르바졸-3-일)디벤조푸란-1-일]아민

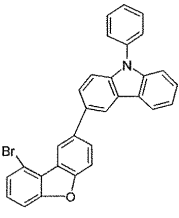
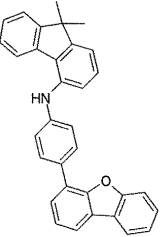
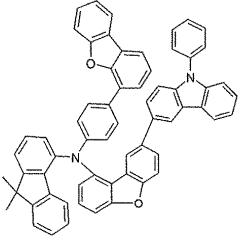
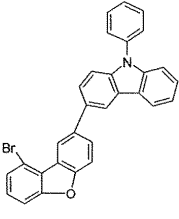
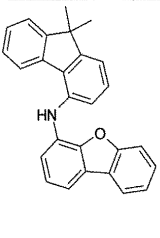
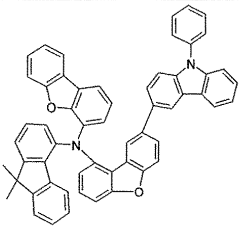
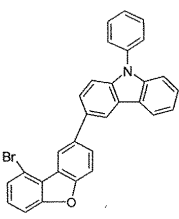
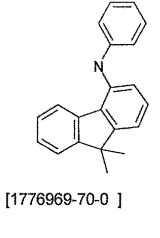
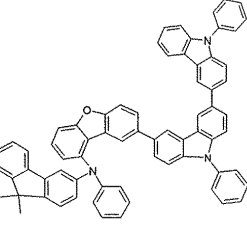
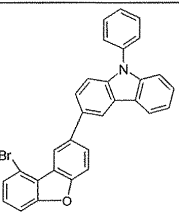
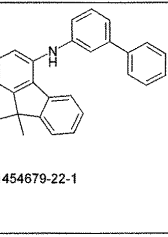
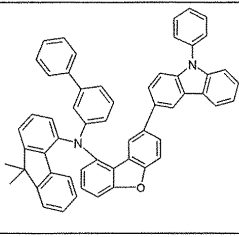
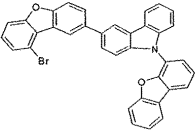
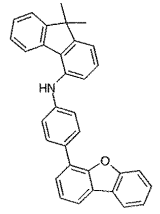
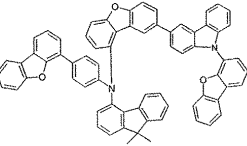


[0231]

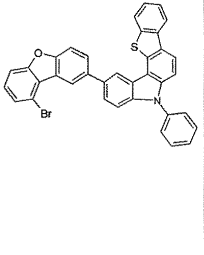
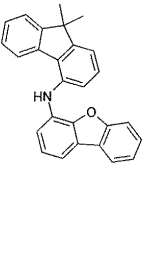
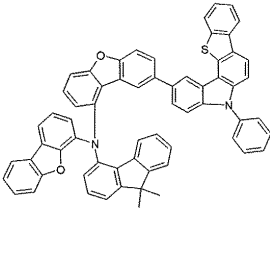
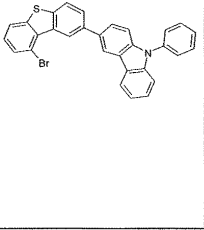
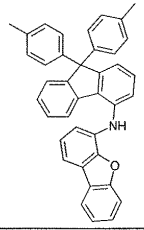
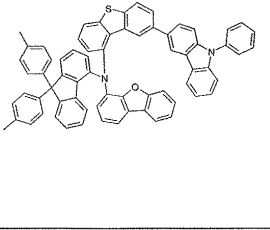
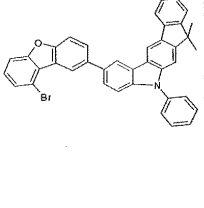
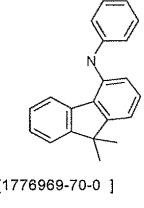
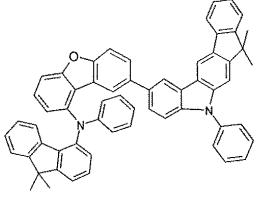
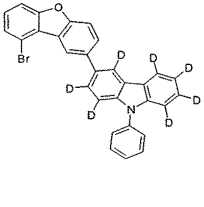
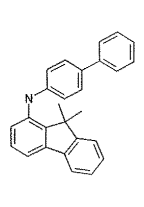
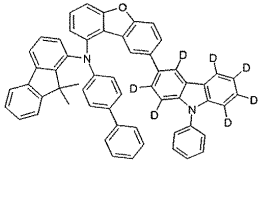
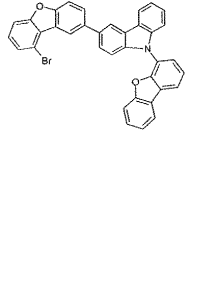
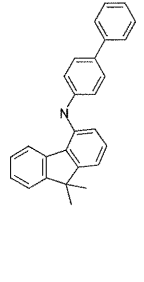
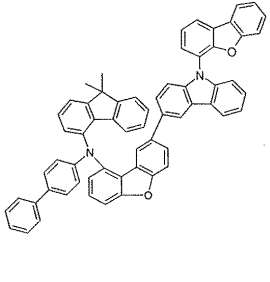
[0232]

9.3 g (26 mmol)의 바이페닐-4-일-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-4-일)아민, 12 g (26 mmol)의 3-(9-브로모디벤조푸란-2-일)-9-페닐-9H-카르바졸, 7.7 g (80 mmol)의 소듐 tert-부톡사이드, 2.6 ml (78 mmol)의 트리-tert-부틸포스핀 (1M, 톨루엔), 224 mg (2.6 mmol)의 팔라듐(II) 아세테이트 및 300 ml의 메시틸렌의 혼합물을 환류하에 24 h 동안 가열한다. 냉각 후에, 200 ml의 물을 첨가하고, 혼합물을 추가의 30 min 동안 교반하고, 유기 상을 제거하고, 후자를 짧은 셀라이트 베드를 통해 여과하고, 그 후 용매를 감압 하에 제거한다. 잔류물을 DMF로부터 5 회 재결정화시키고, 마지막으로 2 회 분별 승화시킨다 (p 약  $10^{-6}$  mbar, T = 340-350°C). 수율: 13 g (17 mmol), 이론의 68%; HPLC 에 의해 99.9%.

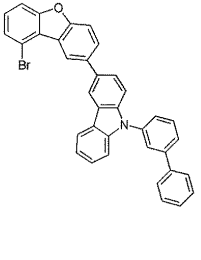
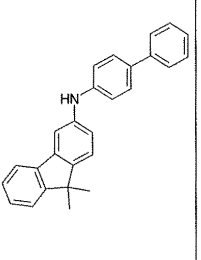
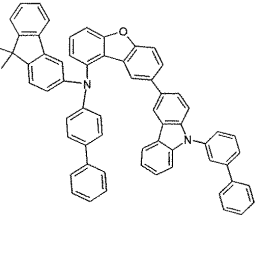
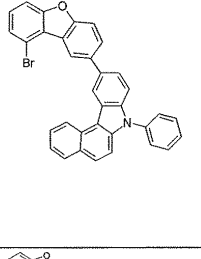
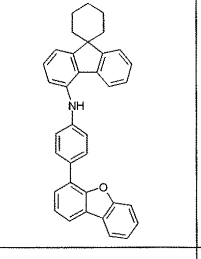
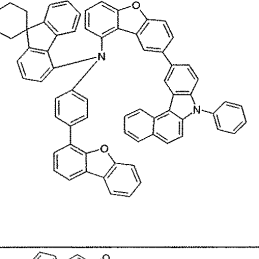
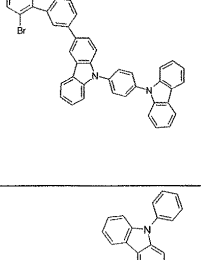
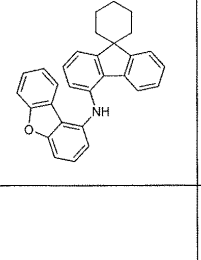
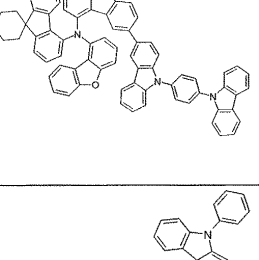
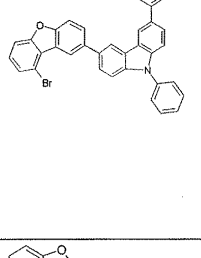
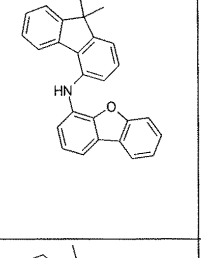
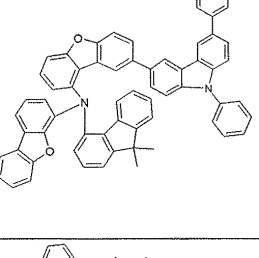
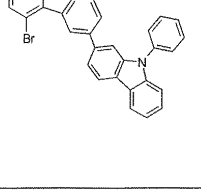
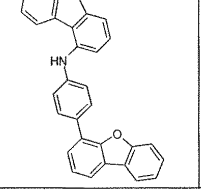
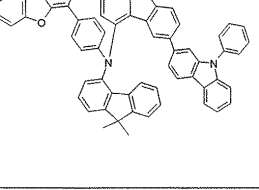
[0233] 하기 화합물을 유사한 방식으로 제조한다:

	반응물 1	반응물 2	생성물	수율 [%]
k1				61
k2				65
k3		 [1776969-70-0 ]		57
k4		 1454679-22-1		72
k5				63

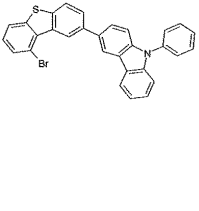
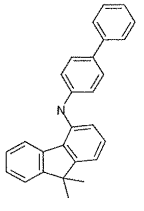
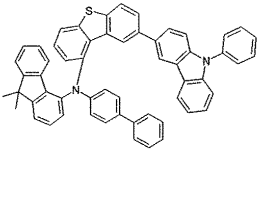
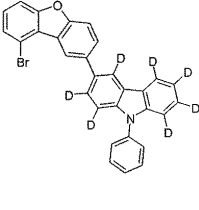
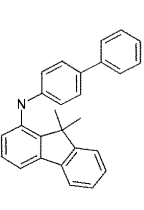
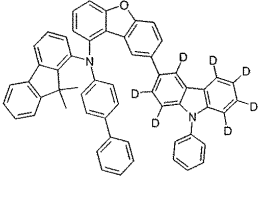
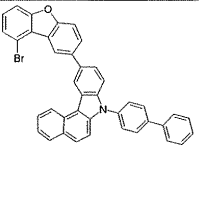
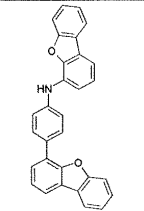
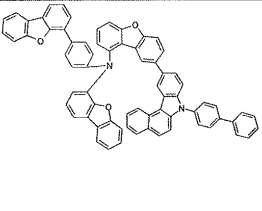
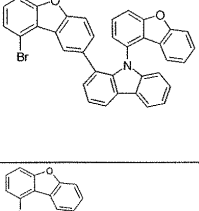
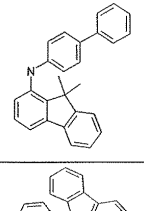
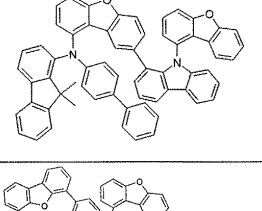
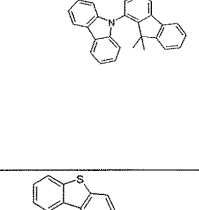
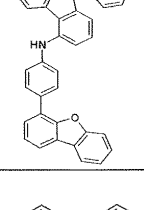
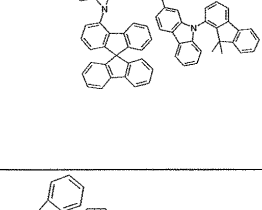
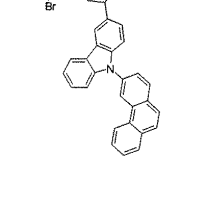
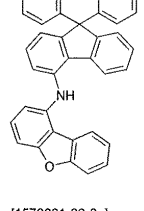
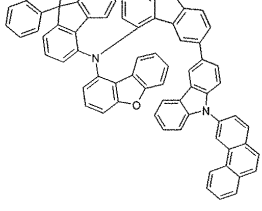
[0234]

k6				62
k7				54
k8		 [1776969-70-0 ]		51
k9				53
k10				56

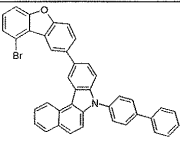
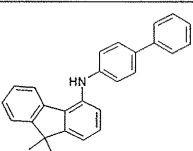
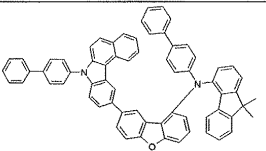
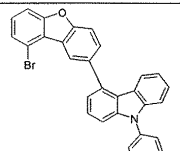
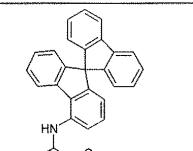
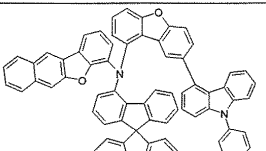
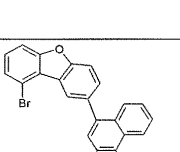
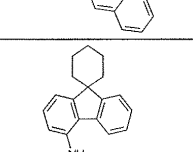
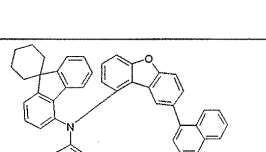
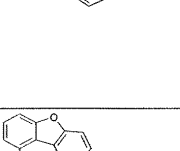
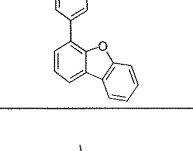
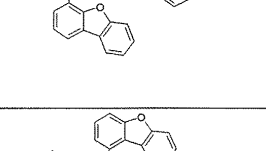
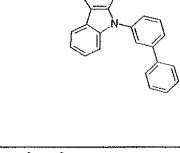
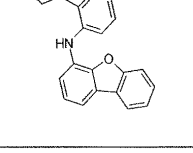
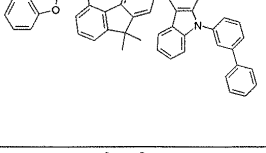
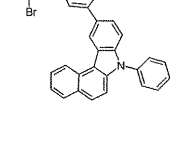
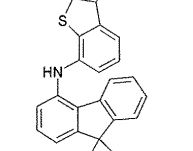
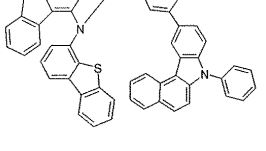
[0235]

k11				66
k12				57
k13				61
k14				52
k15				54

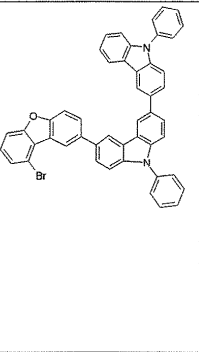
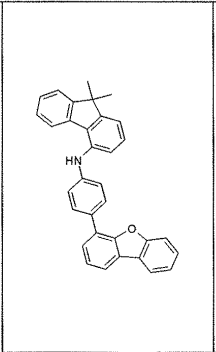
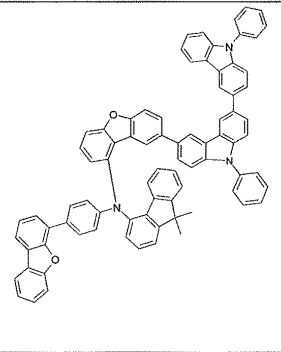
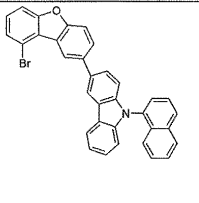
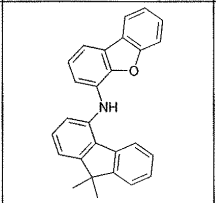
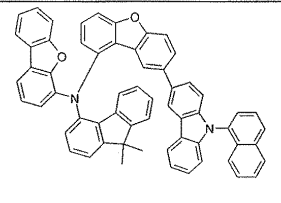
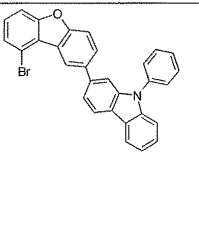
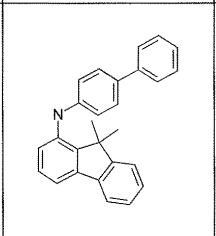
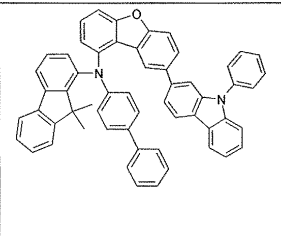
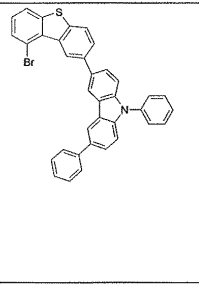
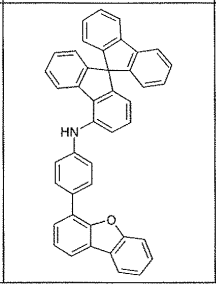
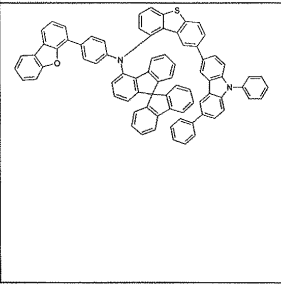
[0236]

k16				57
k17				61
k18				60
k19				54
k20				59
k21		 [1579281-06-3 ]		62

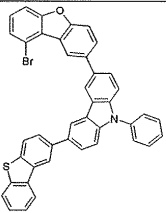
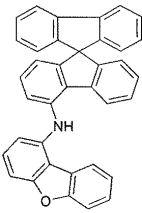
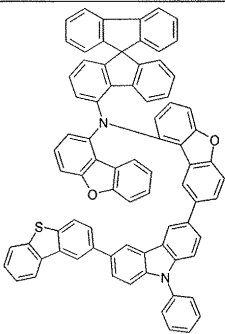
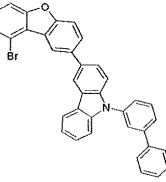
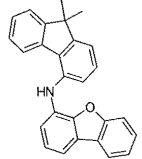
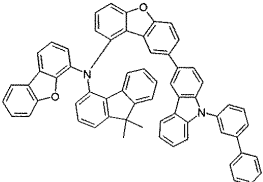
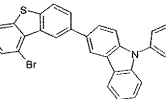
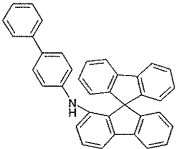
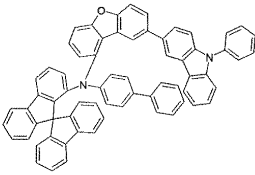
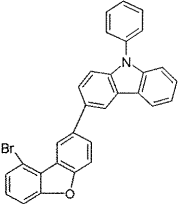
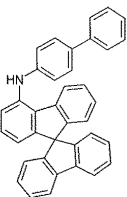
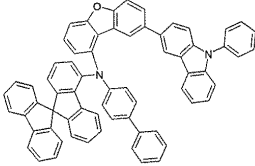
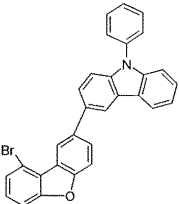
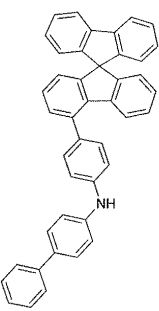
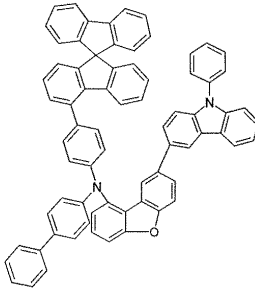
[0237]

k22				61
k23				53
k24				50
k25				61
k26				65
k27				67

[0238]

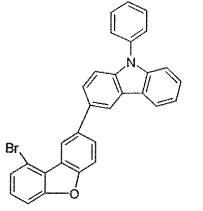
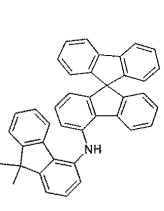
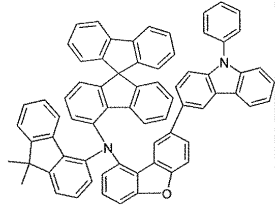
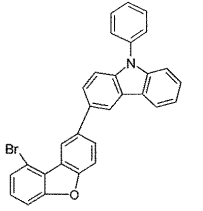
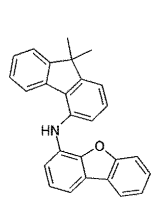
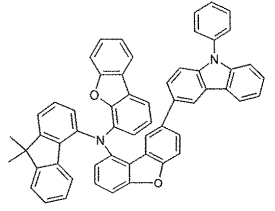
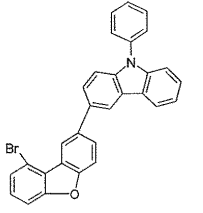
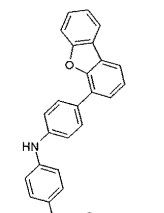
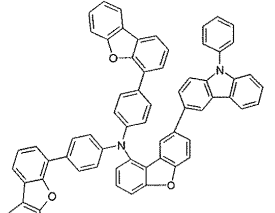
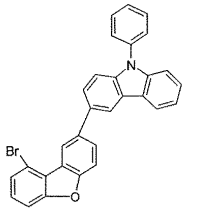
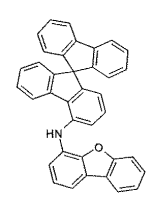
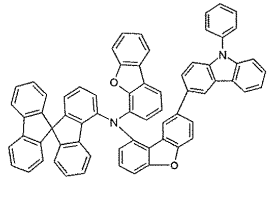
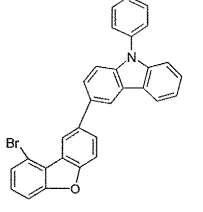
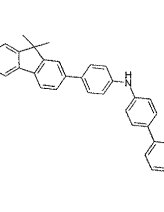
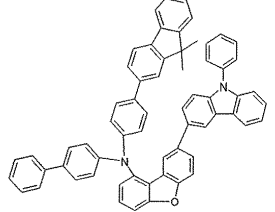
k28				52
k29				68
k30				71
k31				65

[0239]

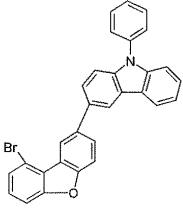
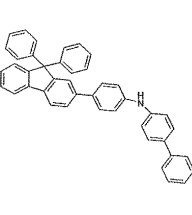
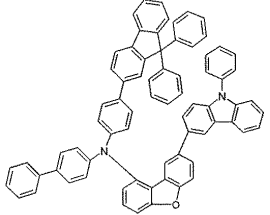
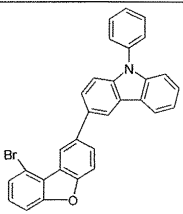
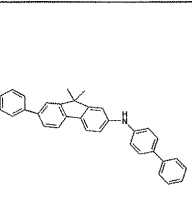
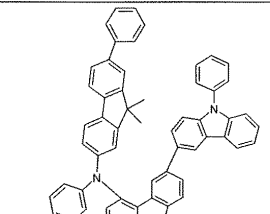
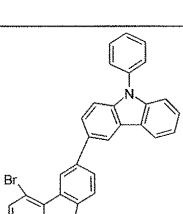
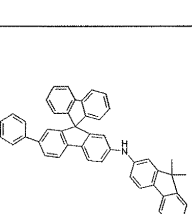
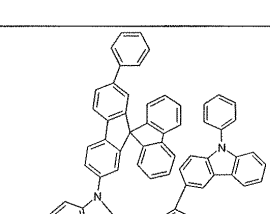
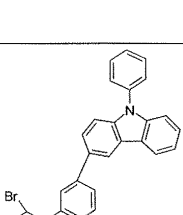
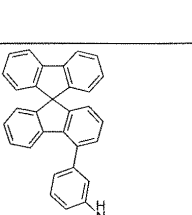
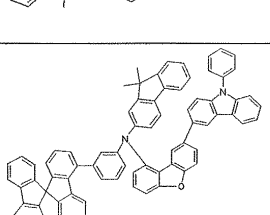
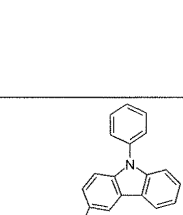
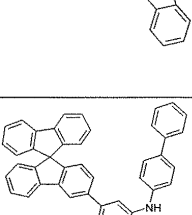
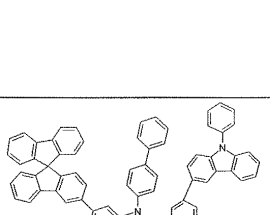
k32		 [1579281-06-3 ]		64
k33				61
k34				63
k35				71
k36				73

[0240]

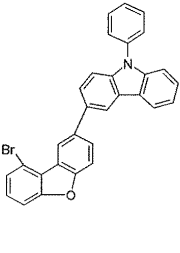
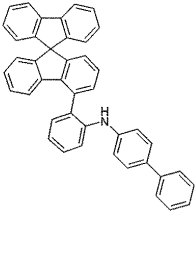
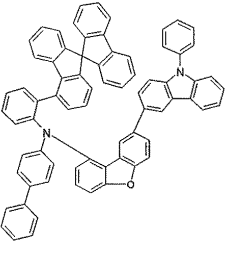
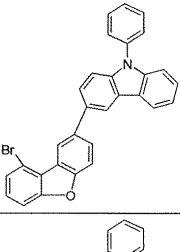
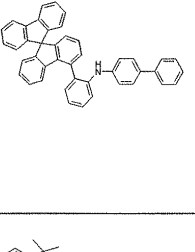
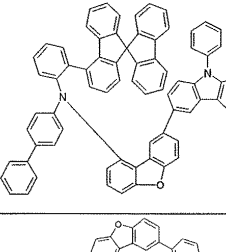
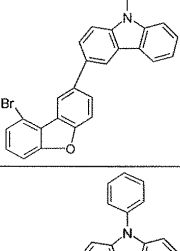
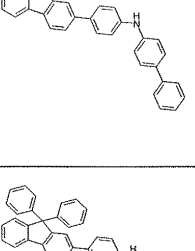
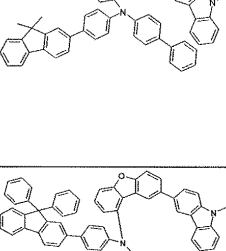
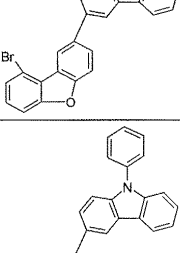
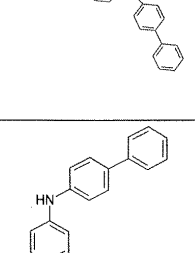
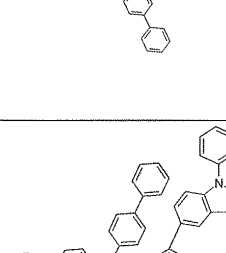
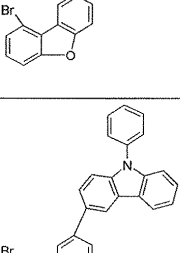
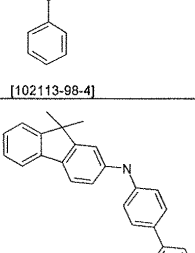
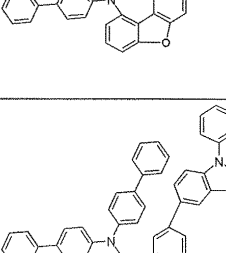
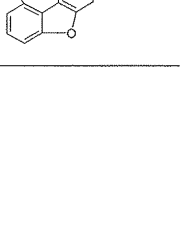
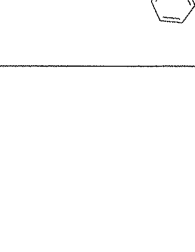
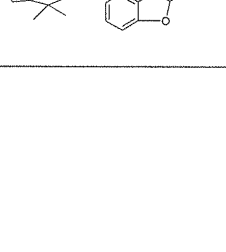


k37				66
k38				65
k39				69
k40				58
k41				78

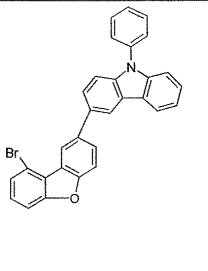
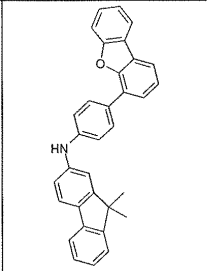
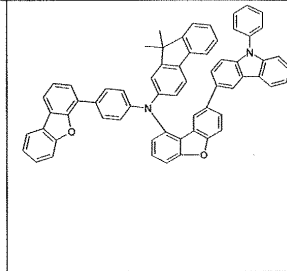
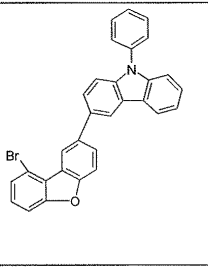
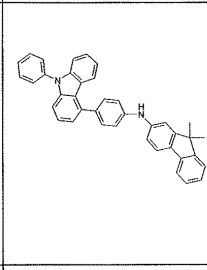
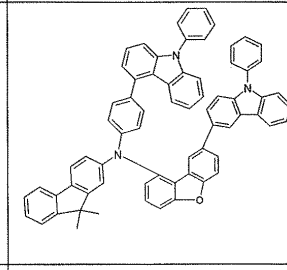
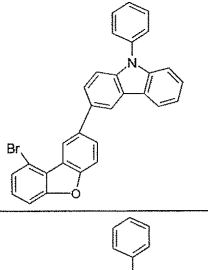
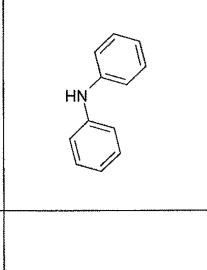
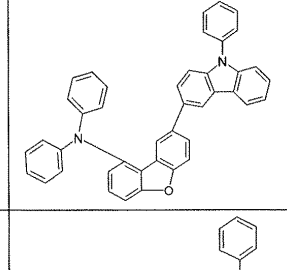
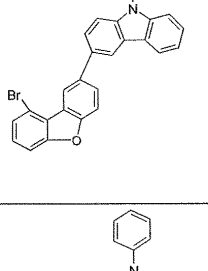
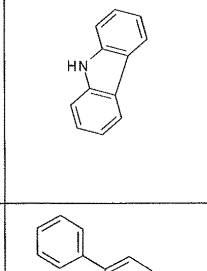
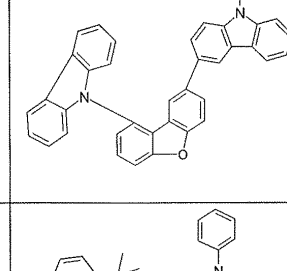
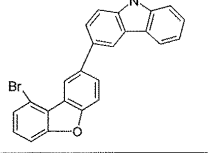
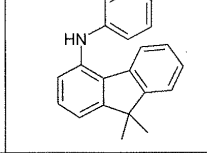
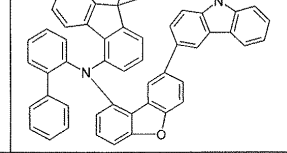
[0241]

k42				77
k43				74
k44				70
k45				63
k46				72

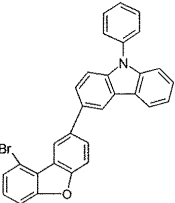
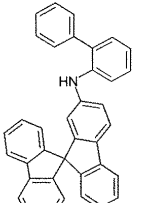
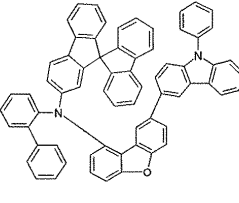
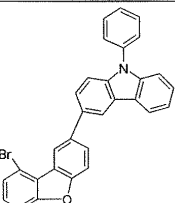
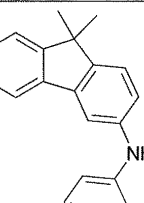
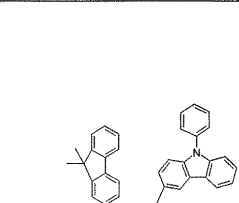
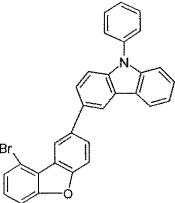
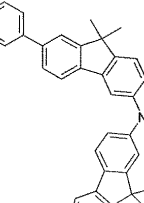
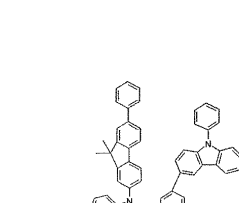
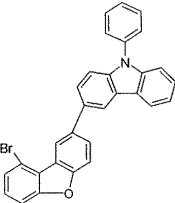
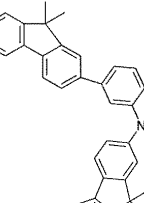
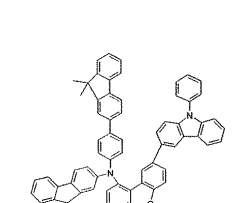
[0242]

k47				60
k48				62
k49				81
k50				78
k51				79
k52				76

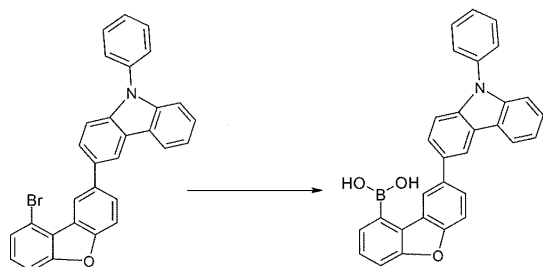
[0243]

k53				70
k54				66
k55				68
k56				62
k57				59

[0244]

k58				57
k59		 [500717-23-7 ]		58%
k60		 [1245939-48-3 ]		60%
k61		 [1372778-80-7 ]		71%

1) 8-(9-페닐-9H-카르바졸-3-일)디벤조푸란-1-보론산

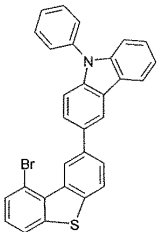
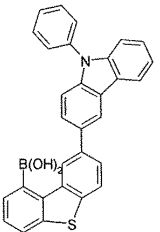
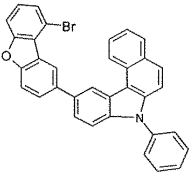
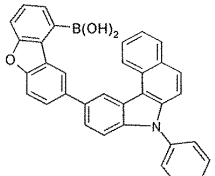
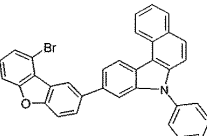
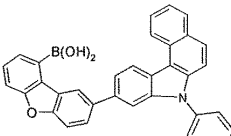
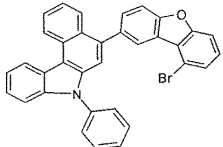
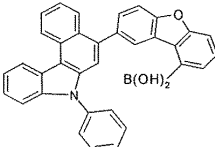


20 g (182 mmol) 의 3-(9-브로모디벤조푸란-2-일)-9-페닐-9H-카르바졸을 400 ml 의 건조 THF 에 용해시키고, -78℃ 로 냉각시킨다. 이 온도에서, 77 ml (190 mmol, hexan 중 2.5 M) 의 n-부틸-리튬을 약 5 min 내에 첨가하고, 그 후 혼합물을 -78℃ 에서 추가의 2.5 h 동안 교반한다. 이 온도에서, 38 g (365 mmol) 의 트리메틸 보레이트를 매우 신속히 첨가하고, 반응물이 점진적으로 실온으로 되게 한다 (약 18 h). 반응 용액을 물로 세정하고, 침전된 고체 및 유기 상을 톨루엔을 이용하는 공비 건조에 적용한다. 미정제 생성물을 약 40℃ 에서 톨루엔/메틸렌 클로라이드로부터 교반에 의해 추출하고, 석션으로 여과해낸다. 냉각 후에, 200 ml 의 물을 첨가하고, 혼합물을 추가의 30 min 동안 교반하고, 유기 상을 제거하고, 후자를 짧은 셀라이트 베드를

통해 여과하고, 그 후 용매를 감압 하에 제거한다. 잔류물을 DMF 로부터 5 회 재결정화시키고, 마지막으로 2 회 분별 승화시킨다 (p 약  $10^{-6}$  mbar, T = 380-340°C). 수율: 16.7 g (690 mmol), 이론의 90%.

[0249]

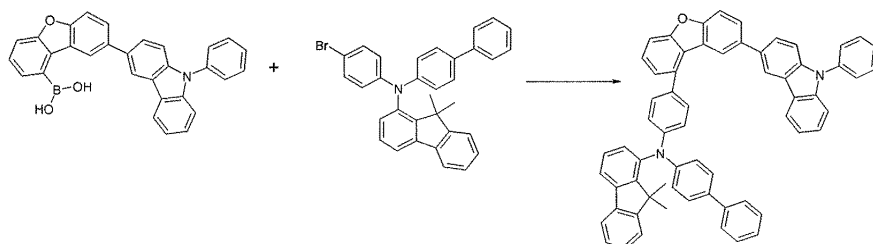
하기 화합물을 유사한 방식으로 제조한다:

	반응물 1	생성물	수율 [%]
I1			84
I2			77
I3			75
I4			70

[0250]

[0251]

m) 바이페닐-4-일(9,9-디메틸-9H-플루오렌-1-일){4-[8-(9-페닐-9H-카르바졸-3-일)-디벤조푸란-1-일]페닐}아민



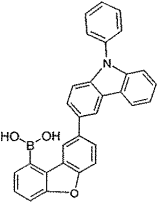
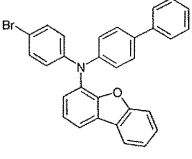
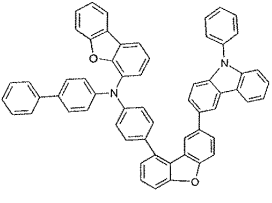
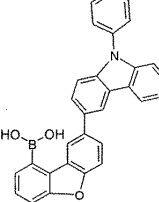
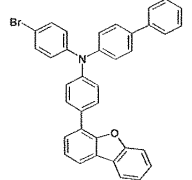
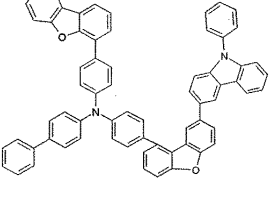
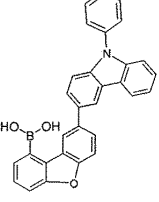
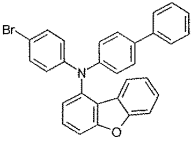
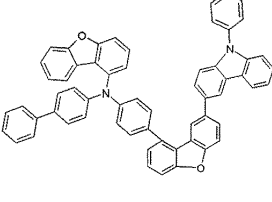
[0252]

[0253]

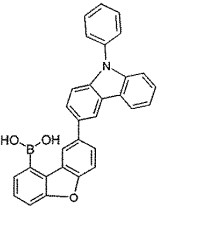
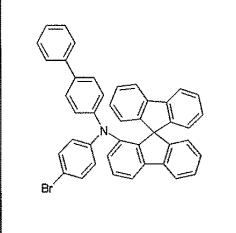
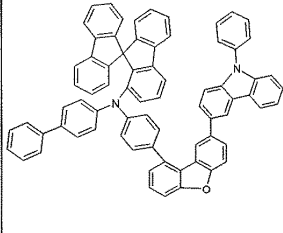
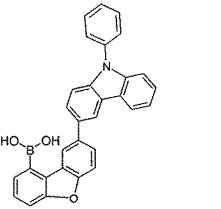
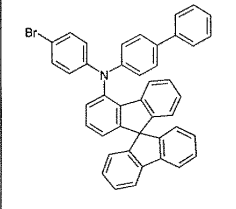
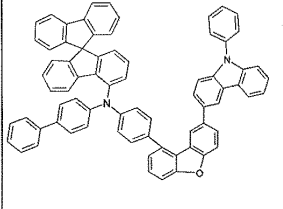
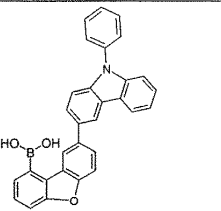
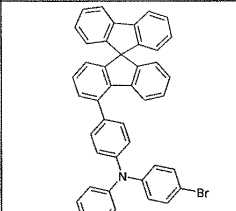
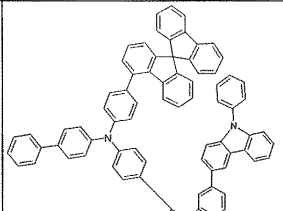
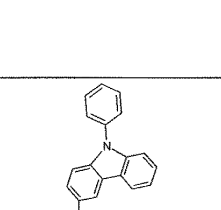
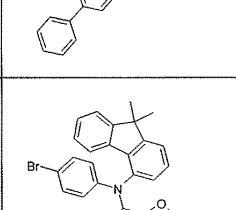
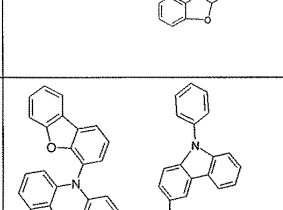
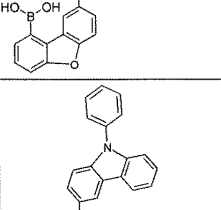
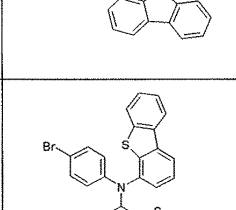
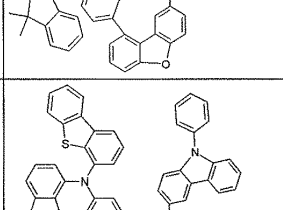
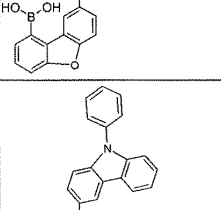
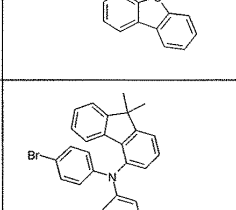
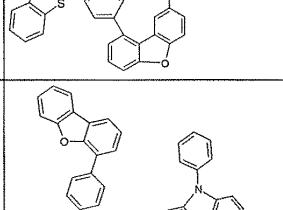
49.8 g (110.0 mmol) 의 8-(9-페닐-9H-카르바졸-3-일)디벤조푸란-1-보론산, 56 g (110.0 mmol) 의 바이페닐-4-일(4-브로모페닐)(9,9-디메틸-9H-플루오렌-1-일)-아민 및 26 g (210.0 mmol) 의 소듐 카르보네이트를 500 ml 의 에틸렌 글리콜 디메틸 에테르 및 500 ml 의 물에 현탁시킨다. 이 현탁액에 913 mg (3.0 mmol) 의 트리-*o*-톨릴포스핀 및 그 후 112 mg (0.5 mmol) 의 팔라듐(II) 아세테이트를 첨가하고, 반응 혼합물을 환류 하에 16 h 동안 가열한다. 냉각 후에, 유기 상을 제거하고, 실리카 겔을 통해 여과하고, 200 ml 의 물로 3 회 세정하고, 그 후 농축하여 건조시킨다. 생성물을 칼럼 크로마토그래피를 통해 실리카 겔 상에서 톨루엔/헥산 (1:2) 으로 정제하고, 마지막으로 고진공 (p =  $5 \times 10^{-7}$  mbar) 하에 승화시킨다 (99.9% 순도). 수율은 87 g (86 mmol) 이며, 이론의 83% 에 상응한다.

[0254]

하기 화합물을 유사한 방식으로 제조한다:

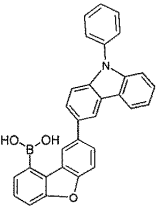
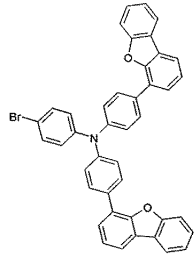
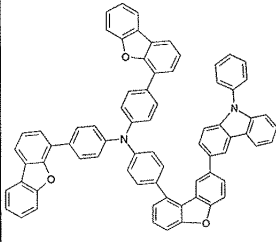
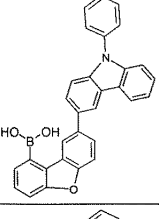
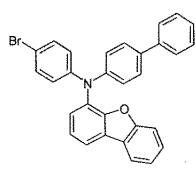
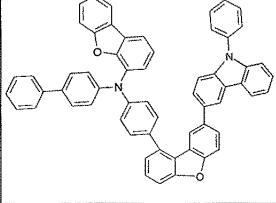
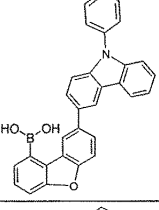
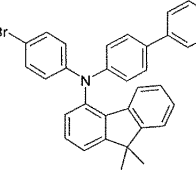
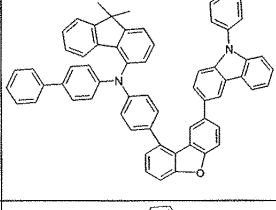
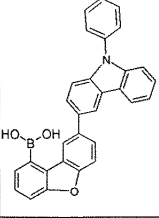
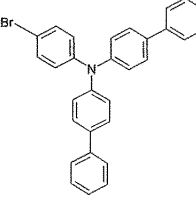
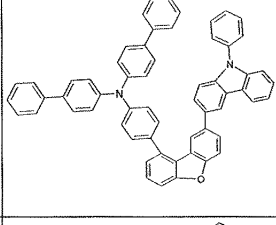
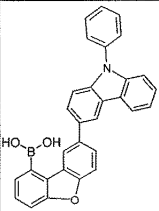
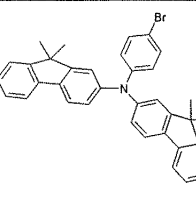
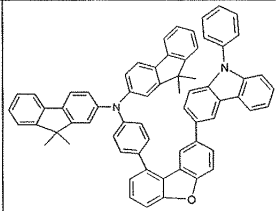
	반응물 1	반응물 2	생성물	수율 [%]
m1				73
m2				75
m3				70

[0255]

m4				64
m4a				67
m5				68
m6				73
m7				66
m8				71

[0256]



m9				70
m10				73
m11				76
m12				63
m13				74

[0257]

[0258]

## OLED 의 생산

[0259]

하기 실시예 C1 내지 I10 에서 (표 1 및 2 참조), 다양한 OLED 의 데이터가 제시된다.

[0260]

**실시예 C1-I10 에 관한 전처리:** 코팅 전에, 두께 50 nm 의 구조화된 ITO (인듐 주석 옥사이드) 로 코팅된 유리 플라크를 산소 플라즈마, 그에 뒤이어 아르곤 플라즈마로 처리한다. 이들 플라즈마-처리된 유리 플라크는 기판을 형성하며, 여기에 OLED 가 적용된다.

[0261]

OLED 는 기본적으로 하기 층 구조를 갖는다: 기판 / 정공 주입 층 (HIL) / 정공 수송 층 (HTL) / 전자 차단자 층 (EBL) / 방사 층 (EML) / 선택적 정공 차단자 층 (HBL) / 전자 수송 층 (ETL) / 선택적 전자 주입 층 (EIL) 및 마지막으로 캐소드. 캐소드는 두께 100 nm 의 알루미늄 층에 의해 형성된다. OLED 의 정확한 구조는 표 1 에서 찾을 수 있다. OLED 의 생산에 요구되는 재료는 표 3 에 제시되어 있다.

[0262]

모든 재료를 진공실에서 열 증착에 의해 적용한다. 이 경우에, 방사 층은 항상 적어도 하나의 매트릭스 재료 (호스트 재료) 및 공-증발에 의해 특정 부피 비율로 매트릭스 재료(들)에 적용되는 방사 도판트 (방사체) 로 이루어진다. IC1:PA:TEG1 (55%:35%:10%) 와 같은 형태로 제시되는 세부사항은 재료 IC1 이 층에 55% 의 부피 비율로 존재하고, PA 가 35% 의 부피 비율로 존재하고, TEG1 이 10% 의 부피 비율로 존재한다는 것을 의미한다. 유사하게, 전자 수송 층은 또한 두 재료의 혼합물로 이루어진다.

[0263]

OLED 는 표준 방식으로 특성분석된다. 이 목적을 위해, 전계발광 스펙트럼, 전압 및 외부 양자 효율 (EQE, 퍼센트로 측정됨) 을 램베르티안 방사선 특성치를 가정하는 전류-전압-휘도 특성치 (IUL 특성치) 로부터 계산된, 휘도, 및 수명의 함수로서 확인한다. 전계발광 스펙트럼을 1000 cd/m<sup>2</sup> 의 휘도에서 확인한다.

표 2 에서 파라미터 U1000 은 여기에서  $1000 \text{ cd/m}^2$  의 휘도에 요구되는 전압을 나타내고, CIE 1931 x 및 y 색 좌표를 그로부터 계산한다. SE1000 은  $1000 \text{ cd/m}^2$  에서 달성되는 전력 효율을 나타낸다. 마지막으로, EQE1000 은  $1000 \text{ cd/m}^2$  의 작동 휘도에서의 외부 양자 효율을 나타낸다.

[0264] 다양한 OLED 에 관한 데이터가 표 2 에 제시되어 있다. 실시예 C1 내지 C4 는 선행 기술에 따른 비교예이다; 실시예 I1-I10 은 본 발명의 OLED 의 데이터이다.

[0265] 본 발명의 OLED 의 이점을 예시하기 위해서, 실시예의 일부를 이후 상세히 설명한다.

[0266] **인광 OLED 의 방사 층에서의 본 발명의 혼합물의 용도**

[0267] 본 발명의 재료는, 인광 OLED 의 방사 층 (EML) 에서 전자-전도성 화합물 (예를 들어 아래 사용된 실시예의 화합물 IC5) 과의 조합으로 매트릭스 재료로서 사용될 때, 특히 OLED 의 외부 양자 효율에 관하여, 선행 기술에 비해 유의한 개선을 낳는다. 본 발명의 화합물 K55 및 K59 의 사용을 통해, 선행 기술로부터의 화합물 PA1, PA2, PA3 및 PA4 과 비교할 때 약 5-10% 만큼의 EQE 에서의 개선을 관찰하는 것이 가능하다 (실시예 C1, C2 및 C3 과 실시예 I1 의 비교 및 C4 와 I2 의 비교).

[0268] 표 1: OLED 의 구조

Ex.	HIL 두께	HTL 두께	EBL 두께	EML 두께	HBL 두께	ETL 두께	EIL 두께
C1	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA3 20nm	IC5:SdT1:TEG2 (40%:50%:10%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
C2	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA3 20nm	IC5:SdT2:TEG2 (40%:50%:10%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
C3	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA3 20nm	IC5:SdT3:TEG2 (40%:50%:10%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
C4	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA3 20nm	IC5:SdT4:TEG2 (40%:50%:10%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
I1	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA3 20nm	IC5:K55:TEG2 (40%:50%:10%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
I2	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA3 20nm	IC5:K59:TEG2 (40%:50%:10%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
I3	HATCN 5nm	SpMA1 240nm	K51 10nm	IC5:IC3:TEG2 (60%:40%:10%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
I4	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA3 20nm	IC5:K52:TEG2 (40%:45%:15%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
I5	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA3 20nm	IC5:K47:TEG2 (40%:45%:15%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
I6	HATCN 5nm	SpMA1 240nm	K53 10nm	IC5:IC3:TEG2 (60%:40%:10%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
I7	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA3 20nm	IC5:K54:TEG2 (40%:45%:15%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
I8	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA3 20nm	IC5:K55:TEG2 (40%:50%:10%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
I9	HATCN 5nm	SpMA1 240nm	M13 10nm	IC5:IC3:TEG2 (60%:40%:10%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
I10	HATCN 5nm	SpMA1 240nm	M12 10nm	IC5:IC3:TEG2 (60%:40%:10%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---

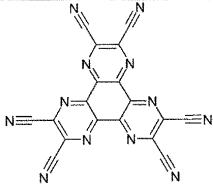
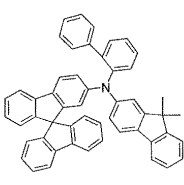
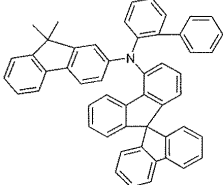
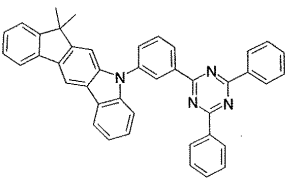
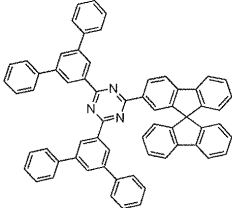
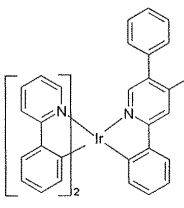
[0269]

[0270] 표 2: OLED 의 데이터

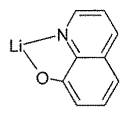
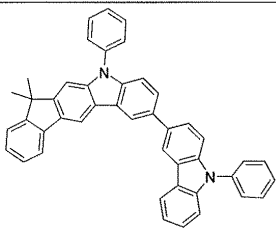
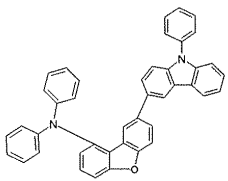
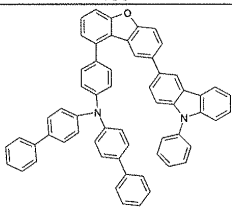
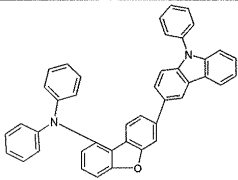
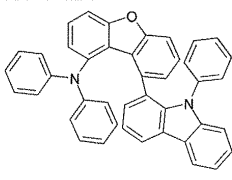
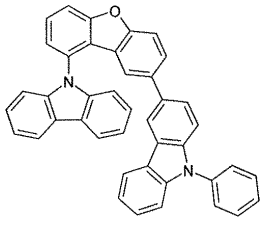
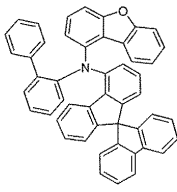
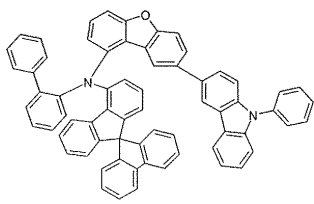
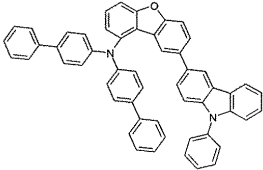
Ex.	U1000 (V)	SE1000 (cd/A)	EQE 1000	1000 cd/m <sup>2</sup> 에서의 CIE x/y
C1	3.4	62	16.4%	0.33/0.63
C2	3.3	59	16.1%	0.32/0.63
C3	3.5	58	15.6%	0.34/0.62
C4	3.6	59	16.0%	0.33/0.63
I1	3.3	64	17.3%	0.33/0.63
I2	3.7	63	17.2%	0.33/0.63
I3	3.3	54	14.6%	0.34/0.63
I4	3.3	63	16.8%	0.33/0.63
I5	3.5	63	16.9%	0.33/0.63
I6	3.2	56	14.9%	0.32/0.63
I7	3.4	62	16.7%	0.33/0.63
I8	3.3	64	17.5%	0.32/0.64
I9	3.1	56	15.1%	0.33/0.63
I10	3.3	56	15.2%	0.32/0.63

[0271]

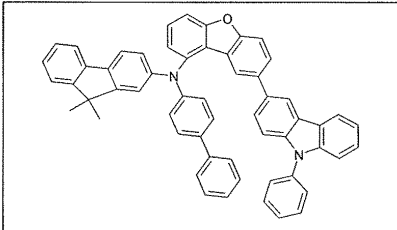
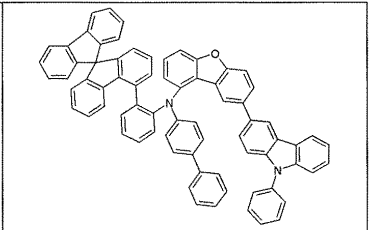
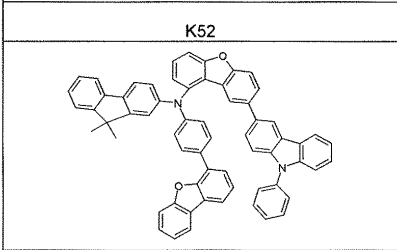
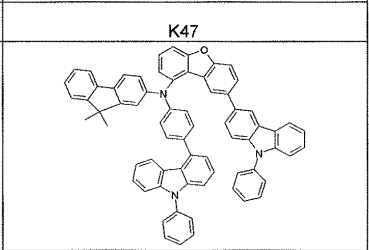
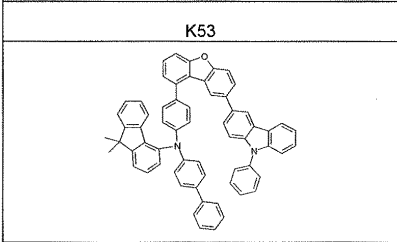
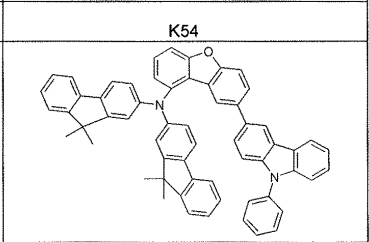
[0272] 표 3: OLED 용 재료의 구조식

	
HATCN	SpMA1
	
SpMA3	IC5
	
ST2	TEG2

[0273]

	
LiQ	IC3
	
K55	M12
	
JP 2012-049518	JP 2012-049518
PA1	PA2
	
JP 2012-049518	WO 2013/120577
PA3	PA4
	
K59	K51

[0274]

	
K52	K47
	
K53	K54
	
K16	M13

[0275]

【심사관 직권보정사항】

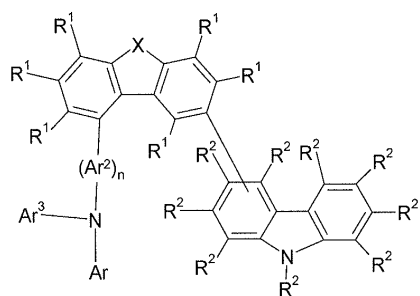
【직권보정 1】

【보정항목】 청구범위

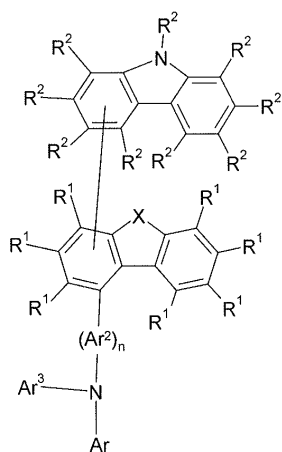
【보정세부항목】 청구항 1

【변경전】

화학식 (1) 또는 화학식 (2) 의 화합물로서,



화학식 (1)



화학식 (2)

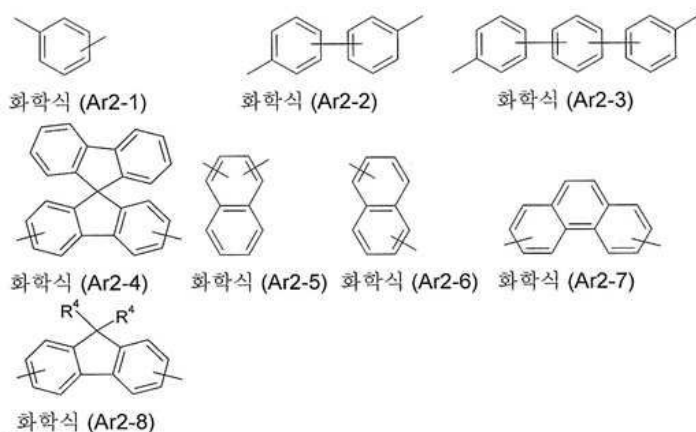
[식에서 사용된 기호는 다음과 같음:

X는 0 또는 S 이며;

Ar은 6 내지 12 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리계 또는 9,9'-스피로바이플루오렌 기 또는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리계이며, 여기서 이들 각각은 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수 있고;

Ar<sup>1</sup>은 각 경우에 동일 또는 상이하고, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계이며;

Ar<sup>2</sup>는 하기 화학식 (Ar2-1) 내지 (Ar2-8) 중 선택되는 기이며



여기서 두 개의 말단 단일 결합은 인접 기에 대한 결합이고, 기는 자유 위치에서 R<sup>4</sup>에 의해 치환될 수 있고;

Ar<sup>3</sup> 6 내지 12 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리계 또는 9,9'-스피로바이폴루오렌 기 또는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리계이며, 여기서 이들 각각은 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수 있고;

R은 각 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, CN, N(Ar<sup>1</sup>)<sub>2</sub>, 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 기 또는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D로 대체될 수 있음), 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 동일한 탄소 원자에 또는 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의 R 치환기가 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭 지방족 또는 방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하며;

R<sup>1</sup>은 각 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, CN, 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 기 또는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D로 대체될 수 있음), 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의 R<sup>1</sup> 치환기가 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하며;

R<sup>2</sup>는 각 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, CN, N(R<sup>4</sup>)<sub>2</sub>, 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 기 또는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D로 대체될 수 있음), 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의 R<sup>2</sup> 치환기가 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하며;

R<sup>4</sup>는 각 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, CN, N(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 기 또는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 R<sup>5</sup> 라디칼로 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D로 대체될 수 있음), 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의 R<sup>5</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의 R<sup>4</sup> 치환기가 하나 이상의 R<sup>5</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하며;



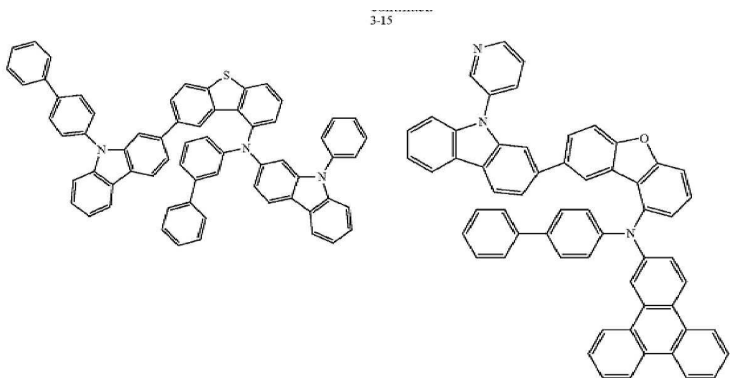
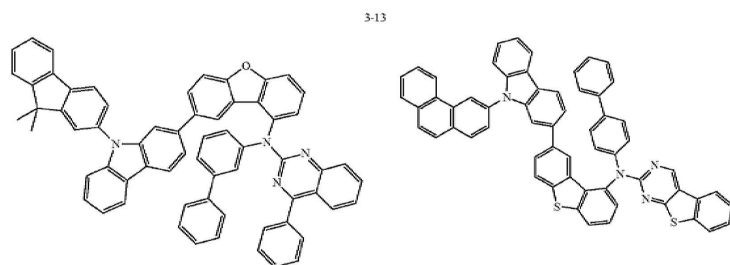
칼로 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D 로 대체될 수 있음), 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의  $R^5$  라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 동일한 탄소 원자 또는 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의  $R^4$  치환기가 하나 이상의  $R^5$  라디칼로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하며;

$R^5$ 는 각 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드로카르빌 라디칼, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리계 (여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D 로 대체될 수 있고, 이는 1 내지 4 개의 탄소 원자를 각각 갖는 하나 이상의 알킬 기로 치환될 수 있음) 로 이루어지는 군으로부터 선택되고;

n은 0 또는 1 이며;

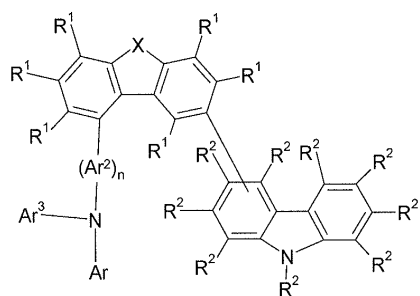
여기에서 화학식 (1) 에서 하나의  $R^2$  및 화학식 (2) 에서 탄소 원자에 결합된 하나의  $R^1$  및 하나의  $R^2$  는 단일 결합으로 대체됨.]

하기 화합물들은 제외되는, 화합물.

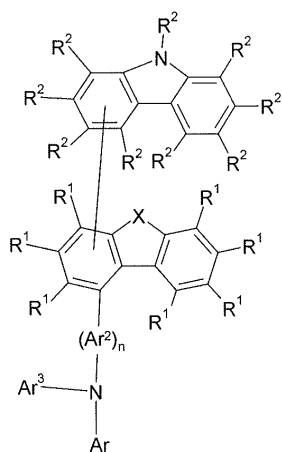


【변경후】

화학식 (1) 또는 화학식 (2) 의 화합물로서,



화학식 (1)



화학식 (2)

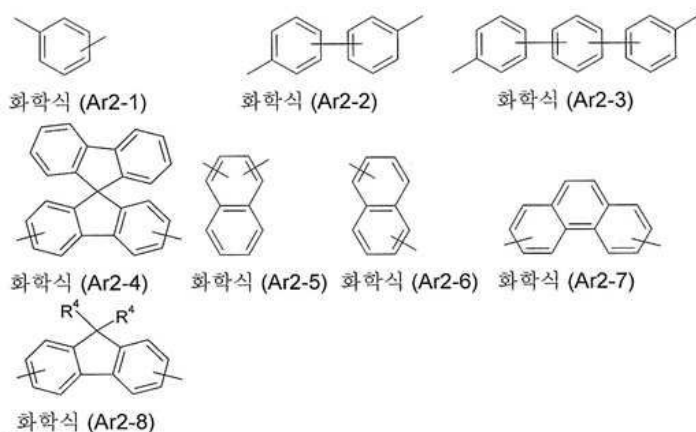
[식에서 사용된 기호는 다음과 같음:

X는 0 또는 S 이며;

Ar은 6 내지 12 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리계 또는 9,9'-스피로바이플루오렌 기 또는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리계이며, 여기서 이들 각각은 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수 있고;

Ar<sup>1</sup>은 각 경우에 동일 또는 상이하고, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계이며;

Ar<sup>2</sup>는 하기 화학식 (Ar2-1) 내지 (Ar2-8) 중 선택되는 기이며



여기서 두 개의 말단 단일 결합은 인접 기에 대한 결합이고, 기는 자유 위치에서 R<sup>4</sup>에 의해 치환될 수 있고;

Ar<sup>3</sup>은 6 내지 12 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리계 또는 9,9'-스피로바이플루오렌 기 또는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리계이며, 여기서 이들 각각은 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수 있고;

R은 각 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, CN, N(Ar<sup>1</sup>)<sub>2</sub>, 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 기 또는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D로 대체될 수 있음), 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 동일한 탄소 원자에 또는 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의 R 치환기가 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭 지방족 또는 방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하며;

R<sup>1</sup>은 각 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, CN, 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 기 또는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D로 대체될 수 있음), 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의 R<sup>1</sup> 치환기가 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하며;

R<sup>2</sup>는 각 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, CN, N(R<sup>4</sup>)<sub>2</sub>, 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 기 또는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D로 대체될 수 있음), 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의 R<sup>2</sup> 치환기가 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하며;

R<sup>4</sup>는 각 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, CN, N(R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>, 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄형 알킬 기 또는 3, 4, 5 또는 6 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 R<sup>5</sup> 라디칼로 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D로 대체될 수 있음), 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의 R<sup>5</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의 R<sup>4</sup> 치환기가 하나 이상의 R<sup>5</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하며;

칼로 치환될 수 있으며, 여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D 로 대체될 수 있음), 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의  $R^5$  라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 동일한 탄소 원자 또는 인접한 탄소 원자에 결합된 두 개의  $R^4$  치환기가 하나 이상의  $R^5$  라디칼로 치환될 수 있는 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성하는 것이 임의로 가능하며;

$R^5$ 는 각 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드로카르빌 라디칼, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리계 (여기에서 하나 이상의 수소 원자는 D 로 대체될 수 있고, 이는 1 내지 4 개의 탄소 원자를 각각 갖는 하나 이상의 알킬 기로 치환될 수 있음) 로 이루어지는 군으로부터 선택되고;

n은 0 또는 1 이며;

여기에서 화학식 (1) 에서 하나의  $R^2$  및 화학식 (2) 에서 탄소 원자에 결합된 하나의  $R^1$  및 하나의  $R^2$  는 단일 결합으로 대체됨.]

하기 화합물들은 제외되는, 화합물.

