



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2018년01월09일
(11) 등록번호 10-1816938
(24) 등록일자 2018년01월03일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 471/04 (2006.01) C07D 471/16 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2012-7011537
(22) 출원일자(국제) 2010년09월09일
심사청구일자 2015년09월07일
(85) 번역문제출일자 2012년05월03일
(65) 공개번호 10-2012-0087935
(43) 공개일자 2012년08월07일
(86) 국제출원번호 PCT/EP2010/005555
(87) 국제공개번호 WO 2011/042107
국제공개일자 2011년04월14일
(30) 우선권주장
10 2009 048 791.3 2009년10월08일 독일(DE)
(56) 선행기술조사문헌
JP08143862 A
JP2002193952 A
JP2003022893 A
KR1020100048447 A*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
메르크 파텐트 게엠베하
독일 64293 다름스타트 프랑크푸르터 스트라세 250
(72) 발명자
파르함 아미르 호싸인
독일 65929 프랑크푸르트 암 마인 프란츠-헨레-슈트라세 4
플롬 크리스토프
독일 60316 프랑크푸르트 암 마인 메리안슈트라세 23
(74) 대리인
특허법인코리아나

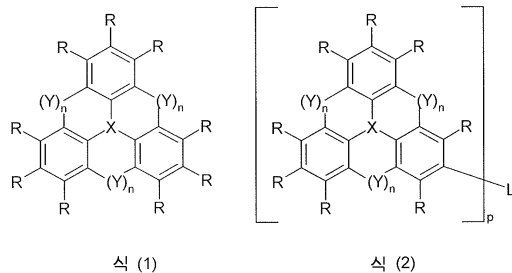
전체 청구항 수 : 총 12 항

심사관 : 지무근

(54) 발명의 명칭 **유기 전계발광 소자용 재료**

(57) 요약

본 발명은 하기 식 (1) 및 식 (2):



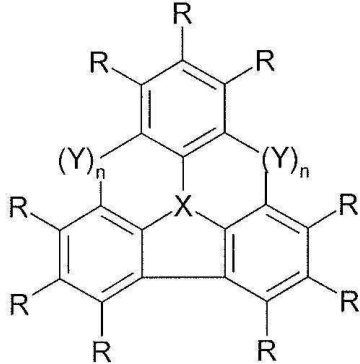
에 따른 화합물에 관한 것이며, 상기 화합물은 전자 소자, 특히 유기 전계발광 소자에서의 용도에 적합하다.

명세서

청구범위

청구항 1

하기 식 (16):



식 (16)

[식 중, 사용된 기호 및 지수에 하기가 적용된다:

X 는 N 이고;

Y 는 각 경우 동일 또는 상이하게 C(R)₂ 또는 화학적 결합이고, 단, 모든 2 개의 기 Y 가 동시에 단일 결합을 나타내지는 않고;

R 은 각 경우 동일 또는 상이하게 H, D, F, CN, N(Ar)₂, C(=O)Ar, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬기 또는 2 내지 10 개의 C 원자를 갖는 알케닐기 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 비-인접 CH₂ 기는 O 로 대체될 수 있고, 여기서 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 로 대체될 수 있음), 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음)으로 이루어지는 군으로부터 선택되고, 여기서 2 개 이상의 인접 치환기 R 은 임의로 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음) 을 형성할 수 있고;

R¹ 은 각 경우 동일 또는 상이하게 H, D, F, CN, N(Ar)₂, C(=O)Ar, 1 내지 40 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 40 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬기 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 비-인접 CH₂ 기는 O 로 대체될 수 있고, 여기서 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 로 대체될 수 있음), 5 내지 80 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있음) 으로 이루어지는 군으로부터 선택되고, 여기서 2 개 이상의 인접 치환기 R¹ 은 임의로 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있음) 을 형성할 수 있고;

R² 는 H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 지방족 탄화수소 라디칼, 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이 중 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 로 대체될 수 있음) 으로 이루어지는 군으로부터 선택되고;

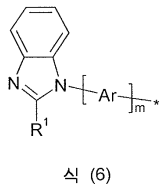
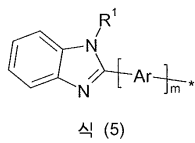
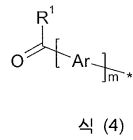
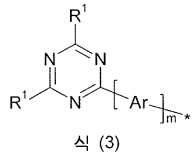
Ar 은 각 경우 동일 또는 상이하게 5-30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템

(이는 하나 이상의 비-방향족 라디칼 R^2 로 치환될 수 있음) 이고;

n 은 각 경우 동일 또는 상이하게 0 또는 1 이고, 여기서, $n = 0$ 인 경우, 수소 또는 라디칼 R^1 이 Y 대신 존재 하고, 단, 하나의 단위 당 1 개 이상의 지수 n 이 0 이지는 않음]

의 화합물로서,

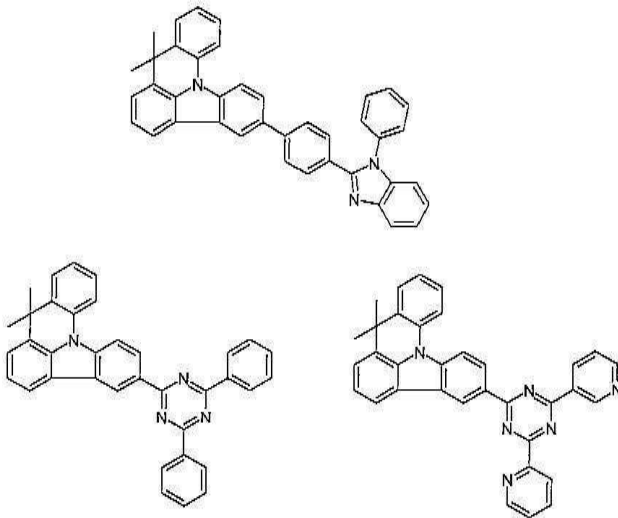
하나 이상의 라디칼 R 이 하기 식 (3) 내지 (6):



의 기 중 하나를 나타내는 것을 특징으로 하고,

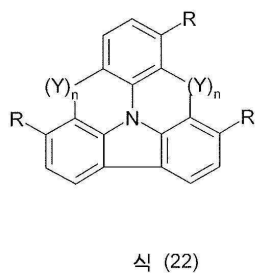
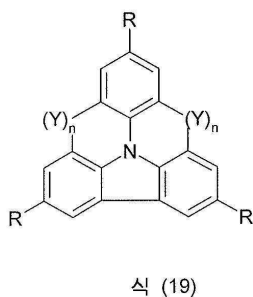
[식 중, 사용된 기호는 상기 제시된 의미를 갖고, 지수 m 은 0 또는 1 을 나타내고; 여기서 * 는 식 (3) 내지 (6) 의 기의 결합 위치를 표시함]

하기 화합물들은 본 청구 범위에서 제외되는 화합물:



청구항 2

제 1 항에 있어서, 하기 식 (19) 또는 (22):



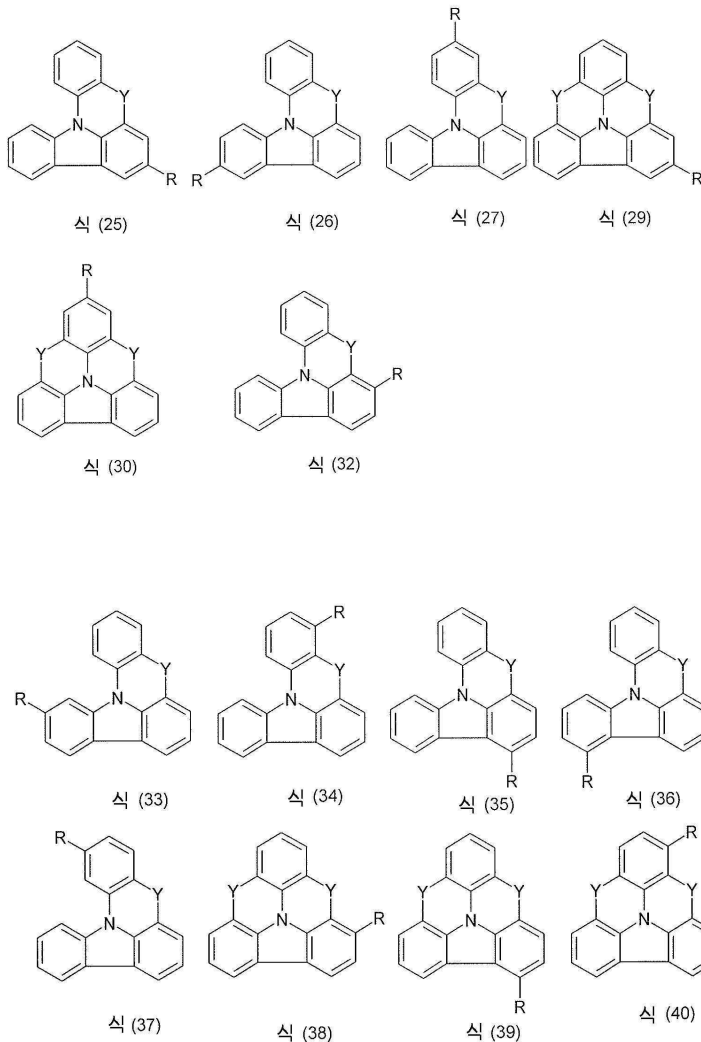
[식 중, Y 는 각 경우 동일 또는 상이하게 C(R)₂ 을 나타내거나, 또한, 하나의 Y 가 단일 결합을 나타내고, 미치환으로 도시된 C 원자는 또한 H 대신 D 로 치환될 수 있고, 다른 기호 및 지수는 상기 제시된 의미를 가짐] 의 화합물.

청구항 3

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서, Y 중 결합되어 있는 기 R 이 각 경우 동일 또는 상이하게 5 내지 20 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음) 으로부터 선택되는 것, 또는 하나의 라디칼 R 이, Y 가 C(R)₂ 를 나타내는 경우, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 알킬기를 나타내고, 이러한 탄소 원자에 결합된 다른 라디칼 R 이 5 내지 20 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음) 을 나타내는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 4

제 1 항에 있어서, 하기 식 (25), (26), (27), (29), (30), (32), (33), (34), (35), (36), (37), (38), (39) 또는 (40):



[식 중, R 은 식 (3) 내지 (6) 중 하나의 기를 나타내고, Y 는 C(R)₂ 을 나타내고, 여기서 C(R)₂ 기 중 결합되어 있는 R 은 각 경우 동일 또는 상이하게 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 알킬기 또는 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음) 을 나타내고; 추가로, 미치환으로 도시된 C 원자는 또한 H 대신 D 로 치환될 수 있고, 다른 기호 및 지수는

제 1 항에 제시된 의미를 가짐]

의 화합물.

청구항 5

제 1 항, 제 2 항 또는 제 4 항에 있어서, 식 (16), (19), (22), (25) 내지 (27), (29), (30) 및 (32) 내지 (40) 의 구조가 각각 중심 원자 X 또는 N 에 메타 또는 파라인 위치에 라디칼 R 을 함유하고, X 또는 N 의 메타 또는 파라-위치에 있는, 식 (3) 내지 (6) 의 기를 나타내지 않는 치환기 R 은 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 알킬기, 또는 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음) 을 나타내는 화합물.

청구항 6

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서, 식 (3) 내지 (6) 의 구조에서, 기호 R¹ 이 5 내지 20 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 10 개 초과와 방향족 고리 원자를 갖는 축합된 방향족 고리 시스템을 함유하지 않고, 각 경우 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있음) 을 나타내는 화합물.

청구항 7

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서, 식 (3) 내지 (6) 중 기 Ar 이 5 내지 20 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는, 10 개 초과와 방향족 고리 원자를 갖는 축합된 방향족 고리 시스템을 함유하지 않고, 하나 이상의 비-방향족 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음) 을 나타내는 화합물.

청구항 8

하기 반응 단계를 포함하는, 제 1 항 또는 제 2 항에 따른 화합물의 제조 방법:

- a) 기 R 대신 반응성 이탈기를 보유하는 기본 구조를 합성하는 단계; 및
- b) 커플링 반응에 의해, 기 R 을 도입하는 단계.

청구항 9

제 1 항에 따른 화합물을 하나 이상 포함하는 중합체로서, 여기서 상기 화합물에서부터 중합체까지 하나 이상의 결합이 존재하는 중합체.

청구항 10

삭제

청구항 11

유기 전계발광 소자 (OLED), 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 광학적 탐지기, 유기 광-수용체, 유기 전계-켄치 소자 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 "유기 플라즈몬 방출 소자" 로 이루어지는 군으로부터 선택되는, 제 1 항 또는 제 2 항에 따른 화합물 하나 이상 또는 제 9 항에 따른 중합체를 포함하는 전자 소자.

청구항 12

제 1 항에 따른 하나 이상의 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자로서, 제 1 항에 따른 화합물이 형광 또는 인광 이미터용 매트릭스 재료로서, 및/또는 정공-블록층에 및/또는 전자-수송층에 및/또는 전자-블록 또는 여기자-블록층에 및/또는 정공-수송층에 이용되는 것을 특징으로 하는, 유기 전계발광 소자.

청구항 13

삭제

청구항 14

제 6 항에 있어서, 식 (3) 내지 (6) 의 구조에서, 기호 R^1 이 페닐, 오르토-, 메타- 또는 파라-비페닐, 오르토-, 메타- 또는 파라-테르페닐, 콰테르페닐 또는 1- 또는 2-나프틸 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼 R^2 로 치환될 수 있음) 을 나타내는 화합물.

청구항 15

삭제

청구항 16

삭제

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 전자 소자, 특히 유기 전계발광 소자용 재료에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 반도체가 기능적 재료로서 이용되는 유기 전계발광 소자 (OLED) 의 구조가, 예를 들어, US 4539507, US 5151629, EP 0676461 및 WO 98/27136 에 기재되어 있다. 여기서 이용되는 발광 재료는 형광 대신 인광을 발하는 증가하는 유기금속 착물이다 (M. A. Baldo 등, *Appl. Phys. Lett.* **1999**, *75*, 4-6). 양자역학적 이유로, 유기금속 화합물을 인광 이미터로서 사용하여 에너지 및 전력 효율을 4 배까지 증가시키는 것이 가능하다. 그러나, 일반적으로, OLED 에서, 특히 또한 3중 방출 (인광) 을 발하는 OLED 에서, 예를 들어 효율, 작동 전압 및 특히 수명에 관하여 개선이 여전히 필요하다. 이는, 특히, 비교적 짧은-과장 범위에서, 예를 들어 녹색을 방출하는 OLED 에 적용된다.

[0003] 인광 OLED 의 특성이 이용되는 트리플렛 이미터에 의해서만 결정되는 것은 아니다. 특히, 사용되는 다른 재료, 예컨대 매트릭스 재료, 정공-블록 재료, 전자-수송 재료, 정공-수송 재료 및 전자- 또는 여기자-블록 재료도 여기서 특히 중요하다. 따라서 이들 재료의 개선도 OLED 특성을 현저히 개선할 수 있다. 또한 형광 OLED 용 이들 재료에서 개선이 여전히 필요하다.

[0004] 선행 기술에 따르면, 특히, 케톤 (예를 들어 WO 04/093207 또는 WO 10/006680 에 따름) 또는 포스핀 옥시드 (예를 들어 WO 05/003253 에 따름) 가 인광 이미터용 매트릭스 재료로서 사용된다. 그러나, 이들 매트릭스 재료를 다른 매트릭스 재료의 경우와 같이 사용시, 특히 소자의 효율 및 수명에 관하여, 개선이 여전히 필요하다.

[0005] 본 발명의 목적은 형광 또는 인광 OLED, 특히 인광 OLED 에서, 예를 들어 매트릭스 재료로서 또는 정공-수송/전자-블록 재료 또는 여기자-블록 재료로서 또는 전자-수송 또는 정공-블록 재료로서 사용하기에 적합한 화합물을 제공하는 것이다. 특히, 본 발명의 목적은 녹색- 및 적색-인광 OLED 에 적합한 매트릭스 재료를 제공하는 것이다.

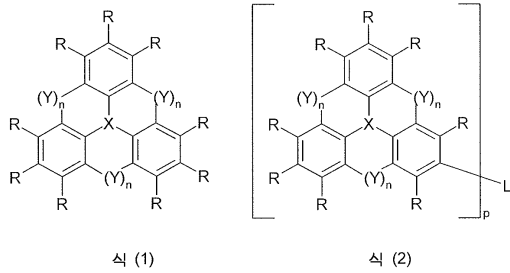
[0006] 놀랍게도, 이하에서 더욱 상세히 기술되는 특정 화합물이 이러한 목적을 달성하고, 유기 전계발광 소자에서, 특히 수명, 효율 및 작동 전압에 관하여, 현저한 개선을 초래함이 밝혀졌다. 이는, 특히 본 발명에 따른 화합물을 매트릭스 재료로서 사용시, 특히, 적색- 및 녹색-인광 전계발광 소자에 적용된다. 그러므로 본 발명은 이들 재료, 및 이러한 유형의 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자에 관한 것이다.

[0007] WO 07/031165 는 본 발명에 따른 화합물과 유사한 기본 구조를 갖는 가교된 트리아릴아민 구조를 개시한다. 그러나, 하기 본 발명에 따른 치환기로 치환된 화합물은 개시되어 있지 않다. 또한, 이들 화합물은 단지 이미터 또는 정공-수송 재료로서 기술되어 있으며, 인광 이미터용 매트릭스 재료로서 또는 전자-수송 재료로서는 기술되어 있지 않다.

[0008] US 2009/0136779 는 인광 이미터용 매트릭스로서 유사한 기본 구조를 갖는 화합물을 개시한다. 그러나, 하기 본 발명에 따른 치환기로 치환된 화합물은 개시되어 있지 않다.

발명의 내용

[0009] 본 발명은 하기 식 (1) 또는 식 (2):



[0010]

[0011] [식 중, 사용된 기호 및 지수에 하기가 적용된다:

[0012] X 는 각 경우 동일 또는 상이하게 N, P 또는 P=O 이고;

[0013] Y 는 각 경우 동일 또는 상이하게 C(R)₂, NR, O, S, C=O, C=S, C=NR, C=C(R)₂, Si(R)₂, BR, PR, AsR, SbR, BiR, P(=O)R, As(=O)R, Bi(=O)R, SO, SeO, TeO, SO₂, SeO₂, TeO₂ 또는 화학적 결합이고, 단, 하나의 단위 중 모든 3 개의 기 Y 가 동시에 단일 결합을 나타내지는 않고;

[0014] R 은 각 경우 동일 또는 상이하게 H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, N(Ar)₂, N(R¹)₂, C(=O)Ar, C(=O)R¹, P(=O)(Ar)₂, 1 내지 40 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 40 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 2 내지 40 개의 C 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 비-인접 CH₂ 기는 R¹C=CR¹, C≡C, Si(R¹)₂, Ge(R¹)₂, Sn(R¹)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR¹, P(=O)(R¹), SO, SO₂, NR¹, O, S 또는 CONR¹ 로 대체될 수 있고, 여기서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂ 로 대체될 수 있음), 5 내지 80 개, 바람직하게는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음), 또는 이들 시스템의 조합으로 이루어지는 군으로부터 선택되고, 여기서 2 개 이상의 인접 치환기 R 은 임의로 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음) 을 형성할 수 있고;

[0015] R¹ 은 각 경우 동일 또는 상이하게 H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, N(Ar)₂, N(R²)₂, C(=O)Ar, C(=O)R², P(=O)(Ar)₂, 1 내지 40 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 40 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 2 내지 40 개의 C 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 비-인접 CH₂ 기는 R²C=CR², C≡C, Si(R²)₂, Ge(R²)₂, Sn(R²)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR², P(=O)(R²), SO, SO₂, NR², O, S 또는 CONR² 로 대체될 수 있고, 여기서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂ 로 대체될 수 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있음), 또는 이들 시스템의 조합으로 이루어지는 군으로부터 선택되고, 여기서 2 개 이상의 인접 치환기 R¹ 은 임의로 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있음) 을 형성할 수 있고;

[0016] R² 는 H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 지방족 탄화수소 라디칼, 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자

를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이 중 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I 또는 CN 으로 대체될 수 있음) 으로 이루어지는 군으로부터 선택되고, 여기서 2 개 이상의 인접 치환기 R² 는 서로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성할 수 있고;

[0017] Ar 은 각 경우 동일 또는 상이하게 5-30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 비-방향족 라디칼 R² 로 치환될 수 있음) 이고; 여기서 동일한 N 원자 또는 P 원자에 결합된 2 개의 라디칼 Ar 은 단일 결합, 또는 N(R²), C(R²)₂ 또는 O 로부터 선택되는 가교에 의해 서로 가교될 수도 있고;

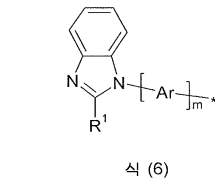
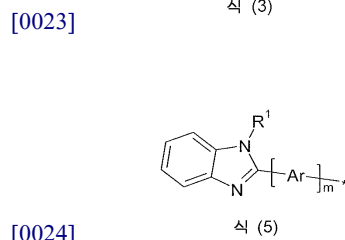
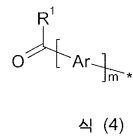
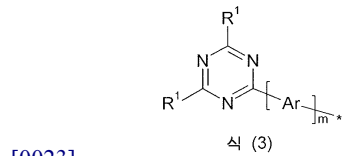
[0018] L 은 1 내지 40 개의 C 원자를 갖는 이가 또는 다가 직쇄 알킬렌, 알킬리덴, 알킬렌옥시 또는 티오알킬렌옥시기 또는 3 내지 40 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬렌, 알킬리덴, 알킬렌옥시 또는 티오알킬렌옥시기 또는 2 내지 40 개의 C 원자를 갖는 알케닐렌 또는 알키닐렌기 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 비-인접 CH₂ 기는 -R¹C=CR¹-, -C≡C-, Si(R¹)₂, Ge(R¹)₂, Sn(R¹)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR¹, P(=O)R¹, S=O, SO₂, -O-, -S- 또는 -CONR¹- 로 대체될 수 있고, 여기서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂ 로 대체될 수 있음), 또는 5 내지 80 개, 바람직하게는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 이가 이상의 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼 R¹, 또는 P(R¹)_{3-p}, P(=O)(R¹)_{3-p}, C(R¹)_{4-p}, Si(R¹)_{4-p}, N(Ar)_{3-p} 로 치환될 수 있음) 또는 이들 시스템 2, 3, 4 또는 5 개의 조합이거나; 또는 L 은 화학적 결합이고;

[0019] n 은 각 경우 동일 또는 상이하게 0, 1 또는 2 이고, 여기서, n = 0 인 경우, 수소 또는 라디칼 R¹ 이 Y 대신 존재하고, 단, 하나의 단위 당 2 개 이상의 지수 n 이 0 이지는 않음;

[0020] p 는 2, 3, 4, 5 또는 6 이고, 단, p 는 L 의 최대가 이하임]

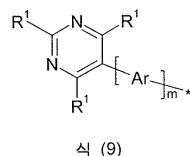
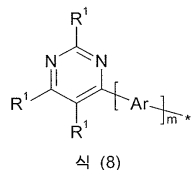
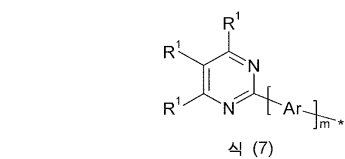
[0021] 의 화합물로서,

[0022] 하나 이상의 라디칼 R 이 하기 식 (3) 내지 (6):



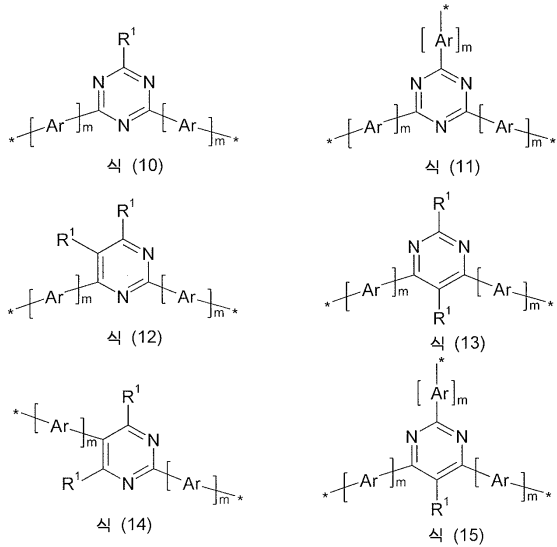
[0025] 의 기 중 하나를 나타내는 것

[0026] 및/또는 하나 이상의 기 Y 가 N-R 을 나타내고, 질소에 결합된 R 이 하기 식 (7) 내지 (9):



[0028] 의 기를 나타내는 것

[0029] 및/또는 하나 이상의 기 L 이 하기 식 (10) 내지 (15):



[0030]

[0031] [식 중, 사용된 기호는 상기 제시된 의미를 갖고, 지수 m 은 0 또는 1 을 나타내고; 여기서 * 는 식 (3) 내지 (15) 의 기의 결합 위치를 표시함]

[0032] 의 기를 나타내는 것을 특징으로 하는 화합물에 관한 것이다.

[0033] 식 (3) 내지 (6) 의 기는 여기서 식 (1), (2) 의 화합물의 페닐 고리 중 하나에 또는 기 Y 에 결합될 수 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0034] 본 발명의 의미에서 아릴기는 6 내지 60 개의 C 원자를 함유하고; 본 발명의 의미에서 헤테로아릴기는 2 내지 60 개의 C 원자 및 하나 이상의 헤테로원자를 함유하고, 단, C 원자와 헤테로원자의 합계는 5 개 이상이다. 헤테로원자는 바람직하게는 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 여기서 아릴기 또는 헤테로아릴기는 단순 방향족 고리, 즉 벤젠, 또는 단순 헤테로방향족 고리, 예를 들어 피리딘, 피리미딘, 티오펜 등, 또는 축합된 (융합된) 아릴 또는 헤테로아릴기, 예를 들어 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 퀴놀린, 이소퀴놀린 등을 의미하는 것으로 여겨진다. 단일 결합에 의해 서로 연결된 방향족 고리들, 예컨대, 예를 들어, 비페닐은, 대조적으로, 아릴 또는 헤테로아릴기가 아니라, 방향족 고리 시스템으로 언급된다.

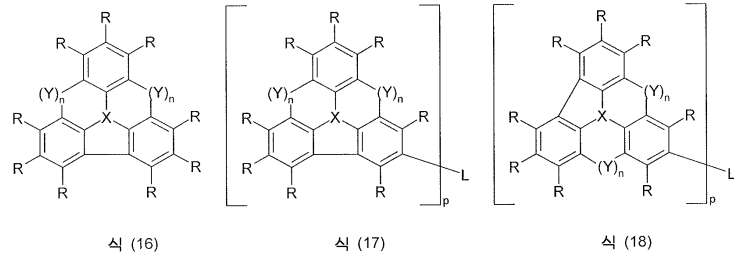
[0035] 본 발명의 의미에서 방향족 고리 시스템은 고리 시스템 중 6 내지 80 개의 C 원자를 함유한다. 본 발명의 의미에서 헤테로방향족 고리 시스템은 고리 시스템 중 2 내지 60 개의 C 원자 및 하나 이상의 헤테로원자를 함유하고, 단, C 원자와 헤테로원자의 합계는 5 개 이상이다. 헤테로원자는 바람직하게는 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 본 발명의 의미에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 반드시 아릴 또는 헤테로아릴기만 함유해야 하는 것은 아니고, 그 안에서 또한 복수의 아릴 또는 헤테로아릴기가, 예를 들어, C, N 또는 O 원자와 같은 비-방향족 단위 (바람직하게는 H 이외의 원자가 10% 미만) 에 의해 연결되어 있을 수 있는 시스템을 의미하는 것으로 의도된다. 따라서, 2 개 이상의 아릴기가, 예를 들어, 짧은 알킬기에 의해 개재되어 있는 시스템과 같이, 예를 들어, 플루오렌, 9,9'-스피로비플루오렌, 9,9-디아릴플루오렌, 트리아릴아민, 디아릴 에테르, 스티벤 등과 같은 시스템도 본 발명의 의미에서 방향족 고리 시스템으로 여겨지는 것으로 의도된다.

[0036] 본 발명의 목적을 위해, 전형적으로 1 내지 40 개 또는 또한 1 내지 20 개의 C 원자를 함유할 수 있고, 그 안에서 또한 각각의 H 원자 또는 CH₂ 기가 상기 언급된 기로 치환될 수 있는, 지방족 탄화수소 라디칼 또는 알킬기 또는 알케닐 또는 알킬닐기는 바람직하게는 라디칼 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, s-부틸, t-부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, s-펜틸, 네오펜틸, 시클로펜틸, n-헥실, 네오헥실, 시클로헥실, n-헵틸, 시클로헵틸, n-옥틸, 시클로옥틸, 2-에틸헥실, 트리플루오로메틸, 펜타플루오로에틸, 2,2,2-트리플루오로에틸, 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 시클로펜테닐, 헥세닐, 시클로헥세닐, 헵테닐, 시클로헵테닐, 옥테닐, 시클로옥테닐, 에티닐, 프로피닐, 부티닐, 펜티닐, 헥시닐, 헵티닐 및 옥티닐을 의미하는 것으로 여겨진다. 1 내지 40 개의 C 원자를 갖는 알콕시기는 바람직하게는 메톡시, 트리플루오로메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, s-부톡시, t-부톡시, n-펜톡시, s-펜톡시, 2-메틸부톡시, n-헥속시, 시클로헥실 옥시, n-헵톡시, 시클로헵틸옥시, n-옥틸옥시, 시클로옥틸옥시, 2-에틸헥실옥시, 펜타플루오로에톡시 및 2,2,2-

트리플루오로에톡시를 의미하는 것으로 여겨진다. 1 내지 40 개의 C 원자를 갖는 티오알킬기는, 특히, 메틸티오, 에틸티오, n-프로필티오, i-프로필티오, n-부틸티오, i-부틸티오, s-부틸티오, t-부틸티오, n-펜틸티오, s-펜틸티오, n-헥실티오, 시클로헥실티오, n-헵틸티오, 시클로헵틸티오, n-옥틸티오, 시클로옥틸티오, 2-에틸헥실티오, 트리플루오로메틸티오, 펜타플루오로에틸티오, 2,2,2-트리플루오로에틸티오, 에테닐티오, 프로페닐티오, 부테닐티오, 펜테닐티오, 시클로펜테닐티오, 헥세닐티오, 시클로헥세닐티오, 헵테닐티오, 시클로헵테닐티오, 옥테닐티오, 시클로옥테닐티오, 에티닐티오, 프로피닐티오, 부티닐티오, 펜티닐-티오, 헥시닐티오, 헵티닐티오 또는 옥티닐티오를 의미하는 것으로 여겨진다. 일반적으로, 본 발명에 따른 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기는 직쇄, 분지형 또는 고리형일 수 있고, 여기서 하나 이상의 비-인접 CH₂ 기는 상기 언급된 기로 대체될 수 있고; 추가로, 하나 이상의 H 원자는 또한 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂, 바람직하게는 F, Cl 또는 CN, 더욱 바람직하게는 F 또는 CN, 특히 바람직하게는 CN 으로 대체될 수 있다.

[0037] 각 경우 상기 언급된 라디칼 R² 또는 탄화수소 라디칼로 또한 치환될 수 있고 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 상의 임의의 원하는 위치를 통해 연결되어 있을 수 있는 5 - 80 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은, 특히, 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센, 페난트렌, 피렌, 크리센, 페릴렌, 플루오란텐, 나프타센, 펜타센, 벤조피렌, 비페닐, 비페닐렌, 테르페닐, 트리페닐렌, 플루오렌, 스피로비플루오렌, 디히드로페난트렌, 디히드로피렌, 테트라히드로피렌, 시스- 또는 트랜스-인데노플루오렌, 시스- 또는 트랜스-인데노카르바졸, 시스- 또는 트랜스-인돌로카르바졸, 트룩센, 이소트룩센, 스피로트룩센, 스피로이소트룩센, 푸란, 벤조푸란, 이소벤조푸란, 디벤조푸란, 티오펜, 벤조티오펜, 이소벤조티오펜, 디벤조티오펜, 피롤, 인돌, 이소인돌, 카르바졸, 피리딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 아크리딘, 페난트리딘, 벤조-5,6-퀴놀린, 벤조-6,7-퀴놀린, 벤조-7,8-퀴놀린, 페노티아진, 페녹사진, 피라졸, 인다졸, 이미다졸, 벤지미다졸, 나프티미다졸, 페난트리미다졸, 피리디미다졸, 피라진이미다졸, 퀴놀살린이미다졸, 옥사졸, 벤족사졸, 나프족사졸, 안트룩사졸, 페난트룩사졸, 이속사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 헥사아자트리페닐렌, 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-테트라아자페릴렌, 피라진, 페나진, 페녹사진, 페노티아진, 플루오루빈, 나프티리딘, 아자카르바졸, 벤조카르볼린, 페난트롤린, 1,2,3-트리아졸, 1,2,4-트리아졸, 벤조트리아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아졸, 1,2,5-옥사디아졸, 1,3,4-옥사디아졸, 1,2,3-티아디아졸, 1,2,4-티아디아졸, 1,2,5-티아디아졸, 1,3,4-티아디아졸, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 1,2,3-트리아진, 테트라졸, 1,2,4,5-테트라진, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,3,5-테트라진, 퓨린, 프테리딘, 인돌리진 및 벤조티아디아졸에서 유래된 기 또는 이들 시스템의 조합에서 유래된 기를 의미하는 것으로 여겨진다.

[0038] 발명의 바람직한 구현예에서, 기 Y 는 단일 결합을 나타낸다. 바람직한 화합물은 따라서 하기 식 (16), (17) 및 (18):



[0039] [식 중, 사용된 기호 및 지수는 상기 제시된 의미를 가짐]
 [0040] 의 화합물이다.

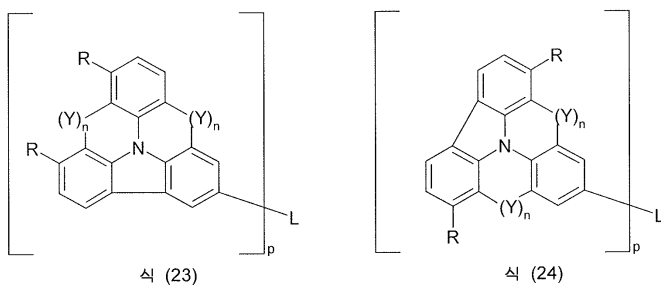
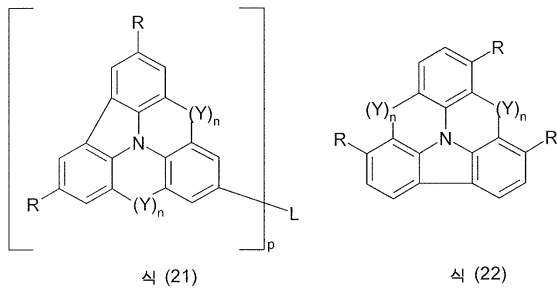
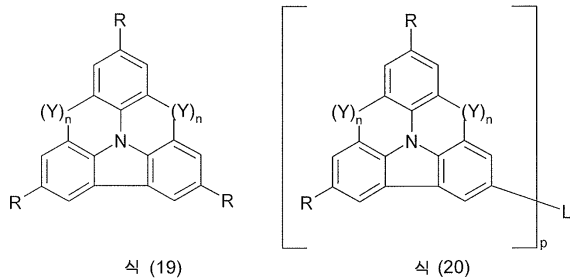
[0042] 식 (1), (2) 및 (16) 내지 (18) 의 화합물의 바람직한 구현예에서, X 는 각 경우 동일 또는 상이하게 N 또는 P 를 나타낸다. X 는 특히 바람직하게는 N 을 나타낸다.

[0043] 식 (1), (2) 및 (16) 내지 (18) 의 화합물의 추가의 바람직한 구현예에서, Y 는 각 경우 동일 또는 상이하게 C(R)₂, NR, O, S, C=O 또는 화학적 결합을 나타낸다. 식 (1) 및 (2) 의 화합물에서, 1 개의 기 Y 는 바람직하게는 화학적 결합을 나타내고 다른 기 Y 는 바람직하게는 각 경우 동일 또는 상이하게 C(R)₂, NR, O, S, C=O 또는 화학적 결합을 나타낸다. 식 (16) 내지 (18) 의 화합물에서, 기 Y 는 각 경우 동일 또는 상이하게 C(R)₂, NR, O, S, C=O 또는 화학적 결합을 나타낸다. 식 (1) 및 (2) 의 화합물에서, 모든 3 개의 기 Y 가

동시에 화학적 결합을 나타내지는 않고, 식 (16) 내지 (18) 의 화합물에서, 모든 2 개의 기 Y 가 동시에 화학적 결합을 나타내지는 않는다. 화학적 결합이 아닌 기 Y 는 특히 바람직하게는 각 경우 동일 또는 상이하게 C(R)₂, NR, O 또는 S, 매우 특히 바람직하게는 C(R)₂ 또는 NR, 특히 C(R)₂ 를 나타낸다.

[0044] Y 중 결합되어 있는 기 R 은 바람직하게는 각 경우 동일 또는 상이하게 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 알킬기 또는 5 내지 20 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음) 으로 이루어지는 군으로부터 선택된다. 발명의 특히 바람직한 구현예에서, Y 중 결합되어 있는 기 R 은 각 경우 동일 또는 상이하게 5 내지 20 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음) 으로부터 선택된다. 추가로 특히 바람직한 구현예에서, 하나의 라디칼 R 은, Y 가 C(R)₂ 를 나타내는 경우, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 알킬기이고, 이러한 탄소에 결합된 다른 라디칼 R 은 5 내지 20 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음) 이다.

[0045] 하기 식 (19) 내지 (24):

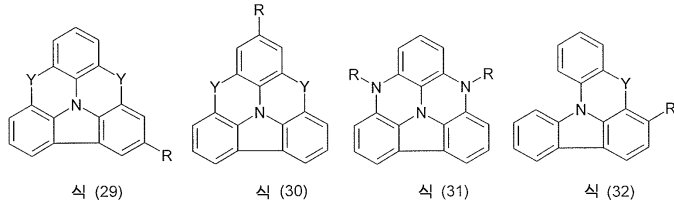
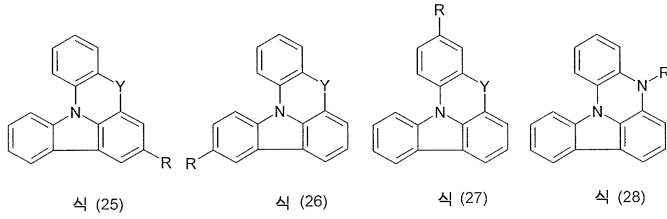


[0047] [식 중, Y 는 각 경우 동일 또는 상이하게 O, S, C(R)₂ 또는 NR, 바람직하게는 C(R)₂ 또는 NR 을 나타내거나, 또한, 하나의 Y 가 단일 결합을 나타내고, 미치환으로 도시된 C 원자는 또한 H 대신 D 로 치환될 수 있고, 다른 기호 및 지수는 상기 제시된 의미를 가짐] 의 화합물이 특히 바람직하다. Y 에 결합되어 있는 라디칼 R 은 바람직하게는 상기 제시된 바람직한 의미를 갖는다.

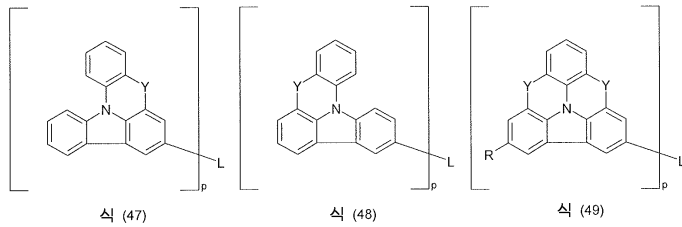
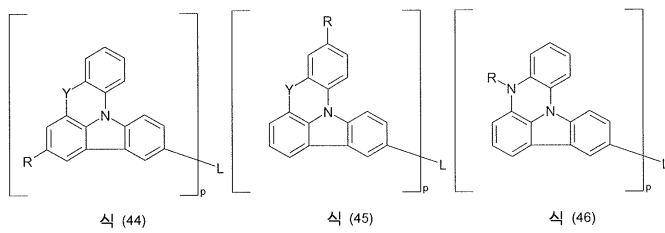
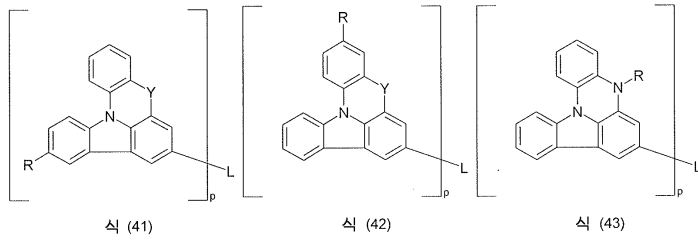
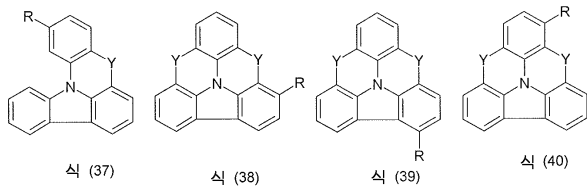
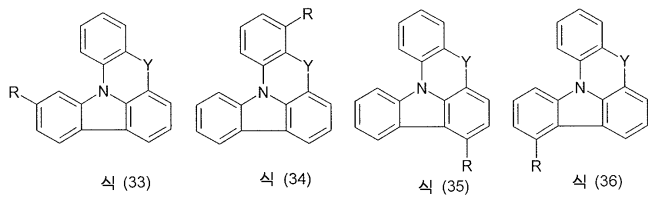
[0049] 발명의 추가의 바람직한 구현예에서, L 은 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 이가 또는 다가 직쇄 알킬렌기 또는 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬렌기 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 로 대체될 수 있음), 또는 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 이가 이상의 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음) 이거나; 또는 L 은 화학적 결합이거나; 또는 L 은 식 (10) 내지 (15) 중 하나의 기이다.

- [0050] 발명의 바람직한 구현예에서, R 은 각 경우 동일 또는 상이하게 H, D, F, Cl, Br, CN, N(Ar)₂, C(=O)Ar, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기 또는 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬 또는 알콕시기 또는 2 내지 10 개의 C 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 비-인접 CH₂ 기는 O 로 대체될 수 있고, 여기서 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 로 대체될 수 있음), 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음), 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음), 또는 이들 시스템의 조합으로 이루어지는 군으로부터 선택된다. 여기서 하나 이상의 라디칼 R 은 상기 정의된 바와 같은 식 (3) 내지 (9) 의 기이다.
- [0051] 발명의 특히 바람직한 구현예에서, R 은 각 경우 동일 또는 상이하게 H, D, F, Cl, Br, CN, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 고리형 알킬기 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 로 대체될 수 있음), 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음), 또는 이들 시스템의 조합으로 이루어지는 군으로부터 선택된다. 상기 기술된 바와 같이, 여기서 하나 이상의 치환기 R 은 식 (3) 내지 (9) 의 기로부터 선택된다.
- [0052] 발명의 추가의 바람직한 구현예에서, 식 (1), (2) 및 (16) 내지 (18) 의 화합물에서 식 (3) 내지 (6) 의 기를 나타내지 않고 Y 에 결합되어 있지 않은 기호 R 은 H 또는 D 를 나타낸다.
- [0053] 진공 증발에 의해 가공되는 화합물의 경우, 알킬기는 바람직하게는 4 개 이하의 C 원자, 특히 바람직하게는 1 개 이하의 C 원자를 갖는다. 용액으로부터 가공되는 화합물의 경우, 10 개 이하의 C 원자를 갖는 알킬기로 치환된 또는 올리고아릴렌기, 예를 들어 오르토-, 메타-, 파라- 또는 분지형 테르페닐기 또는 콰테르페닐기로 치환된 화합물이 또한 적합하다.
- [0054] 추가의 바람직한 구현예에서, 식 (1) 또는 (2) 의 화합물 중 2 개의 지수 n 은 1 이고, 세번째 지수 n 은 0 또는 1 이고, 여기서 n = 0 은 수소 또는 라디칼 R¹ 이 Y 대신 존재함을 의미한다. 식 (16) 내지 (24) 의 화합물에서 하나의 지수 n = 1 이고 두번째 지수 n = 0 또는 1 인 경우가 추가로 더욱 바람직하다. 이는 각 경우 식 (1) 의 단위와 관련된다. 식 (2) 의 화합물에서, 이는 L 에 결합되어 있는 각 부분에 상응하여 적용된다.
- [0055] 발명의 추가의 바람직한 구현예에서, 지수 p = 2 또는 3, 특히 바람직하게는 2 이다.
- [0056] 상기 기술된 바와 같이, 하나 이상의 라디칼 R 이 상기 언급된 식 (3) 내지 (6) 의 기를 나타내거나 또는 또한 식 (7) 내지 (9) [식 중, Y = NR] 의 기를 나타내거나, 또는 L 이 식 (10) 내지 (15) 의 기를 나타낸다. 이러한 기 R 은 기본 구조의 페닐 고리 중 하나에 또는 기 Y 에 결합되어 있을 수 있다. 발명의 바람직한 구현예에서, 식 (3) 내지 (6) 의 기 R 은 기본 구조의 페닐 고리 중 하나에 결합되어 있다. 발명의 추가의 바람직한 구현예에서, 식 (3) 내지 (9) 에서 Y 가 N(R) 을 나타내는 경우 기 R 은 기 Y 에 결합되어 있다.
- [0057] 추가의 바람직한 구현예에서, 1 또는 2 개의 기 R, 특히 바람직하게는 정확하게는 1 개의 기 R 이 식 (3) 내지 (6) 의 기를 나타낸다.

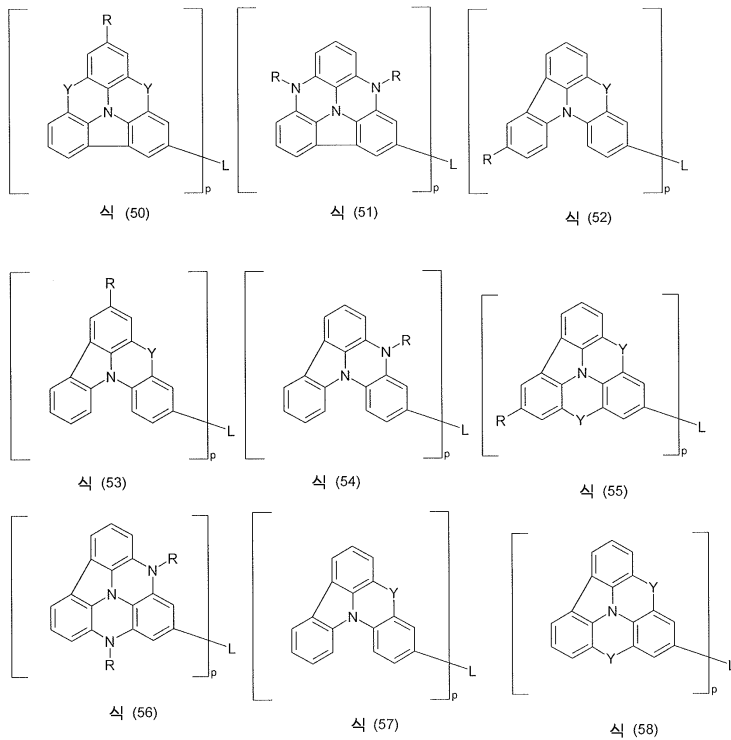
[0058] 그러므로 하기 식 (25) 내지 (58):



[0059]



[0060]



[0061]

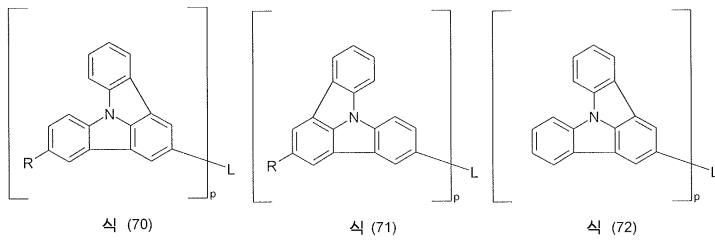
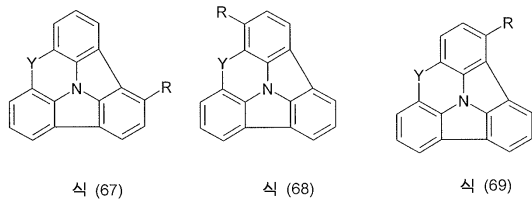
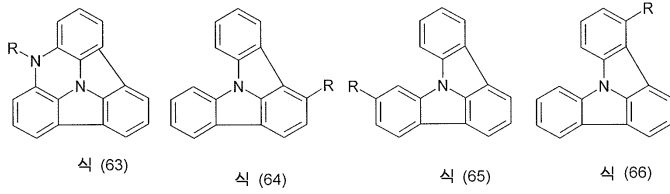
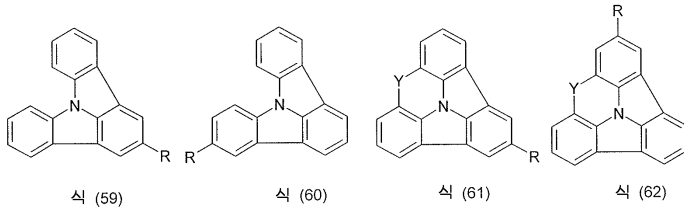
[0062]

[식 중, R 은 식 (3) 내지 (6) 중 하나의 기 또는, 식 (28), (31), (42), (46), (51), (54) 및 (56) 에서, 또한 식 (7) 내지 (9) 중 하나의 기를 나타내고, 여기서 식 (47), (48), (57) 및 (58) 중 L 은 식 (10) 내지 (15) 중 하나의 기를 나타내고, Y 는 각 경우 동일 또는 상이하게, 바람직하게는 동일하게 C(R)₂ 또는 NR 을 나타내고, 여기서 C(R)₂ 또는 NR 기 중 결합되어 있는 R 은 각 경우 동일 또는 상이하게 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 알킬기 또는 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음) 을 나타내고; 추가로, 미치환으로 도시된 C 원자는 또한 H 대신 D 로 치환될 수 있고, 다른 기호 및 지수는 상기 제시된 의미를 가짐]

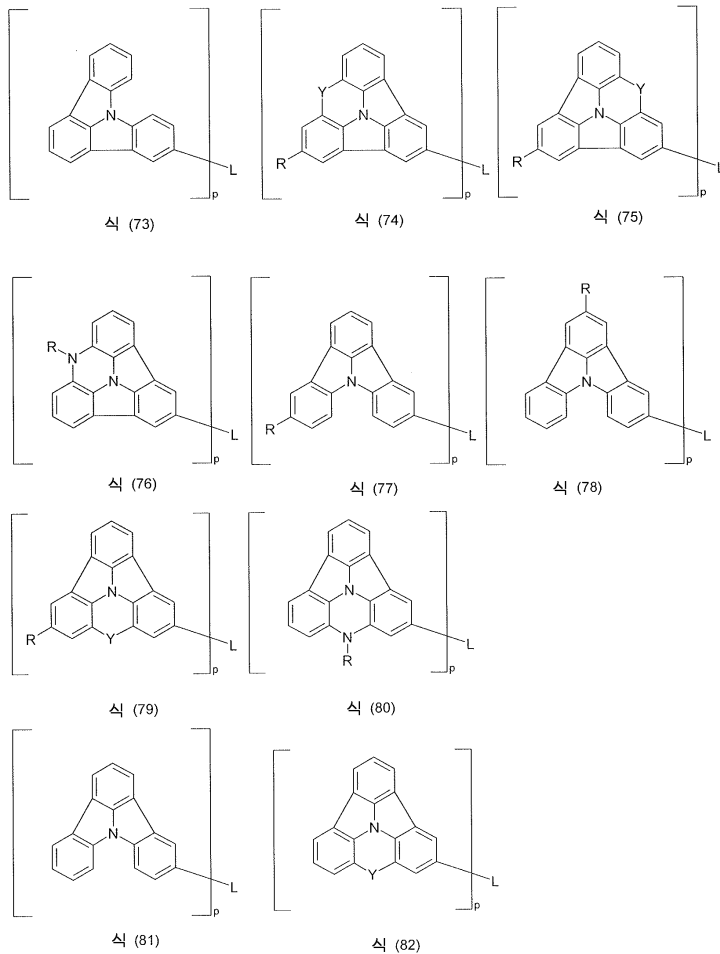
[0063]

의 화합물이 특히 바람직하다. 특히, C(R)₂ 또는 NR 기 중 결합되어 있는 R 은 바람직하게는 상기 언급된 바람직한 기를 나타낸다.

[0064] 또한 식 (1) 및 (2) [식 중, 2 개의 기 Y 가 단일 결합을 나타냄] 의 화합물, 즉 하기 식 (59) 내지 (82):



[0065]



[0066]

[0067]

[식 중, R 은 식 (3) 내지 (6) 중 하나의 기를 나타내거나 또는, 식 (63) 및 (76) 에서, 또한 식 (7) 내지 (9) 중 하나의 기를 나타내고, 여기서 식 (72), (73), (81) 및 (82) 중 L 은 식 (10) 내지 (15) 중 하나의 기를 나타내고, Y 는 각 경우 동일 또는 상이하게, 바람직하게는 동일하게 C(R)₂ 또는 NR 을 나타내고, 여기서 C(R)₂ 또는 NR 기 중 결합되어 있는 R 은 각 경우 동일 또는 상이하게 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 알킬기 또는 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음) 을 나타내고; 추가로, 미치환으로 도시된 C 원자는 또한 H 대신 D 로 치환될 수 있고, 다른 기호 및 지수는 상기 제시된 의미를 가짐]

[0068]

의 화합물이 바람직하다.

[0069]

발명의 추가의 바람직한 구현예에서, 식 (16) 내지 (82) 의 구조는 각각 중심 원자 X 에 파라인, 즉, 특히, 질소에 파라인 위치에 H 또는 D 가 아닌 라디칼 R 을 함유한다. X 의 파라-위치에 있는, 식 (3) 내지 (6) 의 기를 나타내지 않는 치환기 R 은 특히 바람직하게는 1 내지 10 개의 C 원자, 특히 1 내지 4 개의 C 원자를 갖는 알킬기, 또는 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음), 특히 페닐기 (이는 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음) 를 나타낸다. 이러한 선호는 본 발명에 따른 화합물에 대한 선별적 합성적 접근을 제공한다.

[0070]

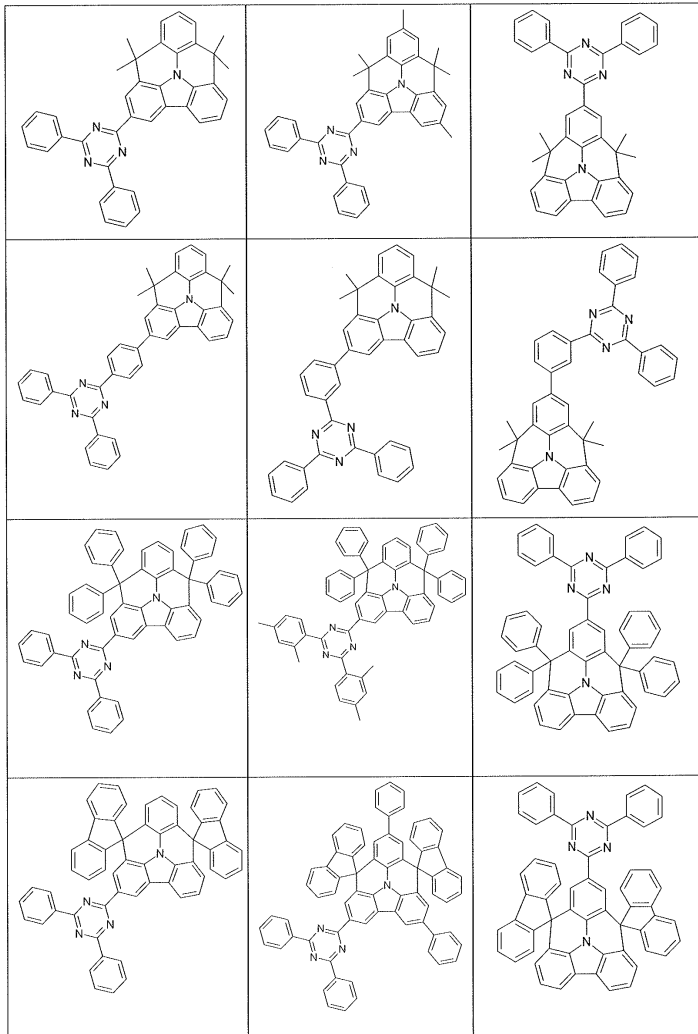
식 (3) 내지 (15) 의 구조에서, 기호 R¹ 은 바람직하게는 5 내지 20 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 10 개 초과인 방향족 고리 원자를 갖는 축합된 방향족 고리 시스템을 함유하지 않고, 각 경우 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있음), 특히 바람직하게는 페닐, 오르토-, 메타- 또는 파라-비페닐, 오르토-, 메타- 또는 파라-테르페닐, 콰테르페닐 또는 1- 또는 2-나프틸 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있음) 을 나타낸다.

[0071]

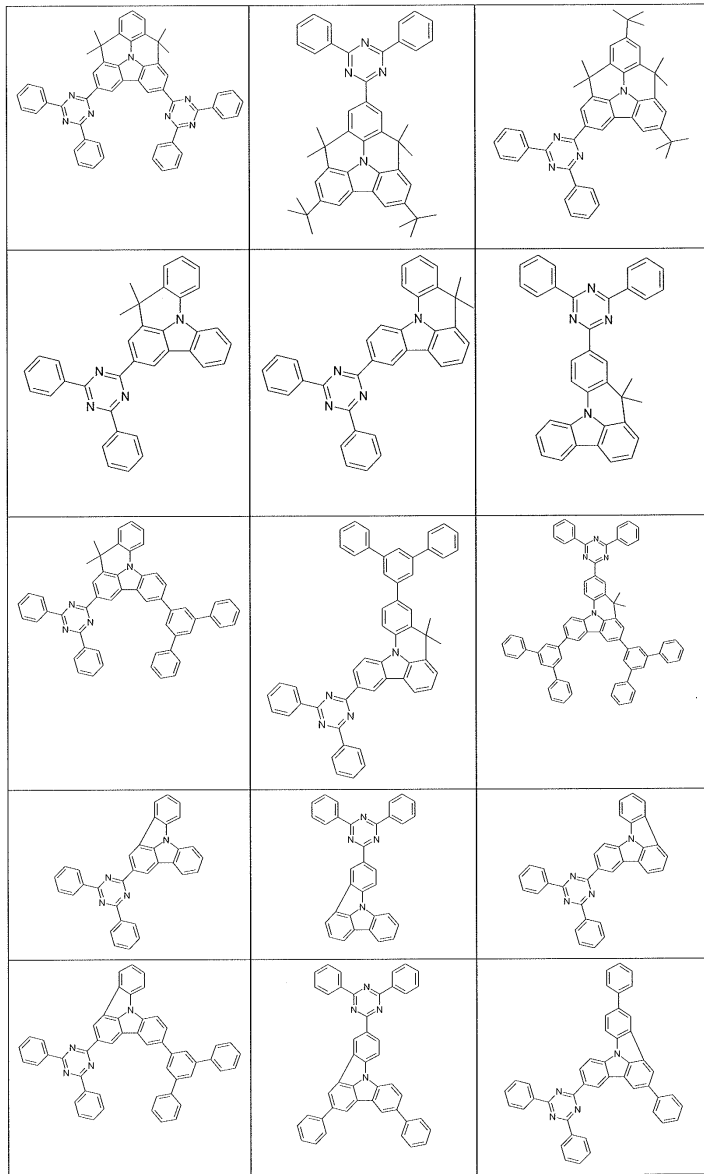
발명의 추가의 바람직한 구현예에서, 식 (3) 내지 (15) 중 기 Ar 은 5 내지 20 개의 방향족 고리 원자를 갖는

방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는, 10 개 초과 방향족 고리 원자를 갖는 축합된 방향족 고리 시스템을 함유하지 않고, 하나 이상의 비-방향족 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있음) 을 나타낸다. 식 (3) 내지 (15) 중 Ar 은 특히 바람직하게는 페닐, 오르토-, 메타- 또는 파라-비페닐, 오르토-, 메타- 또는 파라-테르페닐 또는 콰테르페닐 (이들은 각각 하나 이상의 비-방향족 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있으나, 바람직하게는 치환되지 않음) 을 나타낸다.

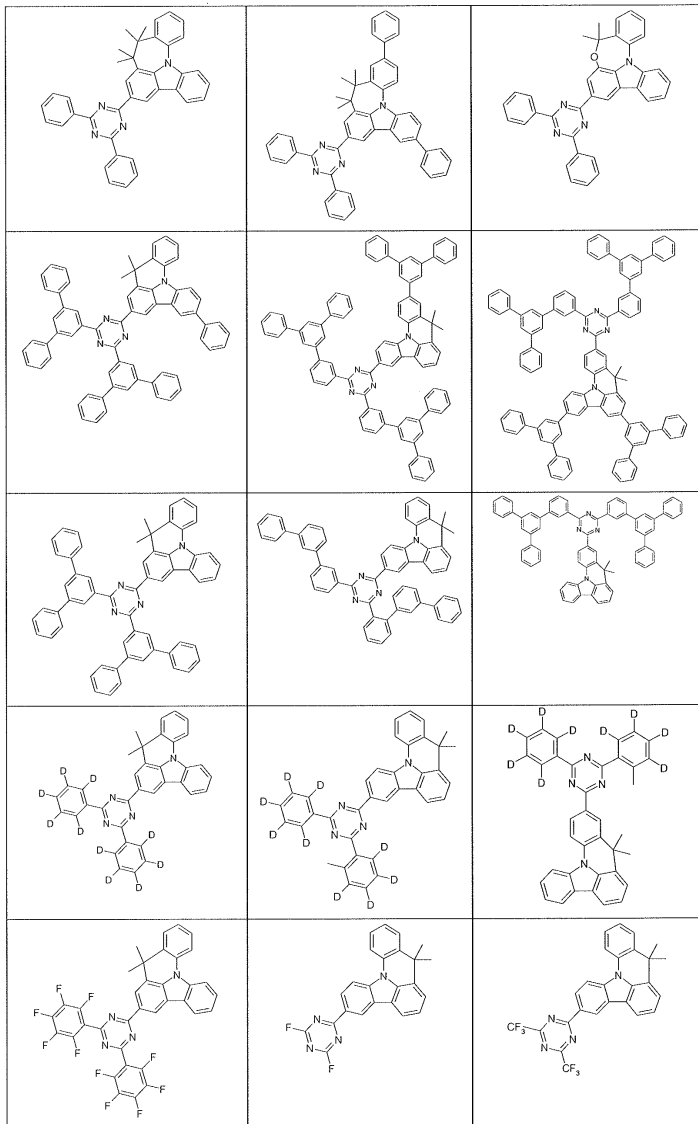
[0072] 상기 지시된 구현예에 따른 바람직한 화합물 또는 바람직하게는 유기 전자 소자에 이용될 수 있는 화합물의 예는 하기 구조의 화합물이다.

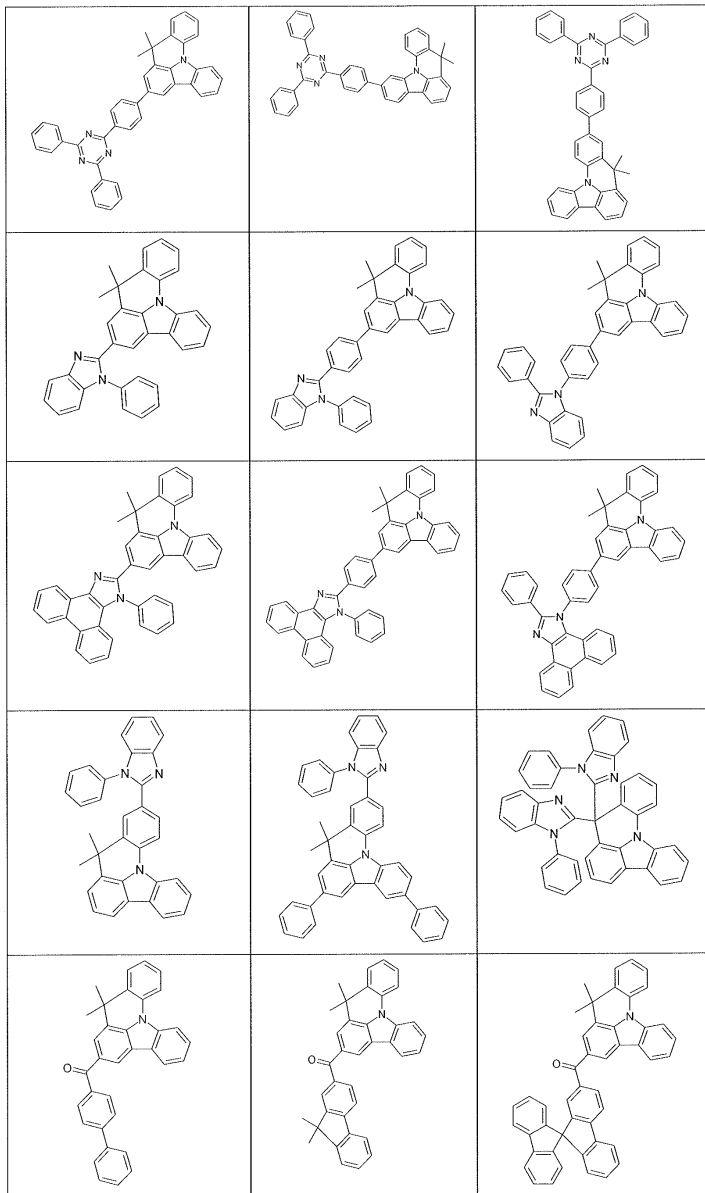


[0073]

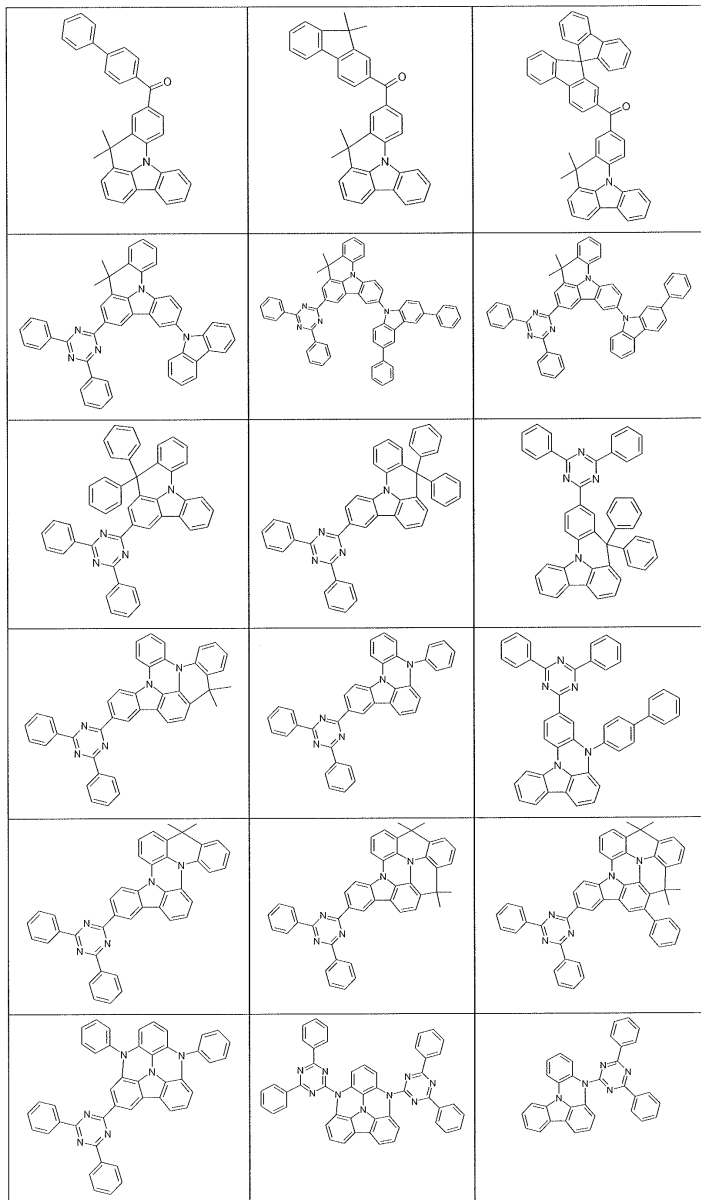


[0074]

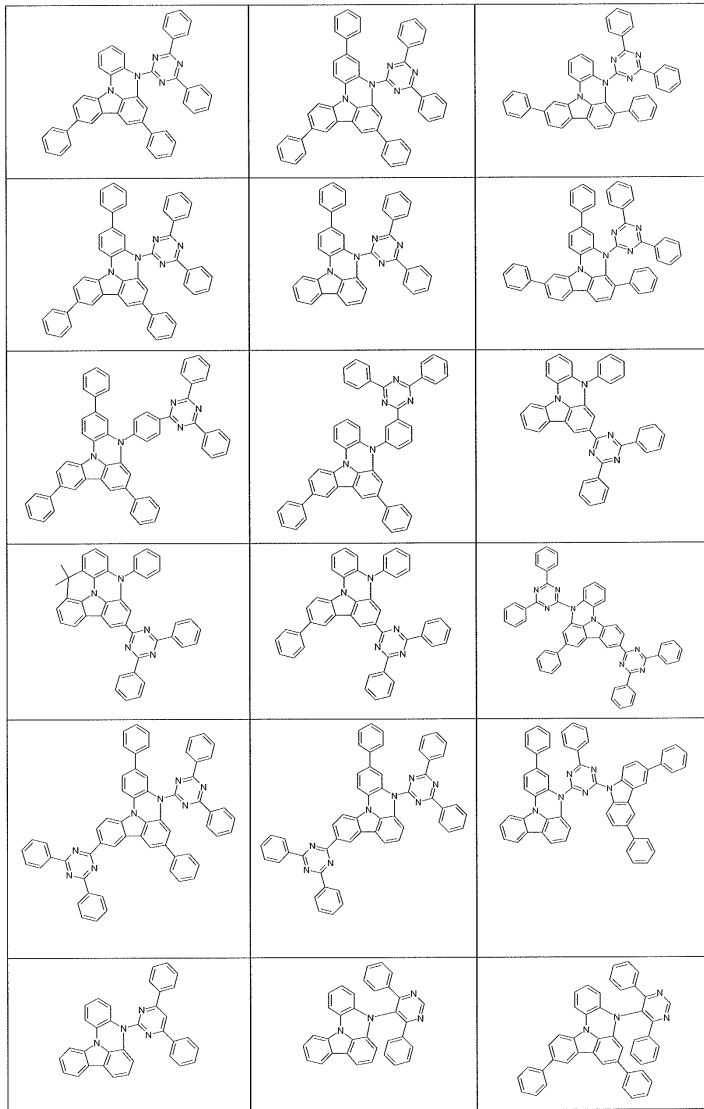




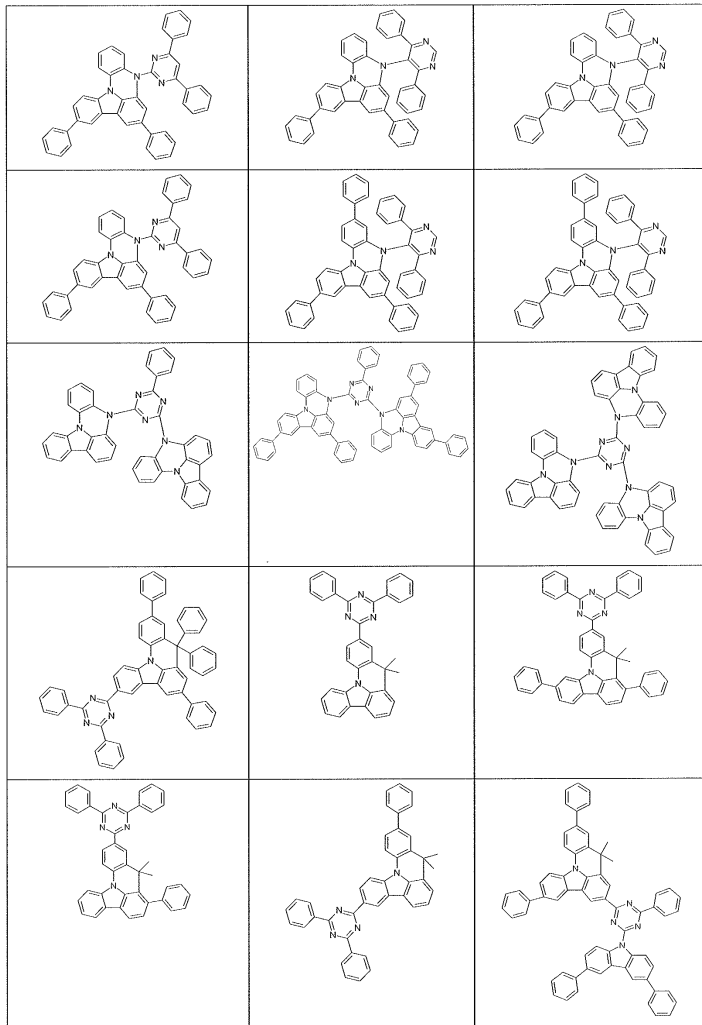
[0076]



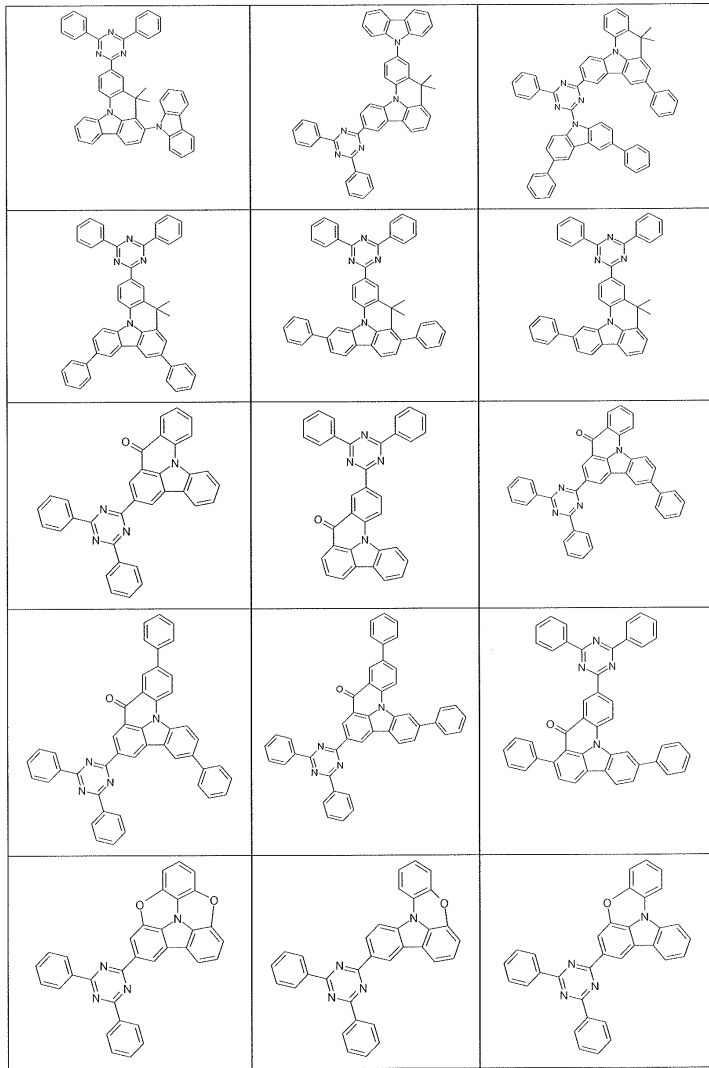
[0077]



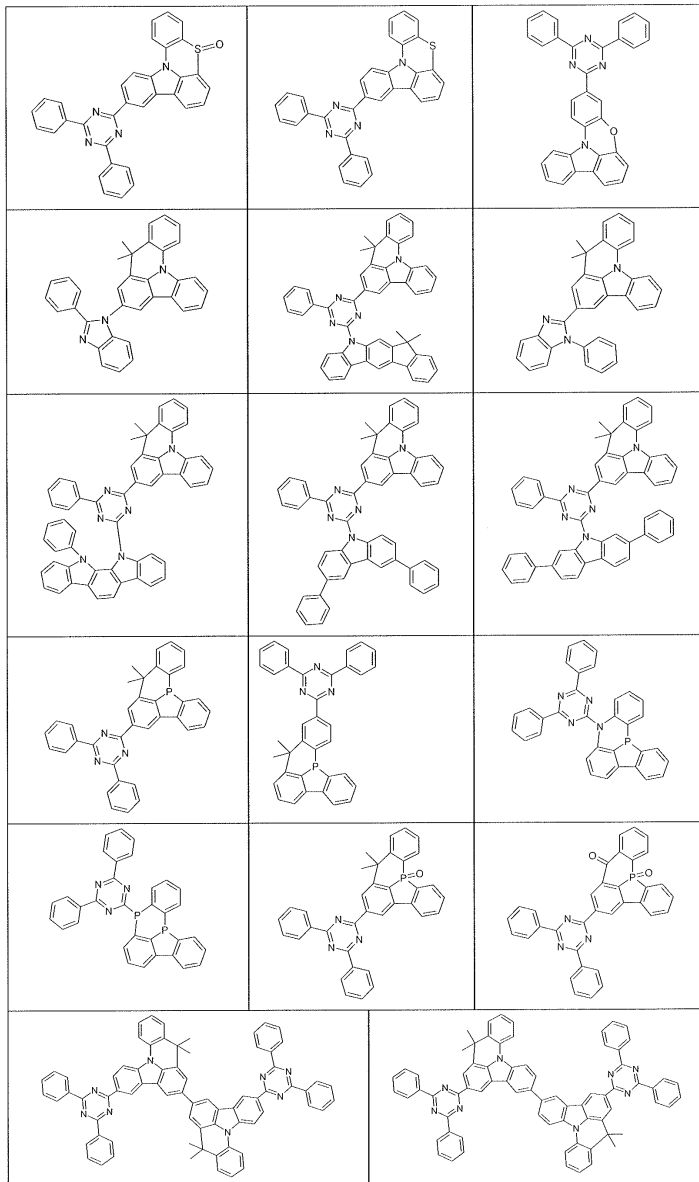
[0078]



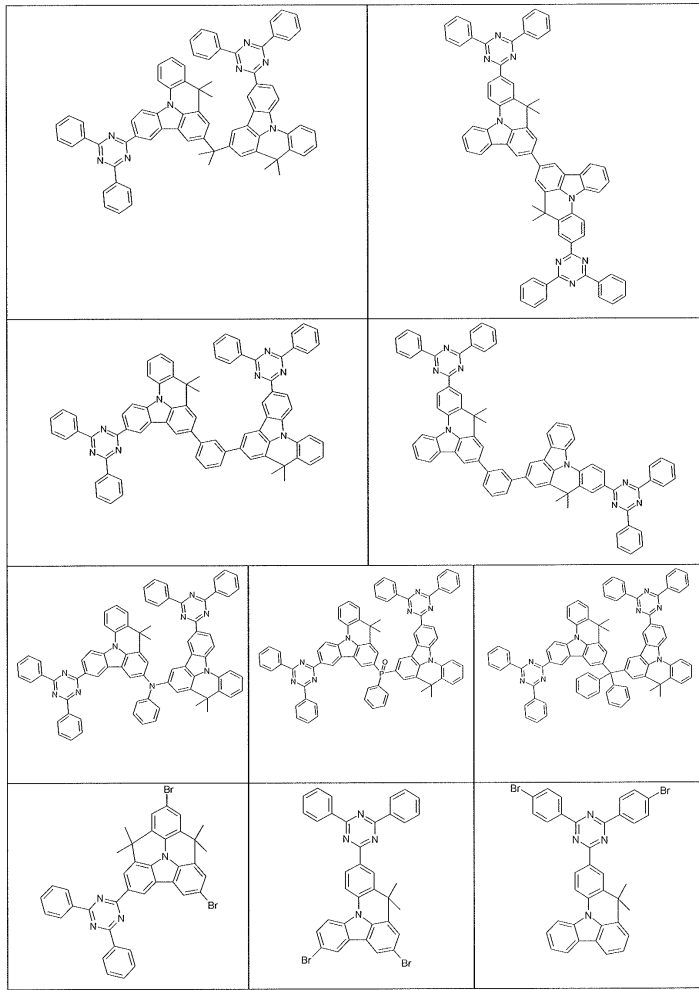
[0079]



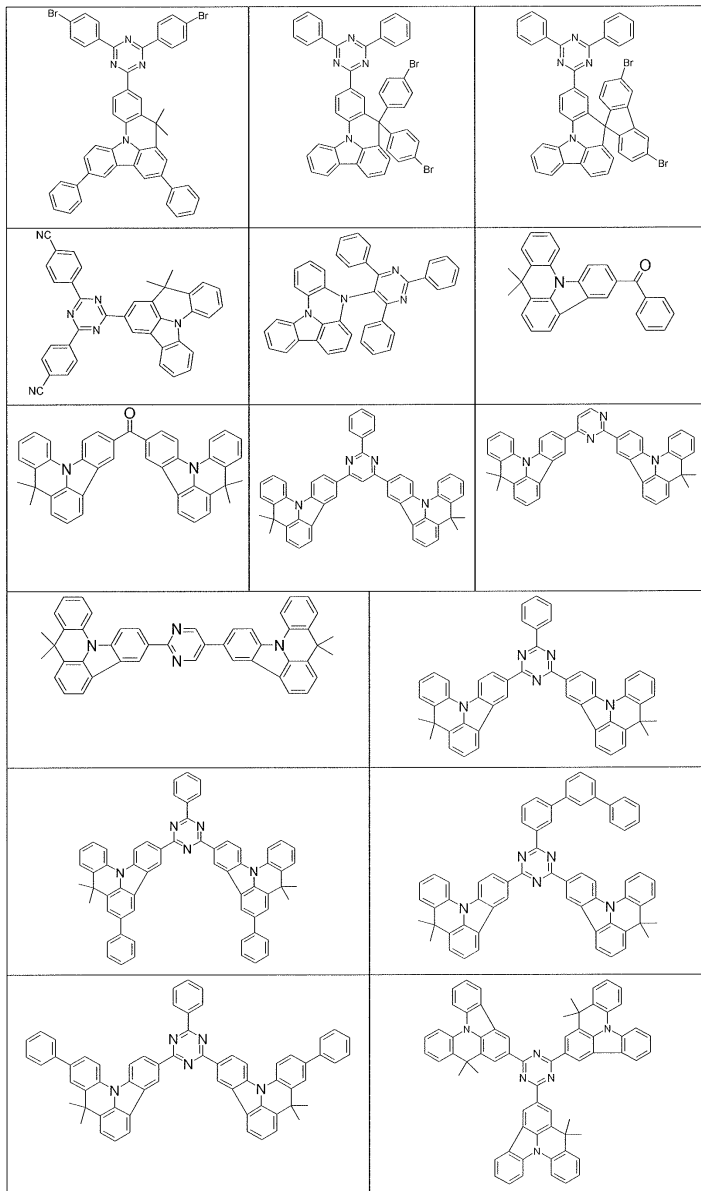
[0080]



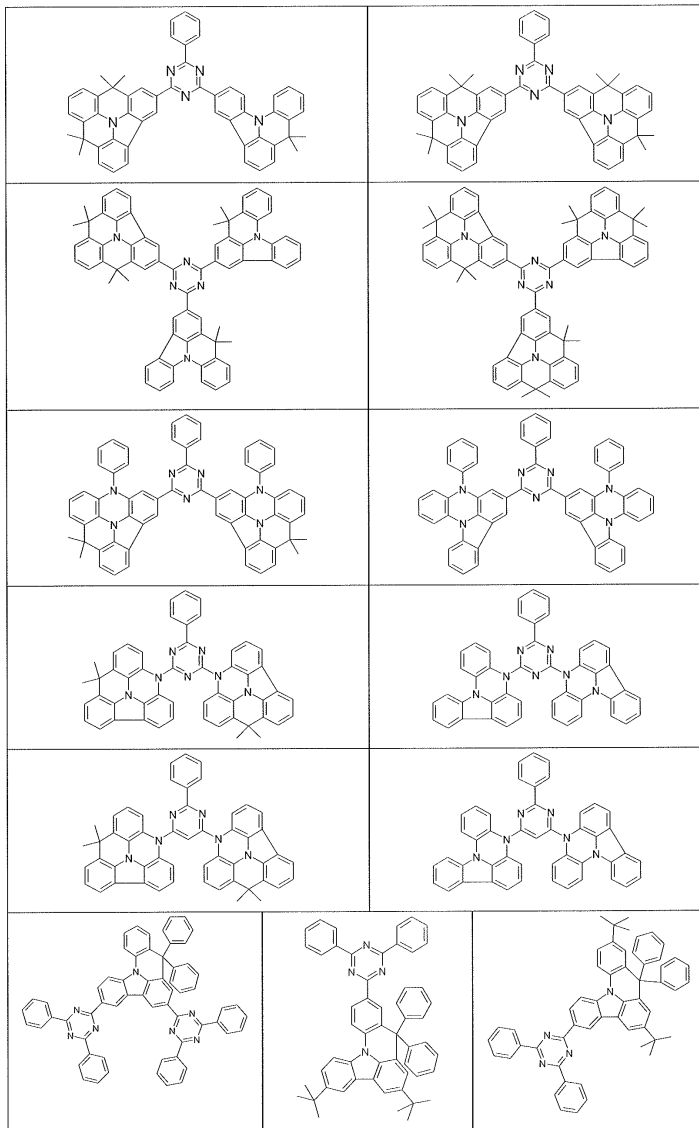
[0081]



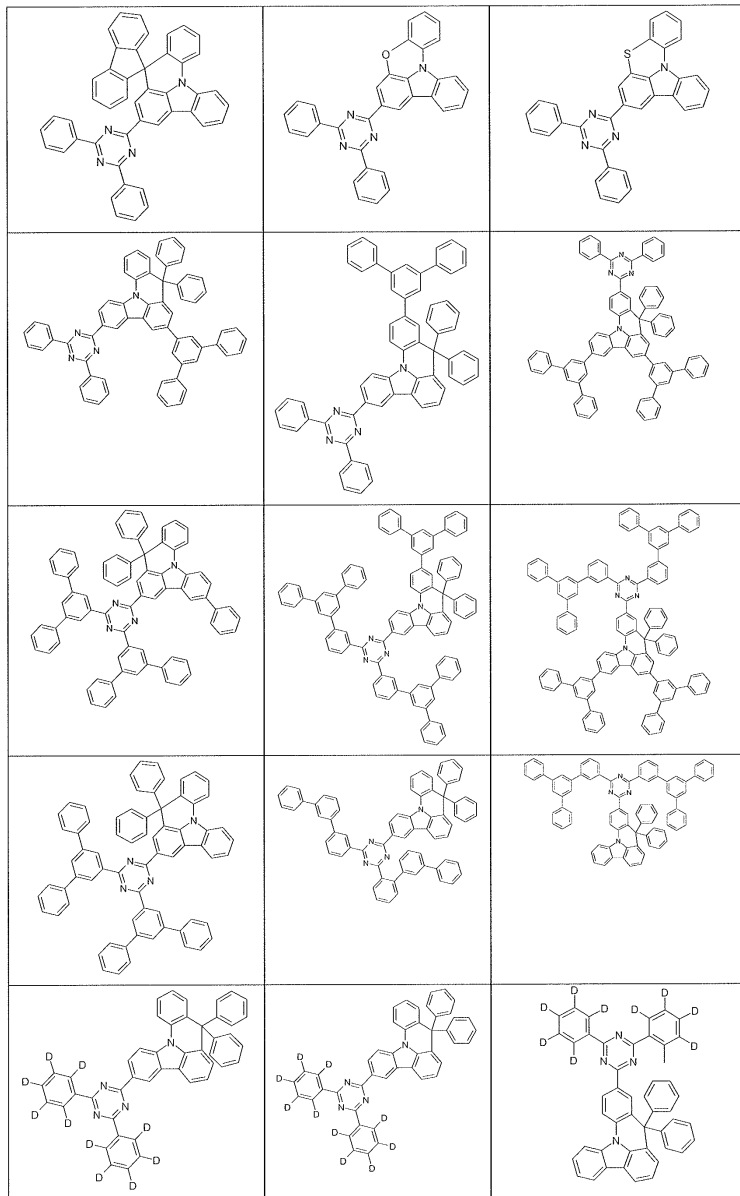
[0082]



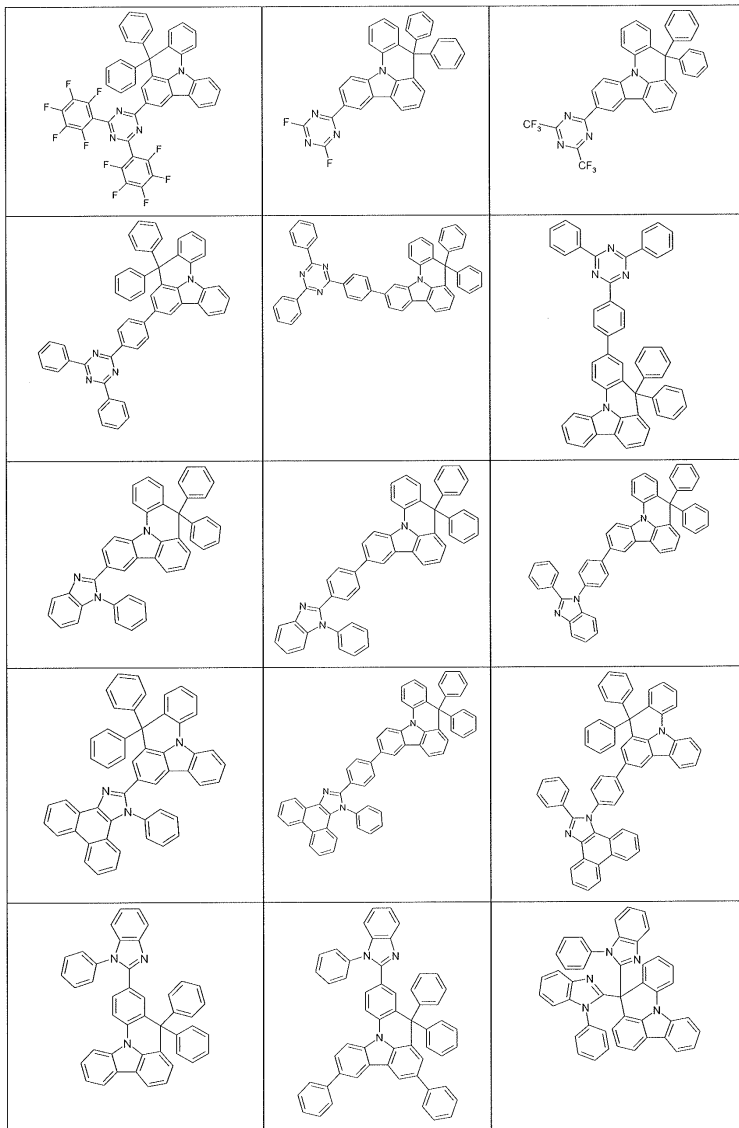
[0083]



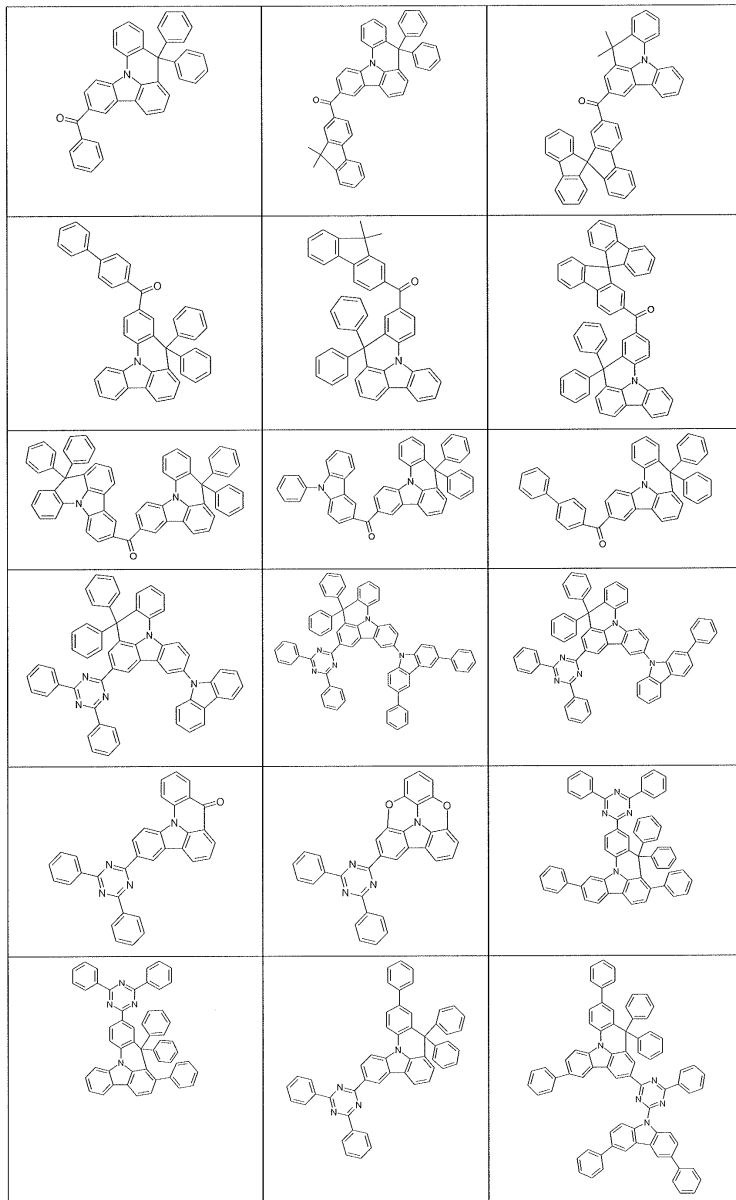
[0084]



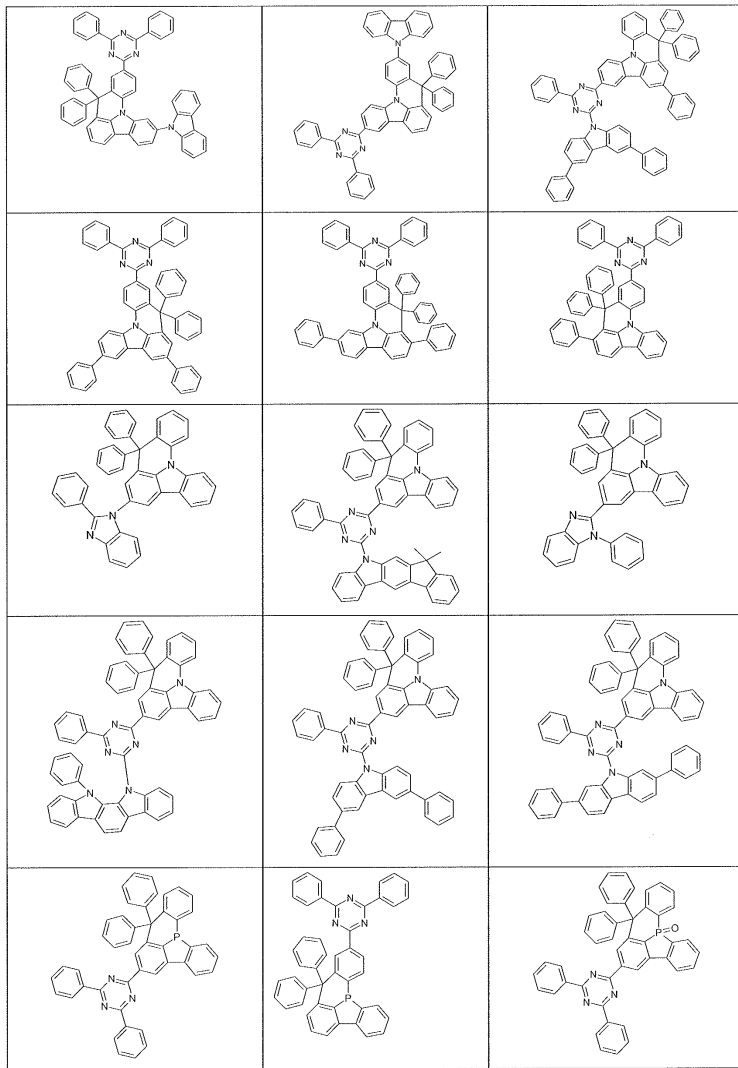
[0085]



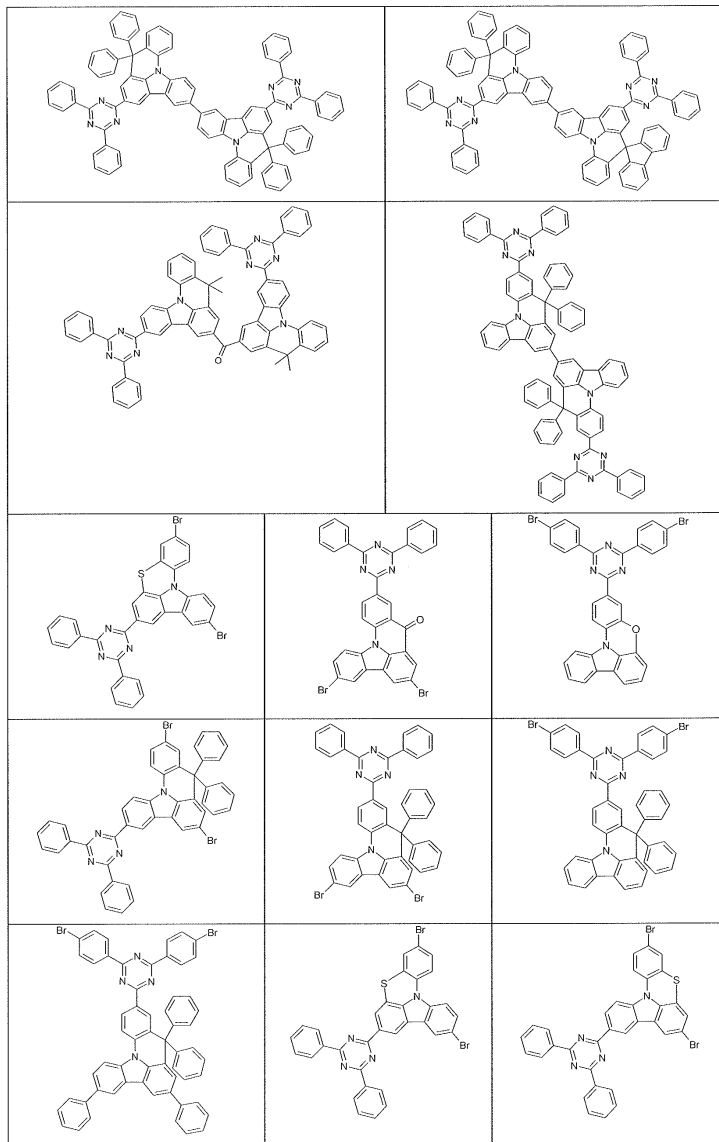
[0086]



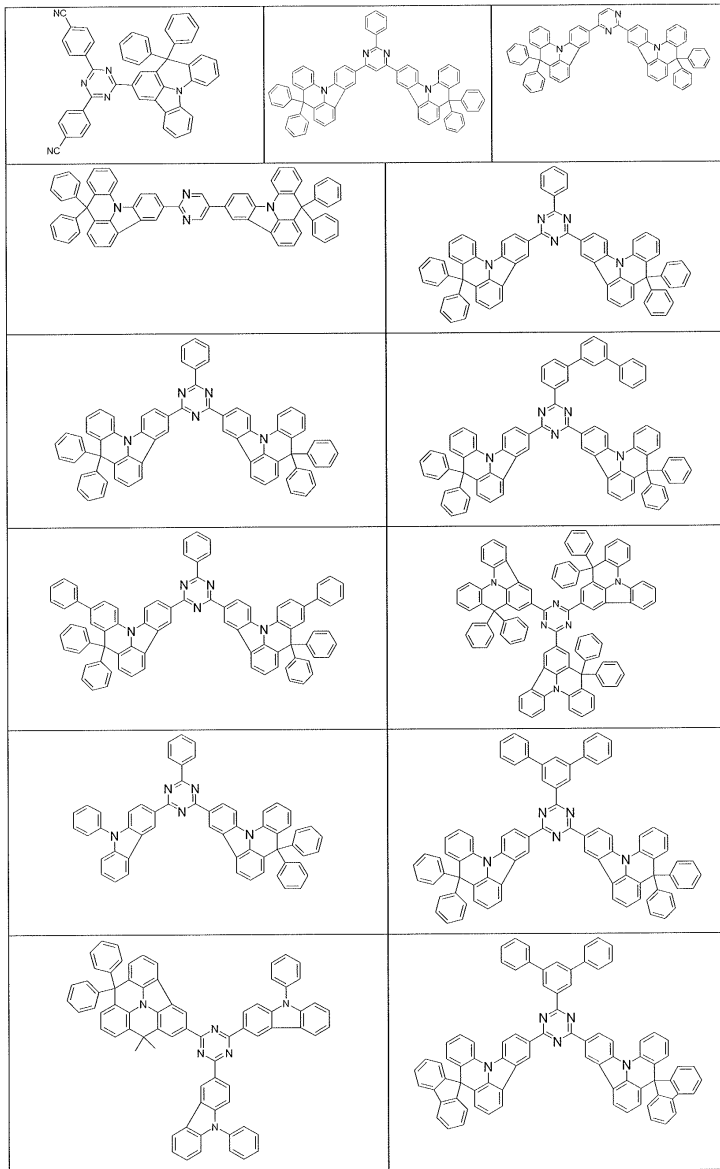
[0087]



[0088]



[0089]



[0090]

[0091]

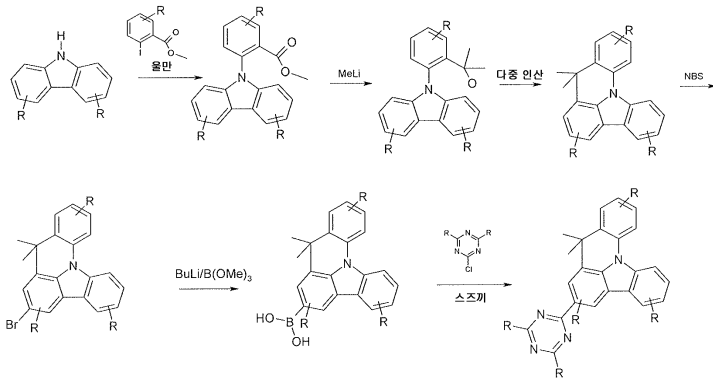
본 발명에 따른 화합물의 기본 구조는 반응식 1 내지 4 에 도시된 바와 같이, 당업자에게 공지된 합성 단계, 예컨대, 예를 들어, 브롬화, 울만 (Ullmann) 아틸레이션, 하르트뷔그-부흐발트 (Hartwig-Buchwald) 커플링 등에 의해 제조될 수 있다. 이들 기본 구조는 추가의 단계에서 기능화될 수 있다. 따라서, 1 또는 2 개의 가교 Y 를 갖는 카르바졸 유도체의 브롬화는 모노- 또는 디-p-브롬-치환된 가교된 카르바졸 유도체를 초래한다.

원소 브롬 외에, 사용되는 브롬화제는 또한, 특히, N-브로모 화합물, 예컨대 N-브로모수신이미드 (NBS) 일 수 있다. 다른 반응성 기, 예를 들어 염소, 요오드, 보론산 또는 보론산 유도체, 특히 보론산 에스테르, 트리플레이트 또는 토실레이트를 사용하는 기능화가 마찬가지로 적합하다.

[0092]

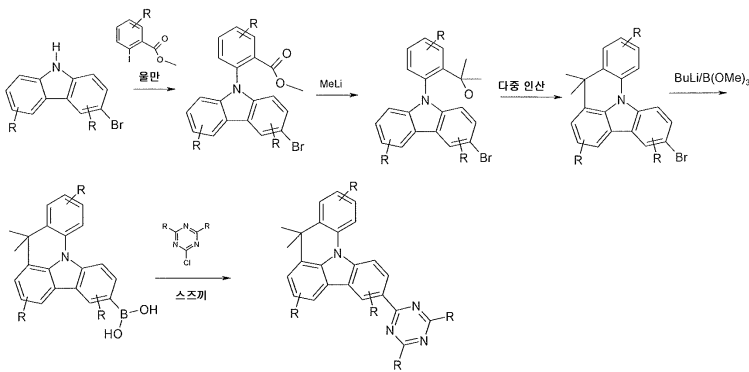
원하는 브롬 치환기에 따라, 3차 알코올의 중간체를 통한 고리화가 카르바졸의 브롬화 전에 (반응식 1) 또는 후에 (반응식 2) 실시될 수 있다. 고리 닫힘 (ring closure) 은 방향족 치환기와 카르바졸 사이에 이가 가교를 형성한다 (참조, 반응식 1-4). 여기서, 예를 들어, 카르복실레이트기 또는 아세틸기가 적합하며, 이는 그후 고리-닫힘 반응에서 탄소 가교로 전환될 수 있다 (반응식 1 및 2). 반응식 중 R 은 상기 정의된 바와 같은 치환기를 나타낸다.

[0093] 반응식 1



[0094]

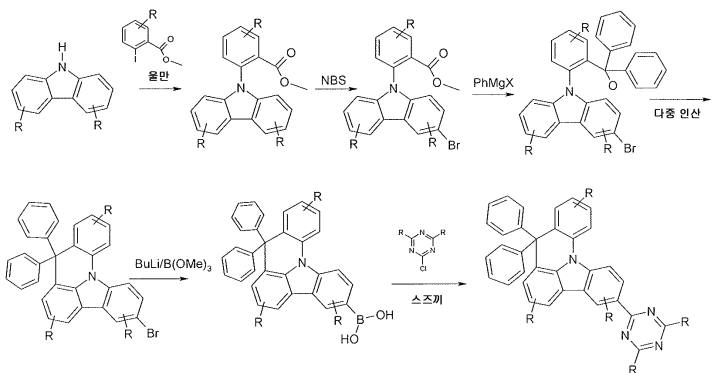
[0095] 반응식 2



[0096]

[0097] 가교 Y 상에 방향족 치환기의 도입이 하기 반응식 3 에서 예로서 제시되어 있다. 여기서 카르복시산 에스테르가 알킬-유기 화합물 대신 아릴-유기 화합물, 예를 들어 방향족 그리나드 (Grignard) 화합물과 반응한다.

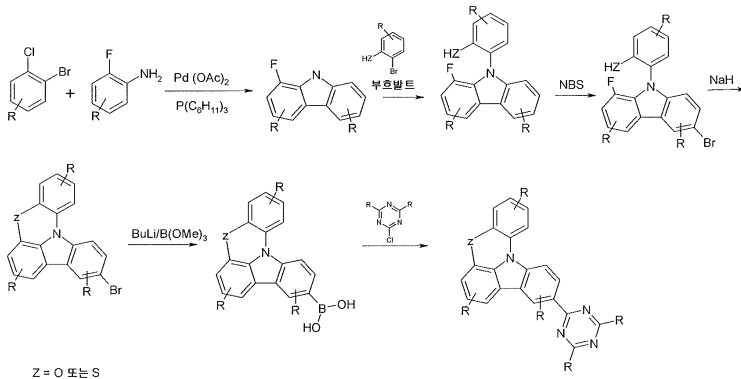
[0098] 반응식 3



[0099]

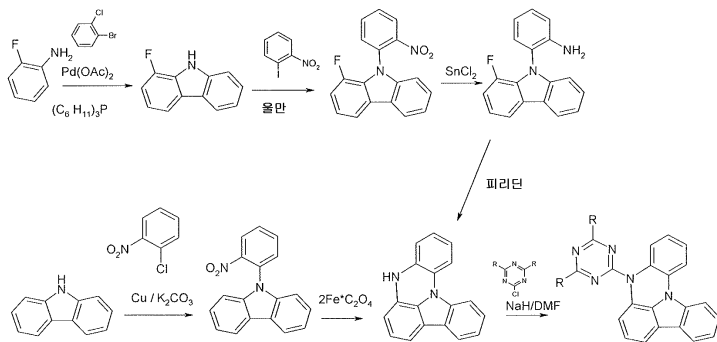
[0100] 또한 아릴 알코올 기가 적합하며, 이는 그 후 고리-단합 반응에서 산소 가교로 전환될 수 있다 (반응식 4). 또한 티오 기가 적합하며, 이는 그 후 고리-단합 반응에서 황 가교로 전환될 수 있다 (반응식 4). 또한 니트로 기 또는 아미노 기가 적합하며, 이는 그 후 고리-단합 반응에서 질소 가교로 전환될 수 있다 (반응식 5). 그 뒤에 이가 가교는 추가의 라디칼, 예를 들어 알킬 또는 아릴기에 의해 치환될 수 있다. 이러한 방식으로 제조된 가교된 카르바졸 화합물은 그 후 추가의 단계에서 기능화, 예를 들어 할로젠화, 바람직하게는 브롬화될 수 있다.

[0101] 반응식 4



[0102]

[0103] 반응식 5



[0104]

[0105]

반응식 1 내지 4 에 도시된 바와 같이, 기능화된, 특히 브롬화된 화합물은 추가의 기능화를 위한 중심 단위를 나타낸다. 따라서, 이들 기능화된, 가교된 화합물은 상응하는 보론산으로 용이하게 전환되고, 예를 들어 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 또는 다른 클로로트리아진 유도체로의 스즈끼 (Suzuki) 커플링에 의해, 본 발명에 따른 식 (1) 의 화합물로 전환될 수 있다.

[0106]

마찬가지로, 다른 커플링 반응 (예를 들어 스틸 (Stille) 커플링, Heck (Heck) 커플링, 소노가시라 (Sonogashira) 커플링 등) 이 사용될 수 있다. 하르트비그-부호발트 방법에 의한 디아릴아민으로의 커플링은 트리아릴아민 유도체를 초래한다. 따라서, 지방족 아민, 카르바졸 등이 치환기로서 도입될 수 있다. 포르밀, 알킬카르보닐 및 아릴카르보닐기 또는, 예를 들어 상응하는 디옥솔란 형태의, 그의 보호된 유도체가 추가로 기능화로서 적합하다. 브롬화된 화합물은 추가로 리튬화되고, 벤조니트릴과 같은 친전자체와의 반응 및 그 뒤의 산성 가수분해에 의해 케톤으로, 또는 클로로디페닐포스핀과의 반응 및 그 뒤의 산화에 의해 포스핀 옥시드로 전환된다.

[0107]

그러므로 또한 본 발명은 하기 반응 단계를 포함하는, 식 (1) 또는 (2) 의 화합물의 제조 방법에 관한 것이다:

[0108]

a) 기 R 대신 반응성 이탈기를 보유하는 기본 구조를 합성하는 단계; 및

[0109]

b) 바람직하게는 커플링 반응, 예를 들어 스즈끼 커플링 또는 하르트비그-부호발트 커플링에 의해, 기 R 을 도입하는 단계.

[0110]

여기서 반응성 이탈기는 바람직하게는 Cl, Br, I, 보론산 또는 보론산 유도체, 트리플레이트 또는 토실레이트로부터 선택되거나, 또는 Y 는 NH 를 나타내며, 즉 N 과 R 사이에 결합이 형성되는 경우 반응성 이탈기는 수소이다.

[0111]

상기 기술된 본 발명에 따른 화합물, 특히 반응성 이탈기, 예컨대 브롬, 요오드, 염소, 보론산 또는 보론산 에스테르에 의해, 또는 반응성 중합가능 기, 예컨대 올레핀 또는 옥세탄에 의해 치환된 화합물은 상응하는 올리고머, 덴드리머 또는 중합체의 제조를 위한 단량체로서 사용될 수 있다. 여기서 올리고머화 또는 중합은 바람직하게는 할로겐 기능기 또는 보론산 기능기를 통해 또는 중합가능 기를 통해 실시된다. 또한 이러한 유형의 기를 통해 중합체를 교차연결시키는 것이 가능하다. 본 발명에 따른 화합물 및 중합체는 교차연결되지 않은 층으로서 이용될 수 있다.

- [0112] 그러므로 또한 본 발명은 상기 언급된 본 발명에 따른 화합물을 하나 이상 포함하는 올리고머, 중합체 또는 덴드리머에 관한 것이며, 여기서 본 발명에 따른 화합물에서부터 중합체, 올리고머 또는 덴드리머까지 하나 이상의 결합이 존재한다. 그러므로 이는 본 발명에 따른 화합물의 연결에 따라 올리고머 또는 중합체의 측쇄를 형성하거나 주쇄 내에서 연결된다. 중합체, 올리고머 또는 덴드리머는 공액, 부분적 공액 또는 비-공액일 수 있다. 올리고머 또는 중합체는 선형, 분지형 또는 수지상일 수 있다. 상기 기술된 바와 같은 선호가 올리고머, 덴드리머 및 중합체 중 본 발명에 따른 화합물의 반복 단위에 적용된다.
- [0113] 올리고머 또는 중합체의 제조 동안, 본 발명에 따른 단량체는 추가의 단량체와 단독중합 또는 공중합된다. 식 (1), (2) 및 (16) 내지 (82) 의 단위가 0.01 내지 99.9 mol%, 바람직하게는 5 내지 90 mol%, 특히 바람직하게는 20 내지 80 mol% 의 비율로 존재하는 단독중합체 또는 공중합체가 바람직하다. 중합체 백본을 형성하는 적합하고 바람직한 공단량체는 플루오렌 (예를 들어 EP 842208 또는 WO 00/22026 에 따름), 스피로비플루오렌 (예를 들어 EP 707020, EP 894107 또는 WO 06/061181 에 따름), 파라-페닐렌 (예를 들어 WO 92/18552 에 따름), 카르바졸 (예를 들어 WO 04/070772 또는 WO 04/113468 에 따름), 티오펜 (예를 들어 EP 1028136 에 따름), 디히드로페난트렌 (예를 들어 WO 05/014689 에 따름), 시스- 및 트랜스-인덴노플루오렌 (예를 들어 WO 04/041901 또는 WO 04/113412 에 따름), 케톤 (예를 들어 WO 05/040302 에 따름), 페난트렌 (예를 들어 WO 05/104264 또는 WO 07/017066 에 따름) 또는 또한 복수의 이들 단위로부터 선택된다. 중합체, 올리고머 및 덴드리머는 추가의 단위, 예를 들어 정공-수송 단위, 특히 트리아릴아민에 기초하는 것, 및/또는 전자-수송 단위를 또한 포함할 수 있다. 또한, 중합체는 블렌드로서 혼합된 또는 공중합된 형태의 트리플렛 (triplet) 이미터를 포함할 수 있다. 정확하게는 식 (1), (2) 및 (16) 내지 (82) 의 단위와 트리플렛 이미터의 조합이 특히 양호한 결과를 제공한다.
- [0114] 또한, 식 (1), (2) 및 (16) 내지 (82) 의 화합물은 또한 추가로 기능화됨으로써 확장된 구조로 전환될 수 있다. 여기서 언급될 수 있는 예는 스즈키 방법에 의한 아릴보론산과의 반응 또는 하르트뵘그-부흐발트 방법에 의한 1차 또는 2차 아민과의 반응이다. 따라서, 식 (1), (2) 및 (16) 내지 (82) 의 화합물은 인광 금속 착물에 또는 또한 다른 금속 착물에 또한 직접 결합될 수 있다.
- [0115] 본 발명에 따른 화합물은 전자 소자에 사용하기에 적합하다. 여기서 전자 소자는 하나 이상의 유기 화합물을 포함하는 하나 이상의 층을 포함하는 소자를 의미하는 것으로 여겨진다. 여기서 부품은 무기 재료 또는 또한 전적으로 무기 재료로부터 형성된 층을 또한 포함할 수 있다.
- [0116] 그러므로 또한 본 발명은 전자 소자, 특히 유기 전계발광 소자에 있어서, 상기 언급된 본 발명에 따른 화합물의 용도에 관한 것이다.
- [0117] 또한 본 발명은 상기 언급된 본 발명에 따른 화합물을 하나 이상 포함하는 전자 소자에 관한 것이다. 상기 언급된 선호가 마찬가지로 전자 소자에 적용된다.
- [0118] 전자 소자는 바람직하게는 유기 전계발광 소자 (OLED), 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 광학적 탐지기, 유기 광수용체, 유기 전계-퀸치 (field-quench) 소자 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 "유기 플라즈몬 방출 소자" (D. M. Koller 등, *Nature Photonics* **2008**, 1-4) 로 이루어지는 군으로부터 선택되나, 바람직하게는 유기 전계발광 소자 (OLED), 특히 바람직하게는 인광 OLED 이다.
- [0119] 유기 전계발광 소자는 캐소드, 애노드 및 하나 이상의 방출층을 포함한다. 이들 층 외에, 유기 전계발광 소자는 추가의 층, 예를 들어 각 경우 하나 이상의 정공-주입층, 정공-수송층, 정공-블록층, 전자-수송층, 전자-주입층, 여기자-블록층, 전자-블록층 및/또는 전하-생성층을 또한 포함할 수 있다. 마찬가지로, 예를 들어, 여기자-블록 기능을 갖는, 중간층이 2 개의 방출층 사이에 도입되는 것이 가능하다. 그러나, 이들 층 각각이 반드시 존재할 필요는 없다는 점에 주목해야 한다. 유기 전계발광 소자는 하나의 방출층 또는 복수의 방출층을 포함할 수 있다. 복수의 방출층이 존재하는 경우, 이들은 바람직하게는 전체로서 380 nm 와 750 nm 사이에 복수의 방출 최대치를 가져, 전체적으로 백색 방출을 초래하며, 즉 형광 또는 인광을 발할 수 있는 다양한 방출 화합물이 방출층에 사용된다. 3 개의 방출층을 갖는 시스템이 특히 바람직하며, 여기서 3 개의 층은 청색, 녹색 및 주황색 또는 적색 방출을 발한다 (기본 구조에 관해, 예를 들어, WO 05/011013 참조). 마찬가지로 복수의 이미터를 방출층 내로 도핑하여 1 개의 층으로부터 백색 방출을 생성하는 것이 가능하다.
- [0120] 상기 지시된 구현예에 따른 본 발명에 따른 화합물은 정밀 구조에 따라 다양한 층에 이용될 수 있다. 정밀 치환기에 따라, 형광 또는 인광 이미터용, 특히 인광 이미터용 매트릭스 재료로서, 및/또는 정공-블록층에 및/

또는 전자-수송층에 및/또는 전자-블록 또는 여기자-블록층에 및/또는 정공-수송층에 식 (1), (2) 또는 (16) 내지 (82) 의 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 상기 지시된 바람직한 구현에는 유기 전자 소자에 있어서 상기 재료의 용도에 또한 적용된다.

[0121] 발명의 바람직한 구현예에서, 식 (1), (2) 또는 (16) 내지 (82) 의 화합물은 방출층의 형광 또는 인광 화합물용, 특히 인광 화합물용 매트릭스 재료로서 이용된다. 여기서 유기 전계발광 소자는 하나의 방출층 또는 복수의 방출층을 포함할 수 있고, 여기서 하나 이상의 방출층은 매트릭스 재료로서 하나 이상의 본 발명에 따른 화합물을 포함한다.

[0122] 식 (1), (2) 또는 (16) 내지 (82) 의 화합물이 방출층의 방출 화합물용 매트릭스 재료로서 이용되는 경우, 바람직하게는 하나 이상의 인광 재료 (트리플렛 이미터) 와의 조합으로 이용된다. 본 발명의 의미에서 인광은 비교적 높은 스핀 다중도, 즉 스핀 상태 > 1 의 여기된 상태에서부터의, 특히 여기된 트리플렛 상태에서부터의 발광을 의미하는 것으로 여겨진다. 이러한 적용을 위해, 전이 금속을 함유하는 모든 발광성 착물, 특히 모든 이리듐, 백금 및 구리 착물이 인광 화합물로 여겨져야 한다.

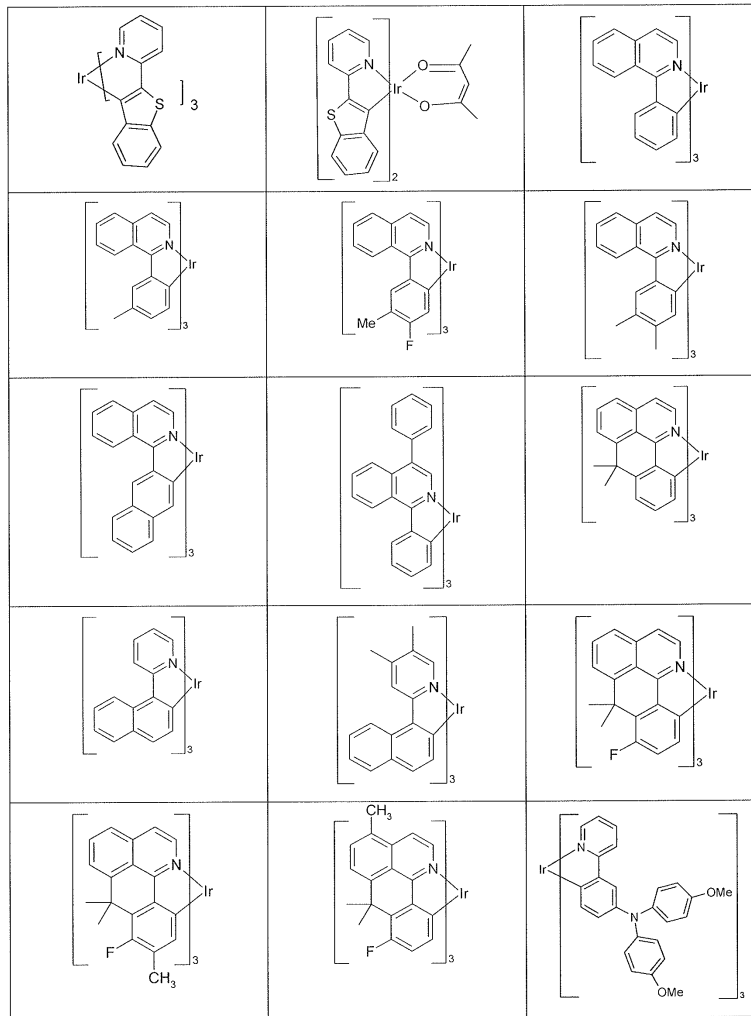
[0123] 식 (1), (2) 또는 (16) 내지 (82) 의 화합물과 방출 화합물의 혼합물은 이미터 및 매트릭스 재료를 포함하는 전체 혼합물에 대해 99.9 ~ 1 부피%, 바람직하게는 99 ~ 10 부피%, 특히 바람직하게는 97 ~ 60 부피%, 특히 95 ~ 80 부피% 의 식 (1), (2) 또는 (16) 내지 (82) 의 화합물을 포함한다. 이에 상응하여, 상기 혼합물은 이미터 및 매트릭스 재료를 포함하는 전체 혼합물에 대해 0.1 ~ 99 부피%, 바람직하게는 1 ~ 90 부피%, 특히 바람직하게는 3 ~ 40 부피%, 특히 5 ~ 20 부피% 의 이미터를 포함한다.

[0124] 본 발명의 추가의 바람직한 구현에는 추가의 매트릭스 재료와 조합된 인광 이미터용 매트릭스 재료로서의, 식 (1), (2) 또는 (16) 내지 (82) 의 화합물의 용도이다. 식 (1), (2) 및 (16) 내지 (82) 의 화합물과 조합으로 이용될 수 있는 특히 적합한 매트릭스 재료는 방향족 케톤, 방향족 포스핀 옥시드 또는 방향족 설폭시드 또는 설폰 (예를 들어 WO 04/013080, WO 04/093207, WO 06/005627 또는 WO 10/006680 에 따름), 트리아릴아민, 카르바졸 유도체, 예를 들어 CBP (N,N-비스카르바졸릴비페닐) 또는 카르바졸 유도체 (WO 05/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527 또는 WO 08/086851 에서 공개됨), 인돌로카르바졸 유도체 (예를 들어 WO 07/063754 또는 WO 08/056746 에 따름), 인데노카르바졸 유도체 (예를 들어 미공개 출원 DE 102009023155.2 또는 DE 102009031021.5 에 따름), 아자카르바졸 유도체 (예를 들어 EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160 에 따름), 이극성 매트릭스 재료 (예를 들어 WO 07/137725 에 따름), 실란 (예를 들어 WO 05/111172 에 따름), 아자보롤 또는 보론산 에스테르 (예를 들어 WO 06/117052 에 따름), 트리아진 유도체 (예를 들어 WO 10/015306, WO 07/063754 또는 WO 08/056746 에 따름), 아연 착물 (예를 들어 EP 652273 또는 WO 09/062578 에 따름), 디아자실롤 또는 테트라아자실롤 유도체 (예를 들어 WO 10/054729 에 따름), 또는 디아자포스폴 유도체 (예를 들어 WO 10/054730 에 따름) 이다. 실제의 이미터보다 짧은 파장에 서 방출하는 추가의 인광 이미터가 마찬가지로 코-호스트 (co-host) 로서 혼합물에 존재할 수 있다.

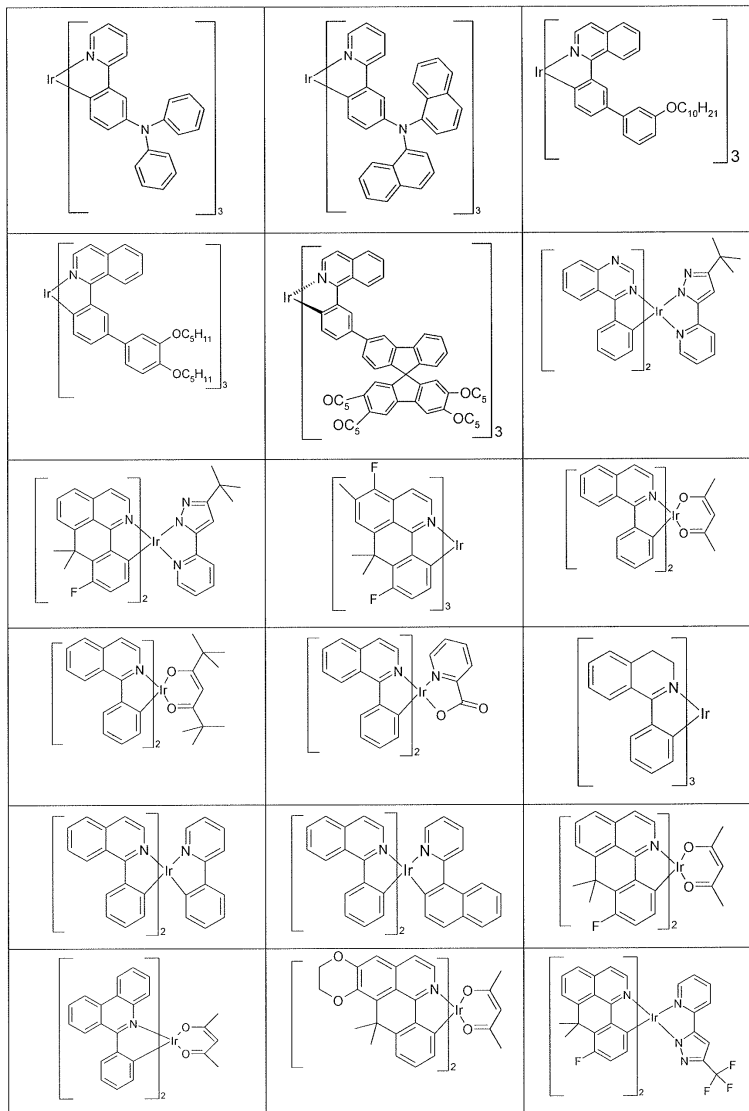
[0125] 적합한 인광 화합물 (= 트리플렛 이미터) 은, 특히, 적합한 여기서, 바람직하게는 가시역에서, 빛을 발하고, 또한 원자 번호 20 이상, 바람직하게는 38 이상 및 84 미만, 특히 바람직하게는 56 이상 및 80 미만을 갖는 원자, 특히 이러한 원자 번호를 갖는 금속을 하나 이상 함유하는 화합물이다. 사용되는 인광 이미터는 바람직하게는 구리, 몰리브덴, 텅스텐, 레늄, 루테튬, 오스뮴, 로듐, 이리듐, 팔라듐, 백금, 은, 금 또는 यू로퓼을 함유하는 화합물, 특히 이리듐 또는 백금을 함유하는 화합물이다.

[0126] 상기 기술된 이미터의 예가 출원 WO 00/70655, WO 01/41512, WO 02/02714, WO 02/15645, EP 1191613, EP 1191612, EP 1191614, WO 05/033244, WO 05/019373 및 US 2005/0258742 에 나타나 있다. 일반적으로, 선행 기술에 따라 인광 OLED 에 사용되는 및 유기 전계발광 분야에서 당업자에게 공지된 모든 인광 착물이 적합하고, 당업자는 발명 단계 없이 추가의 인광 착물을 이용할 수 있을 것이다.

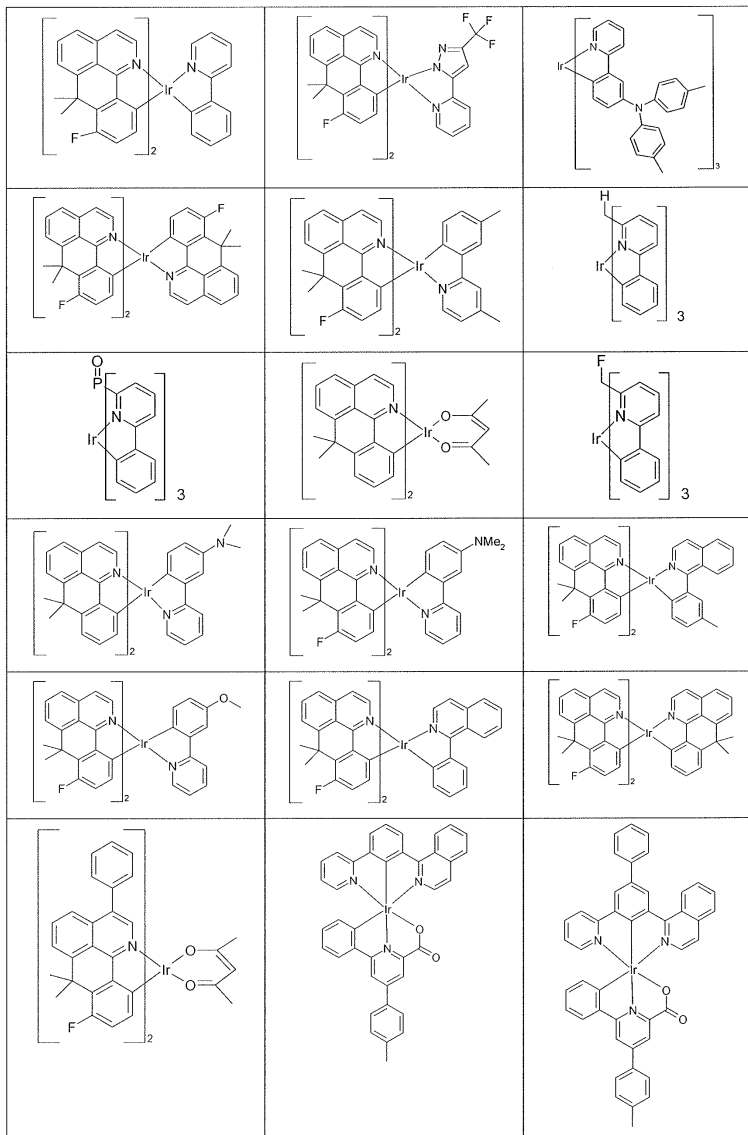
[0127] 적합한 인광 화합물의 예가 하기 표에 열거되어 있다.



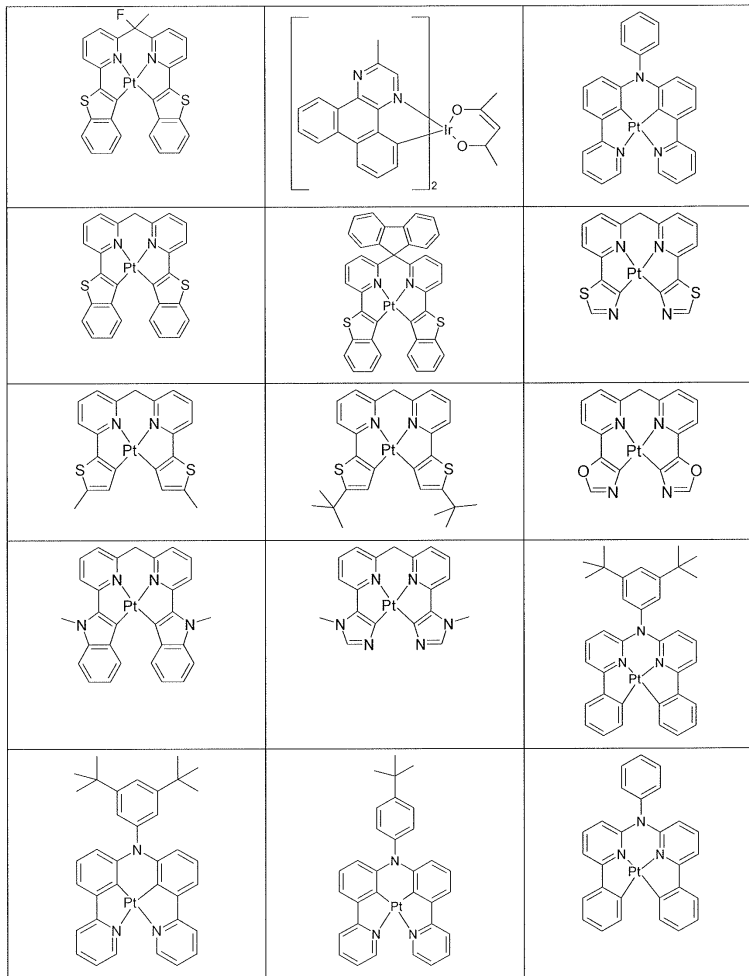
[0128]



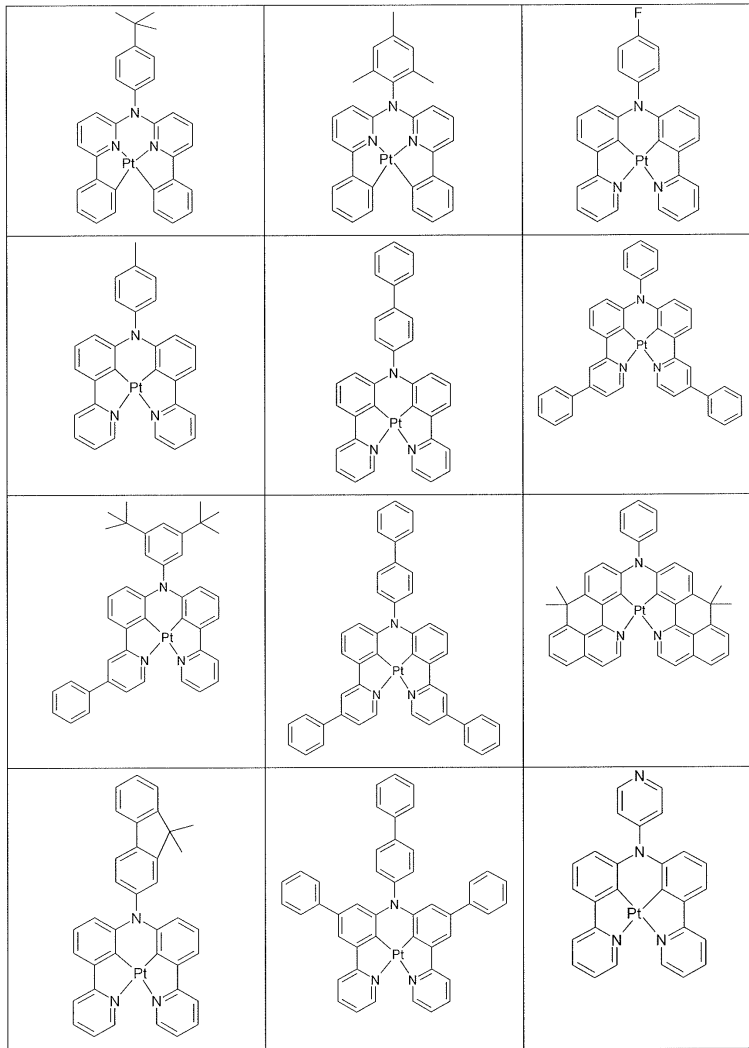
[0129]



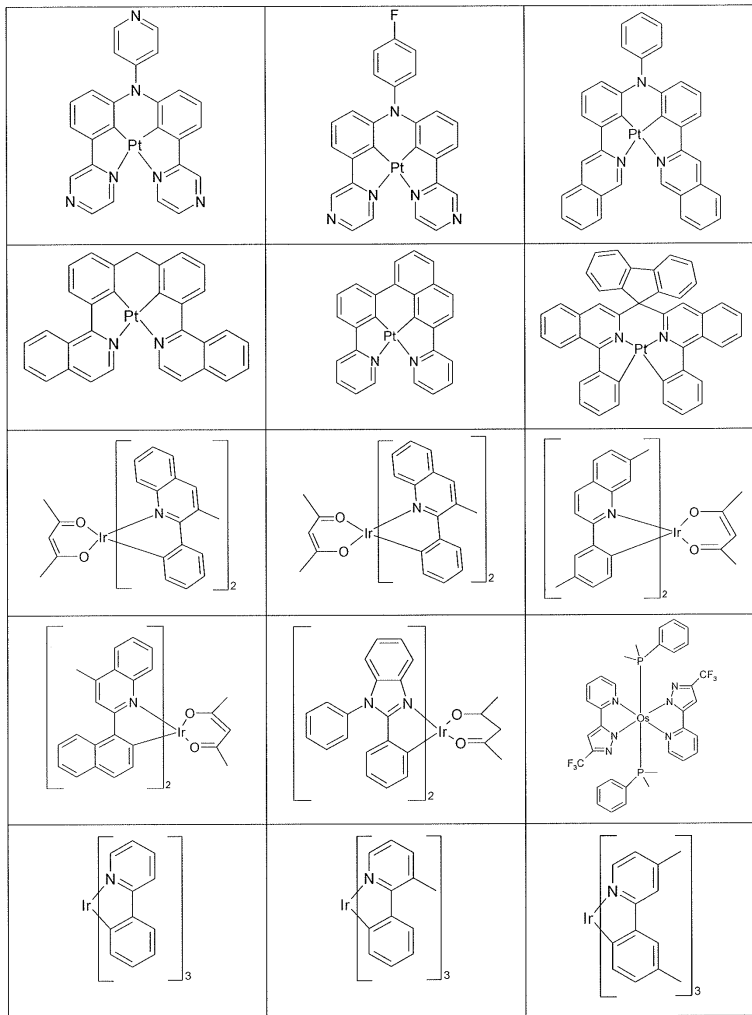
[0130]



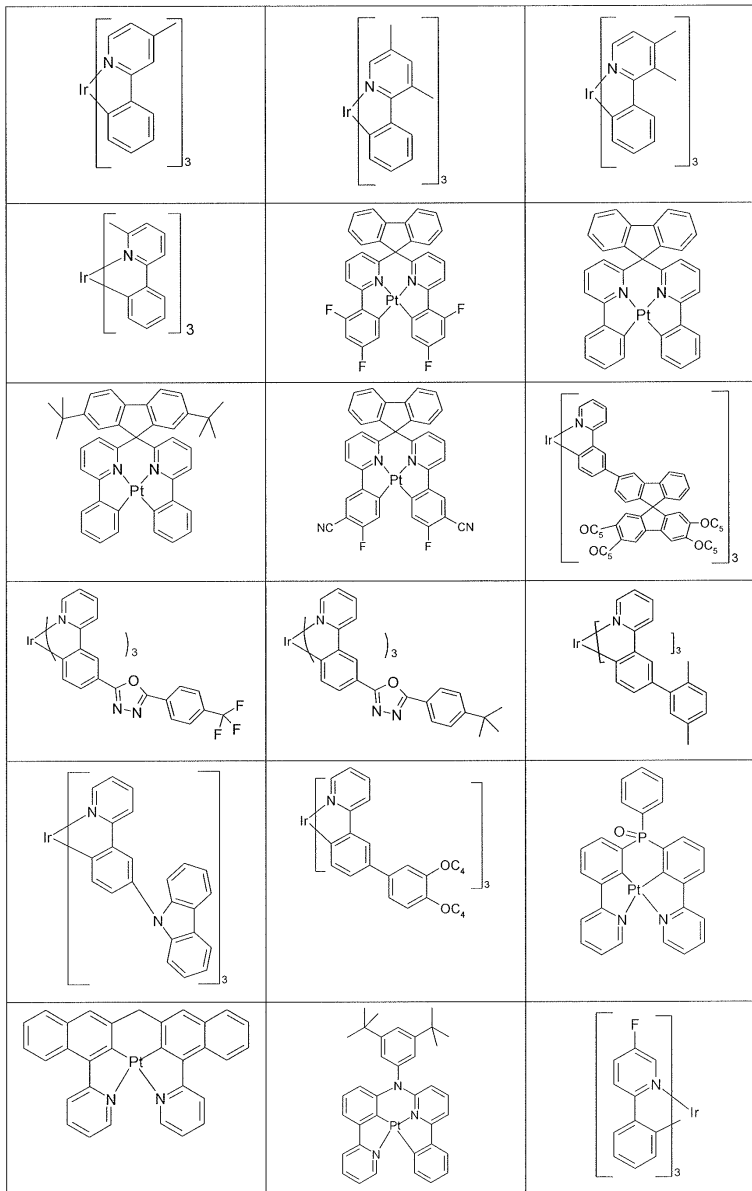
[0131]



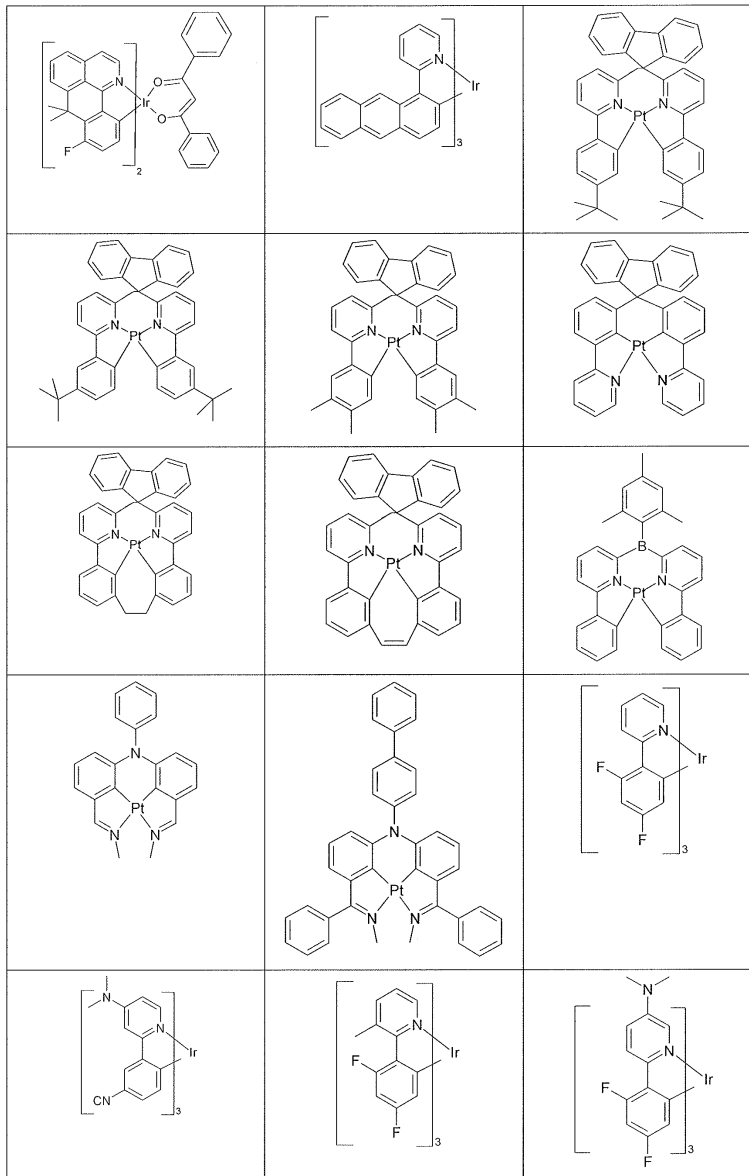
[0132]



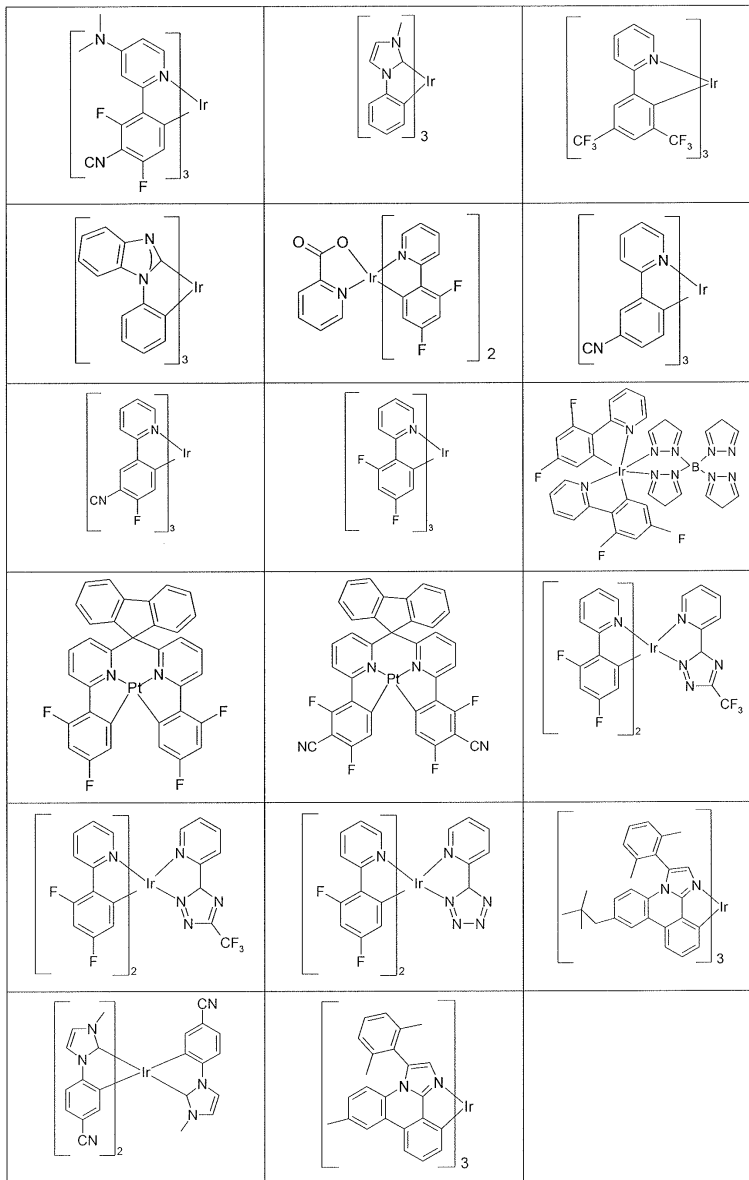
[0133]



[0134]



[0135]



[0136]

[0137]

발명의 추가의 구현예에서, 예를 들어, WO 05/053051 에 기재된 바와 같이, 유기 전계발광 소자는 별도의 정공-주입층 및/또는 정공-수송층 및/또는 정공-블록층 및/또는 전자-수송층을 포함하지 않으며, 즉 방출층이 정공-주입층 또는 애노드에 바로 인접하고/거나, 방출층이 전자-수송층 또는 전자-주입층 또는 캐소드에 바로 인접한다. 또한, 예를 들어, WO 09/030981 에 기재된 바와 같이, 방출층의 금속 착물과 동일 또는 유사한 금속 착물을 방출층에 바로 인접하는 정공-수송 또는 정공-주입 재료로서 사용하는 것이 가능하다.

[0138]

발명의 추가의 바람직한 구현예에서, 식 (1), (2) 또는 (16) 내지 (82) 의 화합물이 전자-수송 또는 전자-주입층의 전자-수송 재료로서 이용된다. 여기서 방출층은 형광성 또는 인광성일 수 있다. 상기 화합물이 전자-수송 재료로서 이용되는 경우, 바람직하게는 예를 들어 알칼리 금속 착물, 예컨대, 예를 들어, Liq (리튬 히드록시퀴놀리네이트) 로 도핑될 수 있다.

[0139]

발명의 추가의 바람직한 구현예에서, 식 (1), (2) 또는 (16) 내지 (82) 의 화합물이 정공-블록층에 이용된다. 정공-블록층은 캐소드 쪽의 방출층에 바로 인접하는 층을 의미하는 것으로 여겨진다.

[0140]

또한 식 (1), (2) 또는 (16) 내지 (82) 의 화합물을 정공-블록층 또는 전자-수송층에 및 방출층의 매트릭스로서 사용하는 것이 둘다 가능하다.

[0141]

발명의 추가의 구현예에서, 식 (1), (2) 또는 (16) 내지 (82) 의 화합물이 정공-수송층에 또는 전자-블록층 또는 여기자-블록층에 이용된다.

[0142]

본 발명에 따른 유기 전계발광 소자의 추가의 층에, 선행 기술에 따라 통상적으로 이용되는 모든 재료를 사용하

는 것이 가능하다. 그러므로 당업자는, 발명의 단계 없이, 유기 전계발광 소자에 대해 공지된 모든 재료를 본 발명에 따른 식 (1), (2) 및 (16) 내지 (82) 의 화합물과 조합하여 이용할 수 있을 것이다.

[0143] 하나 이상의 층이 승화 공정에 의해 도포되고, 재료가 진공 승화 단위에서 10^{-5} mbar 미만, 바람직하게는 10^{-6} mbar 미만의 초기 압력에서 증기-침착되는 것을 특징으로 하는, 유기 전계발광 소자가 또한 바람직하다. 그러나, 초기 압력이 훨씬 더 낮은, 예를 들어 10^{-7} mbar 미만인 것이 또한 가능하다.

[0144] 마찬가지로 하나 이상의 층이 OVPD (유기 기상 증착) 공정에 의해 또는 운반-기체 승화에 의해 도포되고, 여기서 재료가 10^{-5} mbar ~ 1 bar 의 압력에서 도포되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 이러한 공정의 특별한 경우는, 재료가 노즐을 통해 직접 도포됨으로써 구조화되는 OVJP (유기 증기 제트 프린트) 공정이다 (예를 들어 M. S. Arnold 등, *Appl. Phys. Lett.* **2008**, *92*, 053301).

[0145] 하나 이상의 층이 용액으로부터, 예컨대, 예를 들어, 스핀 코팅에 의해, 또는 예컨대, 예를 들어, 스크린 인쇄, 플렉소그래픽 인쇄, 오프셋 인쇄, LITI (광 유도 열 이미징, 열 전사 인쇄), 잉크-제트 인쇄 또는 노즐 인쇄와 같은 임의의 원하는 인쇄 공정에 의해 제조되는 것을 특징으로 하는, 유기 전계발광 소자가 또한 바람직하다. 예를 들어, 적합한 치환에 의해 수득되는, 가용성 화합물이 이러한 목적에 필요하다. 이들 공정은 또한 올리고머, 덴드리머 및 중합체에 특히 적합하다.

[0146] 예를 들어, 하나 이상의 층이 용액으로부터 도포되고, 하나 이상의 추가의 층이 증기 증착에 의해 도포되는, 하이브리드 공정이 또한 가능하다.

[0147] 이들 공정은 일반적으로 당업자에게 공지되어 있고, 당업자에 의해 발명의 단계 없이 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자에 적용될 수 있다.

[0148] 본 발명에 따른 화합물 및 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자는 하기 놀라운 이점에 의해 선행 기술과 구별된다:

[0149] 1. 본 발명에 따른 화합물 또는 식 (1), (2) 및 (16) 내지 (82) 의 화합물은 형광 또는 인광 이미터용 매트릭스 재료로서 이용시 매우 높은 효율 및 긴 수명을 초래한다. 이는, 특히, 상기 화합물이 인광 이미터용 매트릭스 재료로서 이용되는 경우에 적용된다.

[0150] 2. 본 발명에 따른 화합물 또는 식 (1), (2) 및 (16) 내지 (82) 의 화합물은 적색-인광 화합물용 매트릭스로서 뿐만 아니라, 특히, 또한 녹색-인광 화합물용 매트릭스로서 적합하다.

[0151] 3. 승화시 부분적으로 또는 완전히 열분해되는, 선행 기술에 따른 많은 화합물과 대조적으로, 본 발명에 따른 화합물은 높은 열 안정성을 갖는다.

[0152] 4. 본 발명에 따른 화합물은 유기 전계발광 소자에 이용시 낮은 사용 전압으로 가파른 전류/전압 곡선 및 높은 효율을 초래한다.

[0153] 5. 또한, 본 발명에 따른 화합물은 전자-수송 재료로서 사용시 유기 전계발광 소자의 효율, 수명 및 작동 전압의 면에서 매우 양호한 특성을 초래한다.

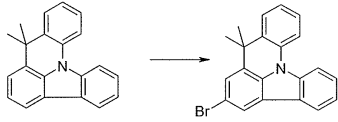
[0154] 상기 언급된 이점들은 다른 전자 특성의 손상을 수반하지 않는다.

[0155] 본 발명을 이하의 실시예에 의해 더 상세히 설명하지만, 이에 의해 제한되는 것은 아니다. 당업자는 설명을 이용하여 공개된 범위에서 발명을 실시하거나, 발명에 따른 추가의 화합물을 발명의 단계 없이 제조하고 이를 전자 소자에 사용하거나, 발명에 따른 공정을 사용할 수 있을 것이다.

[0156] **실시예:**

[0157] 다르게 지시되지 않는 한, 보호성-기체 하에 하기 합성을 실시했다. 출발 재료는 ALDRICH 또는 ABCR 로부터 구입할 수 있다 (팔라듐(II) 아세테이트, 트리-*o*-톨릴-포스핀, 무기물, 용매). 8,8-디메틸인돌로[3,2,1-*de*]아크리딘 및 7,7,11,11-테트라메틸-7H,11H-벤즈[1,8]인돌로[2,3,4,5,6-*de*]아크리딘의 합성은 문헌 (*Chemische Berichte* **1980**, *113*, *1*, 358-84) 에 따라 실시할 수 있다. 마찬가지로 8H-인돌로[3,2,1-*de*]페나진 (*Journal of the Chemical Society* **1958**, 4492-4) 및 B-[4-(1-페닐-1H-벤지미다졸-2-일)페닐]보론산 (*Advanced Functional Materials* **2008**, *18*, *4*, 584-590) 의 합성을 문헌을 통해 알 수 있다.

[0158] 실시예 1: 6-브로모-8,8-디메틸-8H-인돌로[3,2,1-de]아크리딘

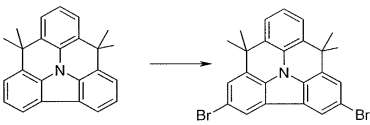


[0159]

[0160] 처음에 6.3 g (22.2 mmol) 의 8,8-디메틸인돌로[3,2,1-de]아크리딘을 150 ml 의 CH₂Cl₂ 에 도입한다. 그 뒤에 빛을 배제하면서 -15 °C 에서 100 ml 의 아세트니트릴 중 8 g (45.1 mmol) 의 NBS 의 용액을 한방울씩 첨가하고, 혼합물이 실온이 되게 하고, 이 온도에서 추가로 4 h 동안 교반한다. 그 뒤에 150 ml 의 물을 혼합물에 첨가한 후, 혼합물을 CH₂Cl₂ 로 추출한다. 유기상을 MgSO₄ 위에서 건조시키고, 용매를 진공 속에서 제거한다. 생성물을 뜨거운 헥산으로 교반하여 세정하고 석션으로 여과해 낸다.

[0161] 수율: 4.5 g (12 mmol), 이론의 57%, ¹H-NMR 에 따른 순도 약 97%.

[0162] 실시예 2: 2,5-디브로모-7,7,11,11-테트라메틸-7H,11H-벤즈[1,8]인돌로[2,3,4,5,6-de]아크리딘

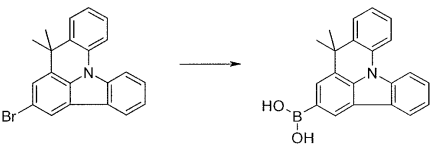


[0163]

[0164] 처음에 7.18 g (22.2 mmol) 의 7,7,11,11-테트라메틸-7H,11H-벤즈[1,8]인돌로[2,3,4,5,6-de]아크리딘을 150 ml 의 CH₂Cl₂ 에 도입한다. 그 뒤에 빛을 배제하면서 0 °C 에서 100 ml 의 CH₂Cl₂ 중 8 g (45.1 mmol) 의 NBS 의 용액을 한방울씩 첨가하고, 혼합물이 실온이 되게 하고, 이 온도에서 추가로 4 h 동안 교반한다. 그 뒤에 150 ml 의 물을 혼합물에 첨가한 후, 혼합물을 CH₂Cl₂ 로 추출한다. 유기상을 MgSO₄ 위에서 건조시키고, 용매를 진공 속에서 제거한다. 생성물을 뜨거운 헥산으로 교반하여 세정하고 석션으로 여과해 낸다.

[0165] 수율: 8.1 g (16 mmol), 이론의 70%, ¹H-NMR 에 따른 순도 약 98%.

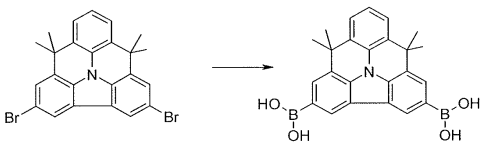
[0166] 실시예 3: 8,8-디메틸-8H-인돌로[3,2,1-de]아크리딘-6-보론산



[0167]

[0168] 93.9 g (259 mmol) 의 6-브로모-8,8-디메틸-8H-인돌로[3,2,1-de]아크리딘을 1500 ml 의 건조 THF 에 용해시키고, 시클로헥산 중 n-부틸리튬의 2.5 M 용액 135 ml (337 mmol) 를 -70 °C 에서 한방울씩 첨가하고, 1 h 후 37 ml 의 트리메틸 보레이트 (336 mmol) 를 한방울씩 첨가하고, 1 h 에 걸쳐 혼합물이 실온이 되게 하고, 용매를 제거하고, ¹H-NMR 에 따라 균일한 잔류물을 추가 정제 없이 다음 반응에 이용한다. 수율은 77 g (235 mmol) 이며, 이론의 91% 에 상응한다.

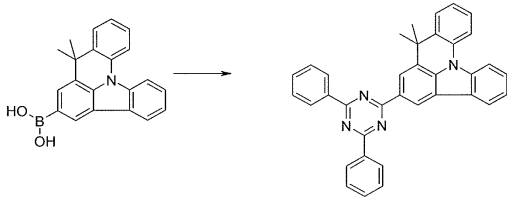
[0169] 실시예 4: 7,7,11,11-테트라메틸-7H,11H-벤즈[1,8]인돌로[2,3,4,5,6-de]아크리딘-2,5-비스보론산



[0170]

[0171] 56.2 g (154 mmol) 의 2,5-디브로모-7,7,11,11-테트라메틸-7H,11H-벤즈[1,8]인돌로[2,3,4,5,6-de]아크리딘을 1400 ml 의 건조 THF 에 용해시키고, 시클로-헥산 중 n-부틸리튬의 2.5 M 용액 162 ml (404 mmol) 를 -70 °C 에서 한방울씩 첨가하고, 1 h 후 44.4 ml 의 트리메틸 보레이트 (403 mmol) 를 한방울씩 첨가하고, 1h 에 걸쳐 혼합물이 RT 가 되게 하고, 용매를 제거하고, ¹H-NMR 에 따라 균일한 잔류물을 추가 정제 없이 다음 반응에 이용한다. 수율은 33 g (80 mmol) 이며, 이론의 69% 에 상응한다.

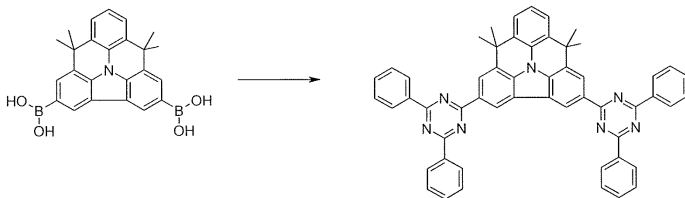
[0172] 실시예 5: 6-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-8,8-디메틸-8H-인돌로[3,2,1-de]아크리딘



[0173]

[0174] 36 g (110.0 mmol) 의 8,8-디메틸-8H-인돌로[3,2,1-de]아크리딘-6-보론산, 29.5 g (110.0 mmol) 의 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 및 44.6 g (210.0 mmol) 의 인산 삼칼륨을 500 ml 의 톨루엔, 500 ml 의 디옥산 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 16 h 동안 환류 하에 가열한다. 냉각 후, 유기상을 분리해 내고, 실리카 겔을 통해 여과시키고, 200 ml 의 물로 3 회 세척한 뒤에, 증발건조시킨다. 잔류물을 톨루엔으로부터 그리고 디클로로메탄/이소프로판올로부터 재결정화시키고, 마지막으로 고 진공 중에서 승화시키며, 순도는 99.9% 이다. 수율은 46 g (89 mmol) 이며, 이론의 83% 에 상응한다.

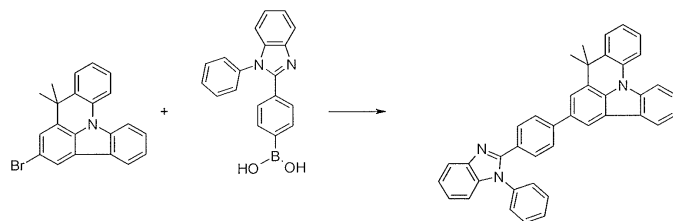
[0175] 실시예 6: 2,5-비스(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-7,7,11,11-테트라메틸-7H,11H-벤즈[1,8]인돌로[2,3,4,5,6-de]아크리딘



[0176]

[0177] 22.6 g (55 mmol) 의 7,7,11,11-테트라메틸-7H,11H-벤즈[1,8]인돌로[2,3,4,5,6-de]아크리딘-2,5-비스보론산, 29.5 g (110.0 mmol) 의 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 및 44.6 g (210.0 mmol) 의 인산 삼칼륨을 500 ml 의 톨루엔, 500 ml 의 디옥산 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 16 h 동안 환류 하에 가열한다. 냉각 후, 유기상을 분리해 내고, 실리카 겔을 통해 여과시키고, 200 ml 의 물로 3 회 세척한 뒤에, 증발건조시킨다. 잔류물을 톨루엔으로부터 그리고 디클로로메탄/이소프로판올로부터 재결정화시키고, 마지막으로 고 진공 중에서 승화시키며, 순도는 99.9% 이다. 수율은 30 g (38 mmol) 이며, 이론의 72% 에 상응한다.

[0178] 실시예 7: [6-(1-페닐-1H-벤지미다졸-2-일)페닐]-8,8-디메틸-8H-인돌로[3,2,1-de]아크리딘

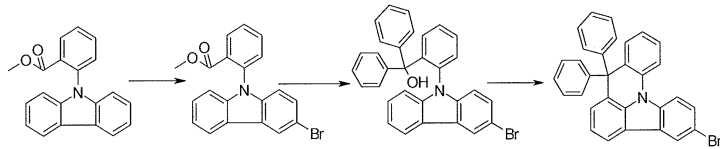


[0179]

[0180] 0.27 g (0.9 mmol) 의 트리-*o*-톨릴포스핀 및 그 후 33.5 mg (0.15 mmol) 의 팔라듐(II) 아세테이트를 강하게 교반하면서 7.5 ml 의 디옥산, 15 ml 의 톨루엔 및 18 ml 의 물의 혼합물 중 10.1 g (28 mmol) 의 6-브로모-8,8-디메틸-8H-인돌로[3,2,1-de]아크리딘 및 9.42 g (30 mmol) 의 벤지미다졸보론산 및 7.8 g (31.5 mmol) 의 인산 칼륨 수화물의 탈기된 현탁액에 첨가한다. 5 h 동안 환류 하에 가열 후, 혼합물이 냉각되게 한다. 침전물을 석션으로 여과해 내고, 10 ml 의 에탄올/물 (1:1, v:v) 로 3 회 및 5 ml 의 에탄올로 3 회 세척한 뒤에, 진공 속에서 건조시키고, 디옥산으로부터 재결정화시킨다. 수율: 12.46 g (22.5 mmol), 이론의 81%, ¹H-NMR 에 따른 순도 약 99.9%.

[0181] 실시예 8: 3-브로모-8,8-디페닐-8H-인돌로[3,2,1-de]아크리딘

[0182]



[0183] a) 메틸 2-(3-브로모-9H-카르바졸)벤조에이트

[0184] 2000 ml 의 DMF 중 62 g (207 mmol) 의 메틸 2-(9H-카르바졸)벤조에이트를 -10 °C 로 냉각시키고, 37.3 g (207 mmol) 의 NBS 를 조금씩 첨가하고, 혼합물을 6 h 동안 실온에서 교반한다. 그 뒤에 500 ml 의 물을 혼합물에 첨가한 후, 혼합물을 CH₂Cl₂ 로 추출한다. 유기상을 MgSO₄ 위에서 건조시키고, 용매를 진공 속에서 제거한다. 생성물을 뜨거운 톨루엔으로 교반하여 세척하고, 석션으로 여과해 낸다. 수율: 72 g (190 mmol), 이론의 92%, ¹H-NMR 에 따른 순도 약 98%.

[0185] b) [2-(3-브로모카르바졸-9-일)페닐]디페닐메탄올

[0186] 처음에 21.3 g (86.7 mmol) 의 세륨(III) 클로리드를 250 ml 의 THF 에 도입한다. 실온에서 이 용액에, 600 ml 의 건조된 THF 에 용해된, 30 g (78.9 mmol) 의 메틸 2-(3-브로모-9H-카르바졸)벤조에이트를 한방울씩 첨가하고, 혼합물을 2.5 h 동안 교반한다. 혼합물을 0 °C 로 냉각시키고, THF 중 2 M 페닐마그네슘 브로미드 118.3 ml (236 mmol) 를 첨가하고, 혼합물을 밤새 교반한다. 반응이 완료될 때, 혼합물을 -30 °C 에서 메탄올로 조심스럽게 퀘칭한다. 반응 용액을 3 분의 1 로 농축시키고, 1 l 의 CH₂Cl₂ 를 첨가하고, 혼합물을 세척하고, 유기상을 MgSO₄ 위에서 건조시키고, 증발시킨다. 수율: 38.7 g (76.7 mmol), 이론의 97%, ¹H-NMR 에 따른 순도 약 94%.

[0187] c) 3-브로모-8,8-디페닐-8H-인돌로[3,2,1-de]아크리딘

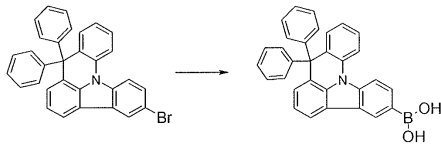
[0188] 38.7 g (76.7 mmol) 의 2-[2-(3-브로모카르바졸-9-일)페닐]디페닐-메탄올을 750 ml 의 탈기된 디클로로메탄에 용해시키고, 49.6 g 의 다중인산 및 33 ml 의 메탄설폰산의 현탁액을 첨가하고, 혼합물을 1 h 동안 60 °C 에서 가열한다. 뱃치를 냉각시키고, 물을 첨가한다. 침전되는 고체를 CH₂Cl₂/THF (1:1) 에 용해시킨다. 용액을 20% NaOH 를 이용하여 조심스럽게 알칼리성으로 만들고, 상을 분리하고, MgSO₄ 위에서 건조시킨다. 수득된 고체를 헵탄으로 교반하여 세척한다. 수율: 22 g (45 mmol), 이론의 59%, ¹H-NMR 에 따른 순도 약 95%.

[0189] 하기 화합물이 유사하게 수득된다:

실시예	출발 물질	생성물	수율
9			63%
10			71%
11			59%
12			56%

[0190]

[0191] 실시예 13: 8,8-디페닐-8H-인돌로[3,2,1-de]아크리딘-6-보론산



[0192]

[0193] 125.9 g (259 mmol) 의 브로모-8,8-디페닐-8H-인돌로[3,2,1-de]아크리딘을 1500 ml 의 건조 THF 에 용해시키고, 시클로헥산 중 *n*-부틸리튬의 2.5 M 용액 135 ml (337 mmol) 를 -70 °C 에서 한방울씩 첨가하고, 1 h 후 37 ml 의 트리메틸 보레이트 (336 mmol) 를 한방울씩 첨가하고, 혼합물 1 h 에 걸쳐 실온으로 데우고, 용매를 제거하고, ¹H-NMR 에 따라 균일한 잔류물을 추가 정제 없이 다음 반응에 이용한다.

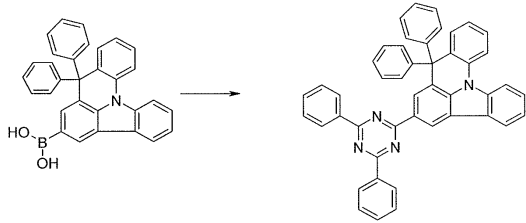
[0194] 수율: 87.6 g (194 mmol), 이론의 75%, ¹H-NMR 에 따른 순도 약 96%.

[0195] 하기 화합물이 유사하게 수득된다:

실시예	출발 물질	생성물	수율
14			61%
15			55%

[0196]

[0197] 실시예 16: 6-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-8,8-디페닐-8H-인돌로[3,2,1-de]아크리딘



[0198]

[0199] 20 g (44 mmol) 의 8,8-디페닐-8H-인돌로[3,2,1-de]아크리딘-6-보론산, 11.7 g (44 mmol) 의 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 및 2.9 g (27.4 mmol) 의 탄산나트륨을 70 ml 의 톨루엔, 70 ml 의 디옥산 및 50 ml 의 물에 현탁시킨다. 이 현탁액에 1.44 mg (1.24 mmol) 의 Pd(PPh₃)₄ 를 첨가하고, 반응 혼합물을 16 h 동안 환류 하에 가열한다. 냉각 후, 유기상을 분리해 내고, 실리카 겔을 통해 여과시키고, 200 ml 의 물로 3 회 세척한 뒤에, 증발건조시킨다. 잔류물을 톨루엔으로부터 그리고 디클로로메탄/이소프로판올로부터 재결정화시키고, 마지막으로 고 진공 중에서 승화시키며, 순도는 99.9% 이다. 수율은 22.4 g (35 mmol) 이며, 이론의 80% 에 상응한다.

[0200] 하기 화합물이 유사하게 수득된다:

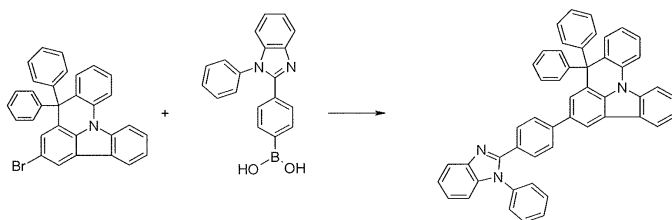
실시예	출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
17				67%

[0201]

18				72%
19				61%
20				66%

[0202]

[0203] 실시예 21: 8,8-디페닐-6-[4-(1-페닐-1H-벤조이미다졸-2-일)-페닐]-8H-인돌로[3,2,1-de]아크리딘



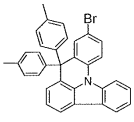
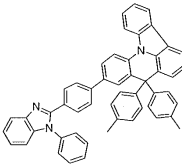
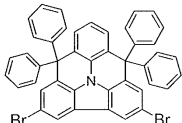
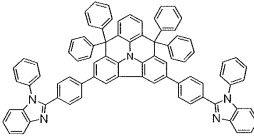
[0204]

[0205] 0.27 g (0.9 mmol) 의 트리-*o*-톨릴포스핀 및 그 후 33.5 mg (0.15 mmol) 의 팔라듐(II) 아세테이트를 강하게 교반하면서 7.5 ml 의 디옥산, 15 ml 의 톨루엔 및 18 ml 의 물의 혼합물 중 13.6 g (28 mmol) 의 3-브로모-

8,8-디페닐-8H-인돌로[3,2,1-de]아크리딘, 9.42 g (30 mmol) 의 벤지미다졸보론산 및 7.8 g (31.5 mmol) 의 인산 칼륨 수화물의 탈기된 현탁액에 첨가한다. 5 h 동안 환류 하에 가열 후, 혼합물이 냉각되게 한다.

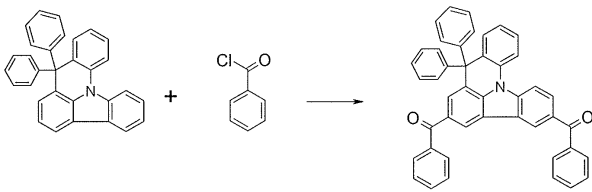
침전물을 석션으로 여과해 내고, 10 ml 의 에탄올/물 (1:1, v:v) 로 3 회 및 5 ml 의 에탄올로 3 회 세척한 뒤에, 진공 속에서 건조시키고, 디옥산으로부터 재결정화시킨다. 수율: 16 g (23 mmol), 이론의 85%, ¹H-NMR 에 따른 순도 약 99.9%.

[0206] 하기 화합물이 유사하게 수득된다:

실시예	출발 물질	생성물	수율
22	 J.Mater.Chem.2009,19, 7661-7665		73%
23			65%

[0207]

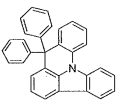
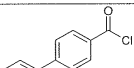
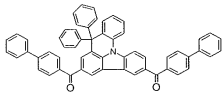
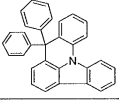
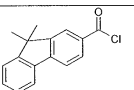
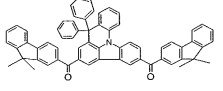
[0208] 실시예 24: (8,8-디페닐-8H-인돌로[3,2,1-de]아크리딘-3-일)페닐메탄논



[0209]

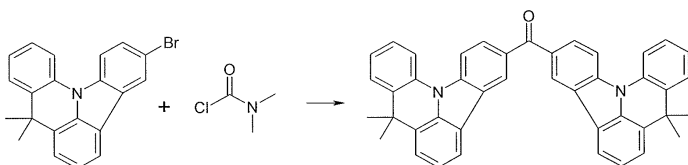
[0210] 40 ml 의 클로로포름 중 6.1 g (18 mmol) 의 8,8-디페닐-8H-인돌로-[3,2,1-de]아크리딘의 탈기된 용액을 0 °C 로 냉각시키고, 5 g (37 mmol) 의 AlCl₃ 를 첨가한다. 그 후 이 온도에서 3.9 g 의 벤조일 클로리드를 한 방울씩 첨가하고, 혼합물을 8 h 동안 교반한다. 50 ml 의 물을 혼합물에 첨가하고, 유기상을 분리해 내고, 실리카 겔을 통해 여과시키고, 증발건조시킨다. 잔류물을 톨루엔으로부터 그리고 디클로로메탄/이소프로판올로부터 재결정화시키고, 마지막으로 고 진공 중에서 승화시키며, 순도는 99.9% 이다. 수율은 13.7 g (27 mmol) 이며, 이론의 90% 에 상응한다.

[0211] 하기 화합물이 유사하게 수득된다:

실시예	출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
25				72%
26				83%

[0212]

[0213] 실시예 27: 비스-(8,8-디메틸-8H-인돌로[3,2,1-d,e]아크리딘-3-일)메탄논



[0214]

- [0215] *n*-부틸리튬 (헥산 중 2.0 N 용액 26.6 ml) 을 -78 °C 에서 THF (250 ml) 중 3-브로모-8,8-디메틸-8*H*-인돌로 [3,2,1-de]아크리딘 (15.4 g, 43 mmol) 의 용액에 첨가하고, 혼합물을 1 h 동안 이 온도에서 교반하고, THF (2 ml) 중 디메틸카르바모일 클로리드 (2.0 ml, 21 mmol) 의 용액을 첨가한다. 추가로 2 h 동안 -78 °C 에서 교반 후, 반응 혼합물을 서서히 실온으로 데우고, 얼음물에 첨가한다. 수득되는 침전물을 여과에 의해 분리해 내고, 디옥산으로부터의 반복된 재결정화에 의해 정제한다. 마지막으로 고 진공 중에서 승화 (T = 350 °C, p = 7 x 10⁻⁵ mbar) 시켜 순도 99.9% 의 생성물 (5.2 g, 20%) 을 수득한다.
- [0216] **실시예 28: OLED 의 제조**
- [0217] WO 04/058911 에 따른 일반적 방법을 본원에 기재된 상황 (층 두께 변이, 사용된 재료) 에 맞게 조정하여 본 발명에 따른 OLED 및 선행 기술에 따른 OLED 를 제조한다.
- [0218] 다양한 OLED 에 대한 결과가 하기 실시예 29 내지 55 에 제시되어 있다 (참조, 표 1 내지 3). 구조화된 ITO (인듐 주석 산화물) 로 150 nm 두께로 코팅된 유리판을 가공 개선을 위해 PEDOT [폴리-(3,4-에틸렌디옥시-2,5-티오펜), 몰로부터 스핀-코팅됨; H. C. Starck, Goslar, Germany 에서 구입] 로 20 nm 로 코팅한다. 이러한 코팅된 유리판은 OLED 가 적용되는 기판을 형성한다. OLED 는 원칙적으로 하기 층 구조를 갖는다: 기판 / 정공-수송층 (HTL) / 전자-블록층 (EBL) / 방출층 (EML) / 임의적 정공-블록층 (HBL) / 전자-수송층 (ETL) / 임의적 전자-주입층 (EIL) 및 마지막으로 캐소드. 캐소드는 100 nm 두께의 알루미늄 층으로 형성된다. OLED 의 정밀한 구조가 표 1 에 제시되어 있다. OLED 의 제조에 사용한 재료가 표 2 에 제시되어 있다.
- [0219] 모든 재료를 진공 챔버 내에서 열 증착에 의해 도포한다. 여기서 방출층은 항상 하나 이상의 매트릭스 재료 (호스트 재료), 및 동시-증발에 의해 매트릭스 재료(들)과 특정 부피비로 혼합되는 방출 도펀트 (이미터) 로 이루어진다. 여기서 H3:CBP:TER1 (55%:35%:10%) 와 같은 정보는 재료 H3 이 층에 부피비 55% 로 존재하고, CBP 가 부피비 35% 로 존재하고, TER1 이 부피비 10% 로 존재함을 의미한다. 유사하게, 전자-수송층도 2 종의 재료의 혼합물로 이루어질 수 있다.
- [0220] OLED 를 표준 방법에 의해 특성을 분석한다. 이를 위해, 전류/전압/휘도 특성선 (IUL 특성선) 으로부터 산출되는, 휘도에 따른 외부 양자 효율 (EQE, 퍼센트로 측정됨), 전력 효율 (lm/W 로 측정됨), 전류 효율 (cd/A 로 측정됨), 전계발광 스펙트럼, 및 수명이 측정된다. 수명은 휘도가 특정 초기 휘도에서 특정 비율로 떨어진 후의 시간으로서 정의된다. LD80 은 상기 수명이 휘도가 초기 휘도의 80% 로, 즉, 예를 들어, 4000 cd/m² 에서 3200 cd/m² 로 떨어지는 시간임을 의미한다.
- [0221] 본 발명에 따른 화합물의 이점을 설명하기 위해 일부 실시예를 이하에서 더욱 상세히 설명한다. 그러나, 이것이 단지 표 3 에 제시된 데이터의 선택을 나타낸다는 점에 유의해야 한다. 표로부터 명백하듯이, 더욱 상세히 설명되지 않은 본 발명에 따른 화합물을 사용하더라도 선행 기술보다 나은 개선이 달성되며, 어떤 경우는 모든 파라미터의 개선이, 어떤 경우는 오직 효율 또는 전압 또는 수명의 개선이 관찰된다. 그러나, 상이한 적용은 상이한 파라미터의 최적화를 요구하므로, 상기 파라미터 중 단 하나의 개선이 현저한 진보를 나타낸다.
- [0222] **인광 OLED 의 매트릭스 재료로서의 본 발명에 따른 화합물의 용도**
- [0223] 본 발명에 따른 화합물은 특히 인광 도펀트용 매트릭스 재료 (호스트 재료) 로서 이용될 수 있다. 여기서 화합물 H2 및 H3 이 사용된다. 화합물 H1 및 H4 가 선행 기술에 따른 비교로서 사용된다. 녹색-방출 도펀트 TEG1 및 적색-방출 도펀트 TER1 을 포함하는 OLED 가 제시되어 있다. OLED 에 대한 결과가 표 3 에 제시되어 있다. 실시예 29 내지 32A 는 선행 기술에 따른 재료를 포함하는 OLED 를 나타내고, 비교예로서의 역할을 한다.
- [0224] 적색- 및 녹색-방출 OLED 용 매트릭스 재료로서 본 발명에 따른 화합물을 사용할 때의 이점은 수명의 증가와 동시에 작동 전압의 감소 및 결과적인 전력 효율의 현저한 증가이다 (참조, 실시예 33-38). 따라서, H3 을 사용하면 선행 기술 H1 에 비해 수명이 55% 더 길어지고, 마찬가지로 전력 효율도 매우 현저히, 즉 약 40% 개선된다 (참조, 실시예 38 및 32). 녹색-방출 OLED 에서 H2 을 사용하면, 이들 파라미터들이 마찬가지로 매우 현저히, 그러나 H3 을 사용할 때보다는 약간 적게, 개선된다. 선행 기술 H4 와 비교할 때, 본 발명에 따른 화합물은 효율, 전압 및 수명에 관하여 훨씬 더 큰 개선을 나타낸다.
- [0225] 적색 방출의 경우, H2 가 H3 보다 약간 더 나은 특성 데이터를 나타내며, 여기서 전력 효율은 30% 까지 증가하고, 수명은 선행 기술에 비해 약 35% 개선된다 (참조, 실시예 35 및 30).
- [0226] 특히, 가교 Y 상에서 페널 고리에 의해 치환된 화합물이 또한 양호한 성능 데이터를 나타낸다. 따라서, 예

를 들어, H5 는 H3 에 비해 더 양호한 수명과 함께 거의 동일한 전력 효율을 나타낸다 (실시예 41 및 47). H2 와 H9 의 비교의 경우에도 같다 (실시예 35 및 36).

[0227] 전자-수송 재료로서의 본 발명에 따른 화합물의 용도

[0228] 본 발명에 따른 화합물은 전자-수송 재료로서도 이용될 수 있다. 여기서 화합물 ETM2 가 사용된다. 화합물 Alq₃ 및 ETM1 이 선행 기술에 따른 비교로서 사용된다. 실시예 29 내지 32A 는 선행 기술에 따른 재료를 포함하는 OLED 를 나타내며, 비교예로서의 역할을 한다. 선행 기술과 비교할 때, 본 발명에 따른 화합물은 전자-수송 재료로서 사용시 개선된 효율 및 더 낮은 작동 전압에 의해 구별된다.

[0229] LiF 로 이루어지는 전자-주입층을 사용하는 경우, ETM2 를 사용하면 Alq₃ 에 비해 전류 효율이 약 10% 개선되나, 특히 더 낮은 작동 전압 때문에 전력 효율이 약 30% 개선된다 (참조, 실시예 29 및 39). ETM2 및 LiQ 의 혼합물을 전자-수송층으로서 이용하는 경우 (실시예 40), 전류 효율이 54 cd/A 에서 61 cd/A 로 증가될 수 있다. 본 발명에 따른 화합물 ETM2 을 사용하면 약간 더 낮은 작동 전압과 함께 전력 효율의 약 20% 의 현저한 증가가 수득된다 (참조, 실시예 40 와 함께 실시예 32). 두 경우 모두 (실시예 39 및 40), ETM2 을 사용할 때, 선행 기술에 따른 전자-수송 재료를 사용할 때보다 부품의 수명이 약간 더 길다. 가교 상에 페닐 고리를 함유하는 화합물 H11 을 ETM 으로서 사용하고 가교 상에 메틸기를 함유하는 화합물 ETM2 와 비교하는 경우, 수명은 약간 개선될 수 있으나, 다른 성능 데이터는 대략 동일하게 유지되는 것을 볼 수 있다 (실시예 55 및 40).

[0230]

표 1: OLED 의 구조

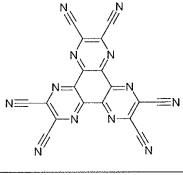
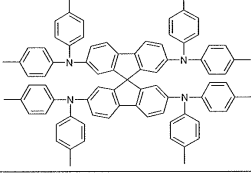
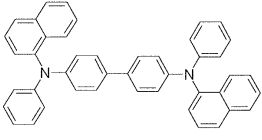
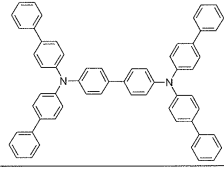
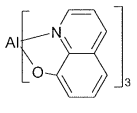
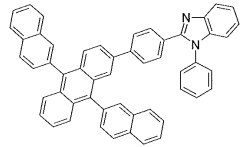
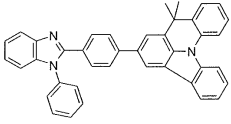
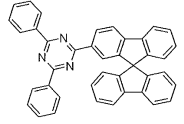
실시예	HTL 두께	EBL 두께	EML 두께	HBL 두께	ETL 두께	EIL 두께
29 (비교)	HTM1 20 nm	NPB 20 nm	H1:TER1 (85%:15%) 30 nm	---	Alq ₃ 20 nm	LiF 1 nm
30 (비교)	HTM1 20 nm	NPB 20 nm	H1:CBP:TER1 (45%:45%:10%) 30 nm	H1 10 nm	Alq ₃ 20 nm	LiF 1 nm
31 (비교)	HTM1 160 nm	EBM1 20 nm	H1:TEG1 (90%:10%) 30 nm	H1 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 nm	---
32 (비교)	HTM1 160 nm	EBM1 20 nm	H1:TEG1 (90%:10%) 30 nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 nm	---
32A (비교)	HTM1 160 nm	EBM1 20 nm	H4:TEG1 (90%:10%) 30 nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 nm	---
33	HTM1 20 nm	NPB 20 nm	H2:TER1 (85%:15%) 30 nm	---	Alq ₃ 20 nm	LiF 1 nm
34	HTM1 20 nm	NPB 20 nm	H3:TER1 (85%:15%) 30 nm	---	Alq ₃ 20 nm	LiF 1 nm
35	HTM1 20 nm	NPB 20 nm	H2:CBP:TER1 (45%:45%:10%) 30 nm	H1 10 nm	Alq ₃ 20 nm	LiF 1 nm
36	HTM1 160 nm	EBM1 20 nm	H2:TEG1 (90%:10%) 30 nm	H1 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 nm	---
37	HTM1 160 nm	EBM1 20 nm	H3:TEG1 (90%:10%) 30 nm	H1 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 nm	---
38	HTM1 160 nm	EBM1 20 nm	H3:TEG1 (90%:10%) 30 nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 nm	---
39	HTM1 20 nm	NPB 20 nm	H1:TER1 (85%:15%) 30 nm	---	ETM2 20 nm	LiF 1 nm
40	HTM1 160 nm	EBM1 20 nm	H1:TEG1 (90%:10%) 30 nm	---	ETM2:LiQ (50%:50%) 40 nm	---
41	HTM1 160 nm	EBM1 20 nm	H5:TEG1 (90%:10%) 30 nm	H1 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 nm	---
42	HTM1 160 nm	EBM1 20 nm	H6:TEG1 (90%:10%) 30 nm	H1 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 nm	---
43	HTM1 20 nm	NPB 20 nm	H7:TER1 (85%:15%) 30 nm	---	Alq ₃ 20 nm	LiF 1 nm
44	HTM1 20 nm	NPB 20 nm	H8:TER1 (85%:15%) 30 nm	---	Alq ₃ 20 nm	LiF 1 nm
45	HTM1 160 nm	EBM1 20 nm	H9:TEG1 (90%:10%) 30 nm	H1 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 nm	---
46	HTM1 160 nm	EBM1 20 nm	H10:TEG1 (90%:10%) 30 nm	H1 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 nm	---
47	HTM1 160 nm	EBM1 20 nm	H11:TEG1 (90%:10%) 30 nm	H1 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 nm	---
48	HTM1 160 nm	EBM1 20 nm	H12:TEG1 (90%:10%) 30 nm	H1 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 nm	---
49	HTM1 160 nm	EBM1 20 nm	H13:TEG1 (90%:10%) 30 nm	H1 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 nm	---

[0231]

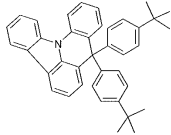
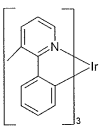
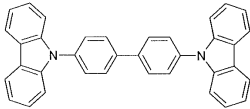
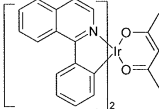

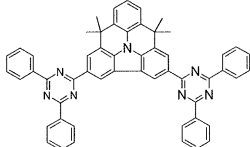
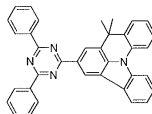
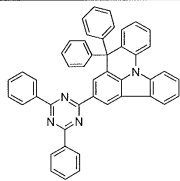
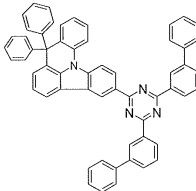
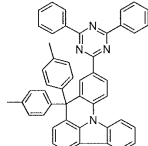
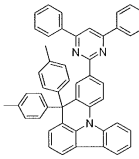
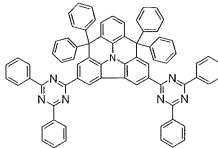
50	HTM1 160 nm	EBM1 20 nm	30 nm H14:TEG1 (90%:10%) 30 nm	H1 10 nm	40 nm ETM1:LiQ (50%:50%) 40 nm	---
51	HTM1 20 nm	NPB 20 nm	H15:TER1 (85%:15%) 30 nm	---	Alq ₃ 20 nm	LiF 1 nm
52	HTM1 160 nm	EBM1 20 nm	H16:TEG1 (90%:10%) 30 nm	H1 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 nm	---
53	HTM1 160 nm	EBM1 20 nm	H14:IC1:TEG1 (30%:60%:10%) 30 nm	H1 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 nm	---
54	HTM1 160 nm	EBM1 20 nm	H16:IC1:TEG1 (30%:60%:10%) 30 nm	H1 10 nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 40 nm	---
55	HTM1 160 nm	EBM1 20 nm	H1:TEG1 (90%:10%) 30 nm	---	H11:LiQ (50%:50%) 40 nm	---

[0232]

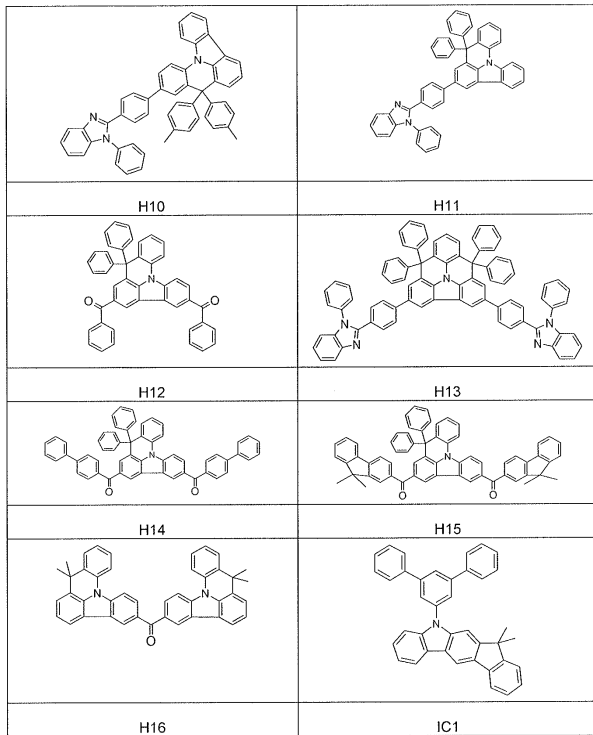
[0233] 표 2: 사용된 재료의 구조식

	
HIL1	HTM1
	
NPB	EBM1
	
Alq ₃	ETM1
	
ETM2	H1

[0234]

	
H4	TEG1
	
CBP	TER1
	
LiQ	H2
	
H3	H5
	
H6	H7
	
H8	H9

[0235]



[0236]

[0237] 표 3: 인광 OLED 의 ETM 및 매트릭스 재료로서의 본 발명에 따른 화합물의 용도

[0238]

실시예	1000 cd/m ² 에 대한 전압	1000 cd/m ² 에서의 효율	1000 cd/m ² 에서의 효율	1000 cd/m ² 에서의 CIE x/y	4000 cd/m ² 로부터의 LD80
29 (비교)	5.0 V	7.2 cd/A	4.5 lm/W	0.69/0.31	230 h
30 (비교)	5.2 V	8.1 cd/A	4.9 lm/W	0.68/0.32	250 h
31 (비교)	4.7 V	55 cd/A	37 lm/W	0.36/0.61	440 h
32 (비교)	4.6 V	54 cd/A	37 lm/W	0.37/0.60	400 h
32A (비교)	4.9 V	46 cd/A	30 lm/W	0.37/0.60	270 h

33	4.6 V	8.4 cd/A	5.7 lm/W	0.69/0.31	310 h
34	4.6 V	8.2 cd/A	5.6 lm/W	0.68/0.31	330 h
35	4.8 V	9.8 cd/A	6.4 lm/W	0.69/0.32	340 h
36	3.7 V	59 cd/A	50 lm/W	0.36/0.60	590 h
37	3.6 V	58 cd/A	51 lm/W	0.36/0.61	670 h
38	3.4 V	55 cd/A	51 lm/W	0.36/0.61	620 h
39	4.3 V	7.9 cd/A	5.8 lm/W	0.69/0.32	250 h
40	4.3 V	61 cd/A	45 lm/W	0.37/0.61	410 h
41	3.5 V	56 cd/A	50 lm/W	0.36/0.61	740 h
42	3.8 V	52 cd/A	44 lm/W	0.36/0.60	710 h
43	4.7 V	8.5 cd/A	5.7 lm/W	0.69/0.31	290 h
44	4.4 V	7.8 cd/A	5.5 lm/W	0.69/0.31	360 h
45	3.7 V	58 cd/A	49 lm/W	0.36/0.61	660 h
46	4.4 V	52 cd/A	37 lm/W	0.36/0.61	510 h
47	4.5 V	49 cd/A	34 lm/W	0.36/0.60	480 h
48	4.0 V	57 cd/A	44 lm/W	0.36/0.60	530 h
49	4.6 V	47 cd/A	32 lm/W	0.36/0.60	420 h
50	3.9 V	55 cd/A	44 lm/W	0.36/0.61	620 h
51	4.8 V	7.9 cd/A	5.2 lm/W	0.69/0.31	380 h
52	3.4 V	57 cd/A	53 lm/W	0.36/0.60	640 h
53	4.1 V	53 cd/A	41 lm/W	0.36/0.61	700 h
54	3.5 V	53 cd/A	47 lm/W	0.36/0.61	730 h
55	4.3 V	63 cd/A	45 lm/W	0.36/0.61	450 h

[0239]