



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2018년02월20일

(11) 등록번호 10-1830592

(24) 등록일자 2018년02월12일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C09K 11/06 (2006.01) C07D 239/70 (2006.01)

C07D 471/06 (2006.01) C09K 11/02 (2006.01)

H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류

C09K 11/06 (2013.01)

C07D 239/70 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2017-7023128(분할)

(22) 출원일자(국제) 2009년06월23일

심사청구일자 2017년08월18일

(85) 번역문제출일자 2017년08월18일

(65) 공개번호 10-2017-0100040

(43) 공개일자 2017년09월01일

(62) 원출원 특허 10-2016-7029586

원출원일자(국제) 2009년06월23일

심사청구일자 2016년10월24일

(86) 국제출원번호 PCT/EP2009/057754

(87) 국제공개번호 WO 2010/006890

국제공개일자 2010년01월21일

(30) 우선권주장

08160714.5 2008년07월18일

유럽특허청(EPO)(EP)

(56) 선행기술조사문헌

Tetrahedron Letters, 49, (2008), 1808-1811.

Chemistry of Heterocyclic Compounds, Vol 38,  
No.8, 2002.Tetrahedron Letters, Vol.26, No.6, pp  
727-728, 1985.

J. Org. Chem. 2005, 70, 707-708.

(73) 특허권자

유디씨 아일랜드 리미티드

아일랜드 더블린 15 밸리콜린 블랜차즈타운 코퍼  
레이트 파크 2

(72) 발명자

섀퍼, 토마스

스위스 체하-4410 리스탈 바이트베크 15 데

아이헨베르거, 토마스

스위스 체하-4056 바젤 용스트라쎄 17

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

특허법인 광장리앤고

전체 청구항 수 : 총 9 항

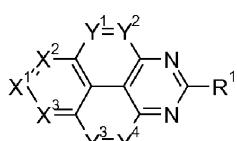
심사관 : 지무근

(54) 발명의 명칭 전자 용품을 위한 아자페렌

**(57) 요 약**

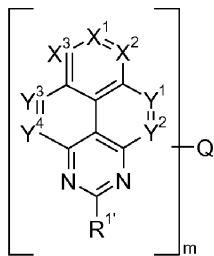
본 발명은 특히 인광 방출체를 위한 호스트, 전자 수송 물질 또는 방출체 물질로서의 하기 화학식 I 또는 화학식 III의 아자페렌을 포함하는 전자 장치, 특히 전계발광 장치에 관한 것이다:

&lt;화학식 I&gt;



(뒷면에 계속)

## &lt;화학식 III&gt;



상기 식에서,

$Y^1, Y^2, Y^3, Y^4, X^1, X^2$  및  $X^3$ 은 서로 독립적으로 N 또는  $CR^4$ 이고,

단,  $X^1, X^2$  및  $X^3$  기 중 하나 이상은  $CR^4$  기이고,

$R^1$ 은 수소, F,  $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$  또는 유기 치환기이고,

$R^4$ 는 수소, F,  $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$  또는 유기 치환기이거나, 또는

서로 인접한 치환기  $R^1, R^{1'}$  및  $R^4$  중 임의의 것이 함께 방향족 또는 헤테로방향족 고리 또는 고리계 (이는 임의로 치환될 수 있음)를 형성하고,  $m$ 은 1 내지 6의 정수이고,  $R^{100}, R^{101}$  및  $R^{102}$ 는 서로 독립적으로  $C_1-C_8$ 알킬기,  $C_6-C_{24}$ 아릴기 또는  $C_7-C_{12}$ 아르알킬기 (이는 임의로 치환될 수 있음)이고, Q는 연결기이고, 단, 화학식 III의 화합물에서 치환기  $R^{1'}$  또는  $R^4$  중 하나 이상은 Q 기이다. 상기 호스트는 인광 물질과 함께 기능하여 전계발광 장치의 개선된 효율성, 안정성, 제조성 또는 분광 특성을 제공할 수 있다.

## (52) CPC특허분류

쉐보타레바, 나탈리아

프랑스 애프-68220 아젠탈 르 바 뤼 뒤 제레 33

C07D 471/06 (2013.01)

C09K 11/025 (2013.01)

H01L 51/0054 (2013.01)

H01L 51/006 (2013.01)

H01L 51/0072 (2013.01)

H01L 51/0085 (2013.01)

H01L 51/5016 (2013.01)

H01L 51/5048 (2013.01)

Y10S 428/917 (2013.01)

## (72) 발명자

바르돈, 크리스티나

독일 79761 발트슈트 칼바린베르크스트라쎄 5

리치, 안드레아

스위스 체하-4052 바젤 크리스토프 메리안-플라츠

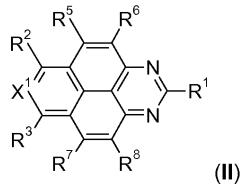
2

## 명세서

### 청구범위

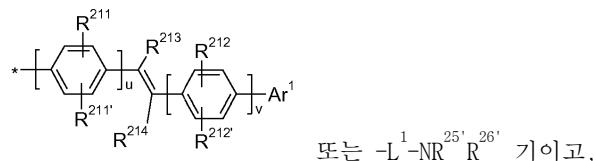
#### 청구항 1

하기 화학식 II의 화합물을 포함하는 전계발광(electroluminescent) 장치:

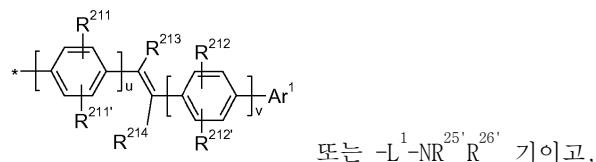


X<sup>1</sup>은 CR<sup>4</sup>이고,

R<sup>1</sup>은 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>페플루오로알킬, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, G에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>알카닐, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, C<sub>7</sub>-C<sub>25</sub>아르알킬, -CO-R<sup>28</sup>, -CN,



R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup> 및 R<sup>8</sup>은 서로 독립적으로 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>페플루오로알킬, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, G에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>페테로아릴, G에 의해 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>페테로아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>알카닐, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, C<sub>7</sub>-C<sub>25</sub>아르알킬, -CO-R<sup>28</sup>, -CN,



여기서, u는 0 또는 1이고, v는 0 또는 1이고,

R<sup>211</sup>, R<sup>211'</sup>, R<sup>212</sup> 및 R<sup>212'</sup>은 서로 독립적으로 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시이고,

R<sup>213</sup> 및 R<sup>214</sup>은 서로 독립적으로 H 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬이고,

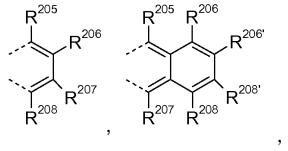
Ar<sup>1</sup>은 -NR<sup>25</sup>-R<sup>26</sup>, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, G에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>페테로아릴, 또는 G에 의해 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>페테로아릴이고,

R<sup>25</sup> 및 R<sup>26</sup>은 서로 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, G에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>페테로아릴, G에 의해 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>페테로아릴이거나, 또는

R<sup>25</sup> 및 R<sup>26</sup>은 그들이 결합된 질소 원자와 함께, 치환될 수 있는 헤테로방향족 고리 또는 고리계를 형성하고,

$L^1$ 은 단일 결합 또는 가교 단위 BU이고,

$R^5$ 와  $R^6$ , 및  $R^7$ 과  $R^8$ 의 두 쌍은, 서로 독립적으로, 함께



$R^{205}$ ,  $R^{206}$ ,  $R^{207}$ ,  $R^{208}$ ,  $R^{208'}$ , 또는  $R^{209}$ ,  $R^{210}$ ,  $Y$ 를 형성하고,

여기서  $R^{206'}$ ,  $R^{208'}$ ,  $R^{205}$ ,  $R^{206}$ ,  $R^{207}$ ,  $R^{208}$ ,  $R^{209}$  및  $R^{210}$ 은 서로 독립적으로 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, 또는 E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>페플루오로알킬, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, G에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>페토로아릴, G에 의해 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>페토로아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>알키닐, C<sub>7</sub>-C<sub>25</sub>아르알킬, CN 또는 -CO-R<sup>28</sup>이고,

Y는 O 또는 N-R<sup>25</sup>이고,

D는 -CO-, -COO-, -S-, -SO-, -SO<sub>2</sub>-, -O-, -NR<sup>25</sup>-, -SiR<sup>30</sup>R<sup>31</sup>-, -POR<sup>32</sup>-, -CR<sup>23</sup>=CR<sup>24</sup>- 또는 -C≡C-O-이고,

E는 -OR<sup>29</sup>, -SR<sup>29</sup>, -NR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>, -COR<sup>28</sup>, -COOR<sup>27</sup>, -CONR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>, -CN 또는 할로겐이고,

G는 E, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>페플루오로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, 또는 E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시이고,

여기서, R<sup>23</sup> 및 R<sup>24</sup>는 서로 독립적으로 H, C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, 또는 -O-가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬이고,

R<sup>25</sup> 및 R<sup>26</sup>은 서로 독립적으로 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, 또는 -O-가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬이거나, 또는 R<sup>25</sup> 및 R<sup>26</sup>은 함께 5 또는 6원 고리 또는 고리계를 형성하고,

R<sup>27</sup>은 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, 또는 -O-가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬이고,

R<sup>28</sup>은 H, C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, 또는 -O-가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬이고,

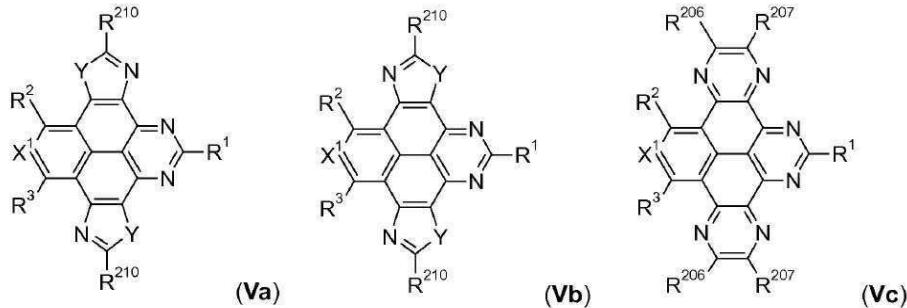
R<sup>29</sup>은 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, 또는 -O-가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬이고,

R<sup>30</sup> 및 R<sup>31</sup>은 서로 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴이고,

R<sup>32</sup>는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴이다.

## 청구항 2

제1항에 있어서, 상기 화학식 II는 하기 화학식 Va, 화학식 Vb 또는 화학식 Vc로 표시되는 전계발광 장치:



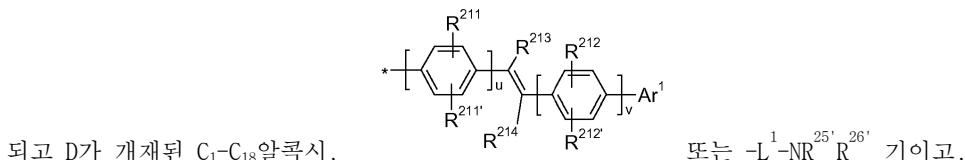
상기 식에서,

X<sup>1</sup>은 CH이고,

Y는 O 또는 NR<sup>25</sup>이고, 여기서 R<sup>25</sup>는 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, 또는 -O-가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬이고,

R<sup>206</sup>, R<sup>207</sup>, R<sup>210</sup>은 제1항에서 정의된 바와 같고,

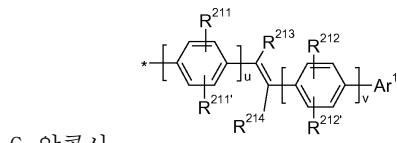
R<sup>1</sup>은 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환



되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시,

또는 -L<sup>1</sup>-NR<sup>25'</sup>-R<sup>26'</sup> 기이고,

R<sup>2</sup> 및 R<sup>3</sup>은 서로 독립적으로 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, G에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴, G에 의해 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시,



또는 -L<sup>1</sup>-NR<sup>25'</sup>-R<sup>26'</sup>이고,

여기서, u는 0 또는 1이고, v는 0 또는 1이고,

R<sup>211</sup>, R<sup>211'</sup>, R<sup>212</sup> 및 R<sup>212'</sup>는 서로 독립적으로 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시이고,

R<sup>213</sup> 및 R<sup>214</sup>는 서로 독립적으로 H 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬이고,

Ar<sup>1</sup>은 -NR<sup>25'</sup>-R<sup>26'</sup>, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, G에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴, 또는 G에 의해 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴이고,

L<sup>1</sup>은 단일 결합 또는 가교 단위 BU이고,

D는 -O- 또는 -NR<sup>25</sup>-O-이고,

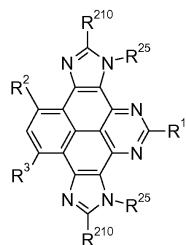
E는  $-OR^{29}$ ,  $-NR^{25}R^{26}$ ,  $-CN$  또는  $F$ 이고,  $R^{29}$ ,  $R^{25}$  및  $R^{26}$ 은 제1항에서 정의된 바와 같고,

G는 E,  $C_1-C_{18}$ 알킬, D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 페플루오로알킬,  $C_1-C_{18}$ 알콕시, 또는 E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알콕시이고,

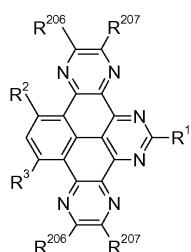
$R^{25'}$  및  $R^{26'}$ 은 서로 독립적으로, 치환될 수 있는 페닐, 나프틸, 안트릴, 비페닐릴, 2-플루오레닐, 페난트릴 또는 페릴레닐이거나, 또는  $R^{25'}$  및  $R^{26'}$ 은 그들이 결합된 질소 원자와 함께 헤테로방향족 고리 또는 고리계를 형성한다.

### 청구항 3

제2항에 있어서, 하기 화학식의 화합물을 포함하는 전계발광 장치:



화합물	$R^1$	$R^2$	$R^3$	$R^{25}$	$R^{210}$
I-1	···	···	···	···	···
I-2	···	···	···	···	···
I-3	···	···	···	···	···
I-4	···	···	···	···	···

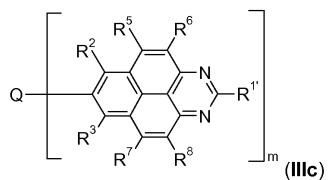
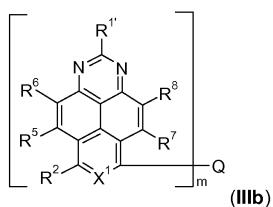
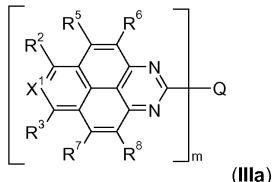


화합물	$R^1$	$R^2$	$R^3$	$R^{206}$	$R^{207}$
K-1	···	···	···	5)	5)
K-2	···	···	···	CN	CN
K-3	···	···	···	H	CH <sub>3</sub>
K-4	···	···	···	CH <sub>3</sub>	H
K-5	···	···	···	H	H
K-6	3)	···	···	H	H
K-7	7)	···	···	H	H
K-8	···	···	···	5)	5)



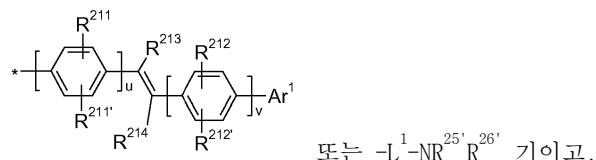
## 청구항 4

제1항에 있어서, 상기 화학식 II는 하기 화학식 IIIa, 화학식 IIIb 또는 화학식 IIIc로 표시되는 전계발광 장치:

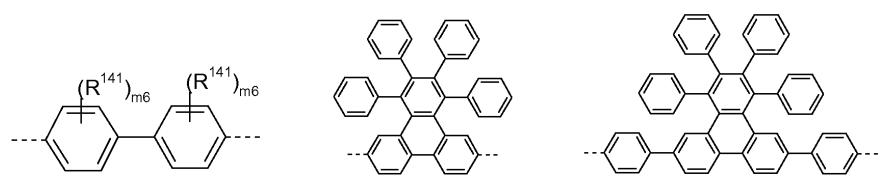
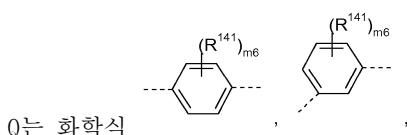


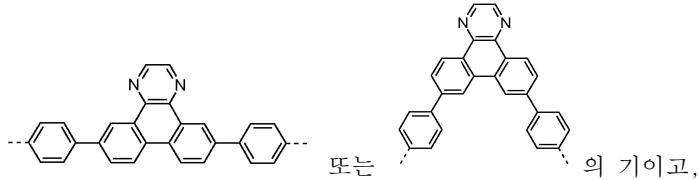
상기 식에서,  $m$ 은 1 내지 6의 정수이고,

$R^{1'}$ 는 H,  $C_1-C_{18}$ 알킬, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 페플루오로알킬,  $C_6-C_{24}$ 아릴, G에 의해 치환된  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_2-C_{18}$ 알케닐,  $C_2-C_{18}$ 알카닐,  $C_1-C_{18}$ 알콕시, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알콕시,  $C_7-C_{25}$ 아르알킬,  $-CO-R^{28}$ ,  $-CN$ ,



$R^2$ ,  $R^3$ ,  $X^1$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$  및  $R^8$ 은 제1항에서 정의된 바와 같고,





여기서, R<sup>141</sup>은 각각의 경우에 동일하거나 상이할 수 있고, -O-가 개재될 수 있는 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알콕시이고, m6은 0, 1 또는 2이다.

#### 청구항 5

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서, 전계발광 장치가 캐소드, 애노드, 및 그 사이의, 호스트 물질 및 인광성 발광 물질을 함유하는 발광층을 포함하고, 여기서 호스트 물질이 제1항에 따른 화학식 II의 화합물인 전계발광 장치.

#### 청구항 6

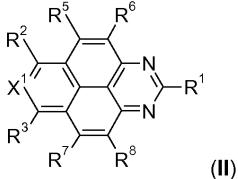
제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서, 전계발광 장치가 캐소드, 애노드 및 전자 수송 물질을 포함하고, 여기서 전자 수송 물질이 제1항에 따른 화학식 II의 화합물이거나 또는 그를 포함하는 것인 전계발광 장치.

#### 청구항 7

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서, 전계발광 장치가 캐소드, 애노드 및 방출층을 포함하고, 여기서 방출층은 제1항에 따른 화학식 II의 화합물로 이루어지거나 또는 그를 포함하는 것인 전계발광 장치.

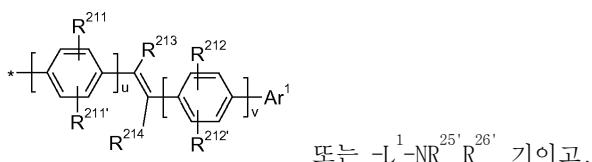
#### 청구항 8

하기 화학식 II의 화합물:

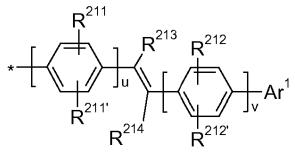


X<sup>1</sup>은 CR<sup>4</sup>이고,

R<sup>1</sup>은 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>페플루오로알킬, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, G에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>알키닐, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, C<sub>7</sub>-C<sub>25</sub>아르알킬, -CO-R<sup>28</sup>, -CN,



R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup> 및 R<sup>8</sup>은 서로 독립적으로 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>페플루오로알킬, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, G에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테노아릴, G에 의해 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테노아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>알키닐, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, C<sub>7</sub>-C<sub>25</sub>아르알킬, -CO-R<sup>28</sup>, -CN,



또는  $-L^1-NR^{25'}R^{26'}$  기이고,

여기서, u는 0 또는 1이고, v는 0 또는 1이고,

$R^{211}$ ,  $R^{211'}$ ,  $R^{212}$  및  $R^{212'}$ 는 서로 독립적으로 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시이고,

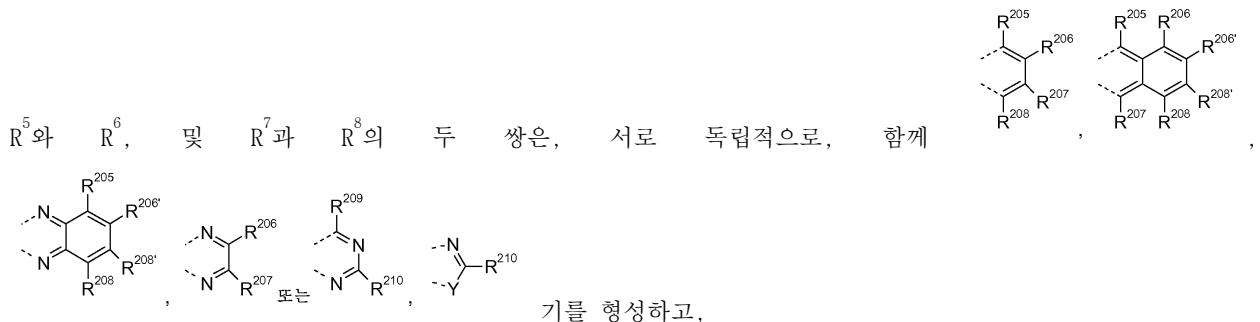
$R^{213}$  및  $R^{214}$ 는 서로 독립적으로 H 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬이고,

Ar<sup>1</sup>은  $-NR^{25'}R^{26'}$ , C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, G에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헥테로아릴, 또는 G에 의해 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헥테로아릴이고,

$R^{25'}$  및  $R^{26'}$ 는 서로 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헥테로아릴, G에 의해 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헥테로아릴이거나, 또는

$R^{25'}$  및  $R^{26'}$ 는 그들이 결합된 질소 원자와 함께, 치환될 수 있는 헥테로방향족 고리 또는 고리계를 형성하고,

L<sup>1</sup>은 단일 결합 또는 가교 단위 BU이고,



여기서, R<sup>206'</sup>, R<sup>208'</sup>, R<sup>205</sup>, R<sup>206</sup>, R<sup>207</sup>, R<sup>208</sup>, R<sup>209</sup> 및 R<sup>210</sup>은 서로 독립적으로 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, 또는 E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>페플루오로알킬, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, G에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헥테로아릴, G에 의해 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헥테로아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>알키닐, C<sub>7</sub>-C<sub>25</sub>아르알킬, CN 또는 -CO-R<sup>28</sup>이고,

Y는 0 또는 N-R<sup>25</sup>이고,

D는 -CO-, -COO-, -S-, -SO-, -SO<sub>2</sub>-, -O-, -NR<sup>25</sup>-, -SiR<sup>30</sup>R<sup>31</sup>-, -POR<sup>32</sup>-, -CR<sup>23</sup>=CR<sup>24</sup>- 또는 -C≡C-이고,

E는 -OR<sup>29</sup>, -SR<sup>29</sup>, -NR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>, -COR<sup>28</sup>, -COOR<sup>27</sup>, -CONR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>, -CN 또는 할로겐이고,

G는 E, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>페플루오로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, 또는 E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시이고,

여기서, R<sup>23</sup> 및 R<sup>24</sup>는 서로 독립적으로 H, C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, 또는 -O-가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬이고,

$R^{25}$  및  $R^{26}$ 은 서로 독립적으로  $C_6-C_{18}$ 아릴,  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴,  $C_1-C_{18}$ 알킬, 또는 -O-가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬이거나, 또는  $R^{25}$  및  $R^{26}$ 은 함께 5 또는 6원 고리 또는 고리계를 형성하고,

$R^{27}$ 은  $C_6-C_{18}$ 아릴,  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴,  $C_1-C_{18}$ 알킬, 또는 -O-가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬이고,

$R^{28}$ 은 H,  $C_6-C_{18}$ 아릴,  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴,  $C_1-C_{18}$ 알킬, 또는 -O-가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬이고,

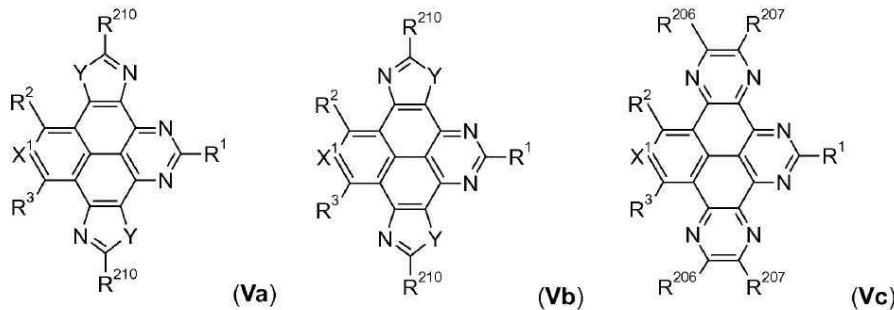
$R^{29}$ 는  $C_6-C_{18}$ 아릴,  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴,  $C_1-C_{18}$ 알킬, 또는 -O-가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬이고,

$R^{30}$  및  $R^{31}$ 은 서로 독립적으로  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_6-C_{18}$ 아릴, 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴이고,

$R^{32}$ 는  $C_1-C_{18}$  알킬,  $C_6-C_{18}$  아릴, 또는  $C_1-C_{18}$  알킬에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$  아릴이다.

청구항 9

제8항에 있어서, 상기 화학식 II의 화합물은 하기 화학식 Va, 화학식 Vb 또는 화학식 Vc로 표시되는 화합물:



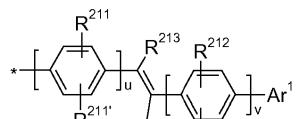
상기 식에서,

$X^1$ 은  $CH_3$ 이고,

$\gamma$ 는 0 또는  $NR^{25}$ 이고, 여기서  $R^{25}$ 은  $C_6-C_{18}$ 아릴,  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환된  $C_6-C_{18}$ 아릴,  $C_1-C_{18}$ 알킬, 또는  $-O-$ 가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬이고,

$R^{206}$ ,  $R^{207}$ ,  $R^{210}$ 은 제1항에서 정의된 바와 같고,

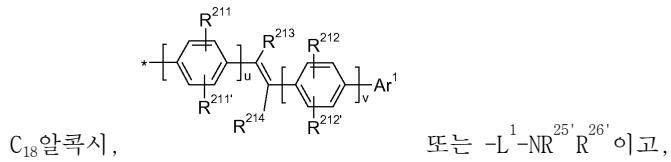
$R^1$ 은 H,  $C_{1-C_{18}}$ 알킬, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된  $C_{1-C_{18}}$ 알킬,  $C_{6-C_{24}}$ 아릴, G에 의해 치환된  $C_{6-C_{24}}$ 아릴,  $C_{1-C_{18}}$ 알록시, E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환



되고 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>을 콕시.

또는  $-L^1 - NR^{25'} R^{26'}$  기이고.

$R^2$  및  $R^3$ 은 서로 독립적으로  $H$ ,  $C_1-C_{18}$  알킬,  $E$ 에 의해 치환되거나,  $D$ 가 개재되거나, 또는  $E$ 에 의해 치환되고  $D$ 가 개재된  $C_1-C_{18}$  알킬,  $C_6-C_{24}$  아릴,  $G$ 에 의해 치환된  $C_6-C_{24}$  아릴,  $C_2-C_{20}$  헤테로아릴,  $G$ 에 의해 치환된  $C_2-C_{20}$  헤�테로아릴,  $C_1-C_{18}$  알콕시,  $E$ 에 의해 치환되거나,  $D$ 가 개재되거나, 또는  $E$ 에 의해 치환되고  $D$ 가 개재된  $C_1-$



여기서, u는 0 또는 1이고, v는 0 또는 1이고,

$R^{211}$ ,  $R^{211'}$ ,  $R^{212}$  및  $R^{212'}$ 는 서로 독립적으로 H,  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시이고,

$R^{213}$  및  $R^{214}$ 는 서로 독립적으로 H 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬이고,

$Ar^1$ 은  $-NR^{25'}R^{26'}$ ,  $C_6-C_{24}$ 아릴, G에 의해 치환된  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_2-C_{20}$ 헥테로아릴, 또는 G에 의해 치환된  $C_2-C_{20}$ 헥테로아릴이고,

$L^1$ 은 단일 결합 또는 가교 단위 BU이고,

D는  $-O-$  또는  $-NR^{25}-$ 이고,

E는  $-OR^{29}$ ,  $-NR^{25}R^{26}$ ,  $-CN$  또는 F이고,  $R^{29}$ ,  $R^{25}$  및  $R^{26}$ 은 제1항에서 정의된 바와 같고,

G는 E,  $C_1-C_{18}$ 알킬, D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 페플루오로알킬,  $C_1-C_{18}$ 알콕시, 또는 E에 의해 치환되거나, D가 개재되거나, 또는 E에 의해 치환되고 D가 개재된  $C_1-C_{18}$ 알콕시이고,

$R^{25'}$  및  $R^{26'}$ 는 서로 독립적으로, 치환될 수 있는 페닐, 나프틸, 안트릴, 비페닐릴, 2-플루오레닐, 페난트릴 또는 페릴레닐이거나, 또는  $R^{25'}$  및  $R^{26'}$ 는 그들이 결합된 질소 원자와 함께 헥테로방향족 고리 또는 고리계를 형성한다.

## 발명의 설명

### 기술 분야

[0001]

본 발명은 특히 인광 방출체를 위한 호스트, 전자 수송 물질 또는 방출체 물질로서의 아자페렌을 포함하는 전자 장치, 특히 전계발광 장치에 관한 것이다. 상기 호스트는 인광 물질과 함께 기능하여 전계발광 장치의 개선된 효율성, 안정성, 제조성 또는 분광 특성을 제공할 수 있다.

### 배경 기술

[0002]

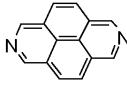
아자페렌 및 그의 합성이, 예를 들어, 하기 공개물에 기재되어 있다: A. V. Aksenov et al., Tetrahedron Letters (2008) 1808-1811; A. V. Aksenov et al., Tetrahedron Letters (2008) 707-709; I. V. Aksenova, et al., Chemistry of Heterocyclic Compounds (2007) 665-666; Till Riehm et al., Chemistry - A European Journal (2007) 7317-7329; I. V. Borovlev et al., Chemistry of Heterocyclic Compounds (2002) 968-973 및 (2003) 1417-1442.

[0003]

US2004076853은 기판, 상기 기판 상에 배치된 애노드 및 캐소드, 및 애노드와 캐소드 사이에 배치된 발광층을 포함하는 유기 발광 장치에 관한 것이며, 여기서 발광층은 호스트 및 하나 이상의 도편트를 포함한다. 발광층의 호스트는 둘 이상의 성분 (그 중 하나는 단량체 상태 및 응집체 상태의 둘 다를 형성할 수 있음)의 혼합물을 포함하는 고체 유기 물질을 포함하도록 선택된다.

[0004]

발광층의 제1 호스트 성분을 위한 재료로서의 바람직한 헥테로시클릭 화합물의 목록은 특히 벤조[1mn][3,8]페난

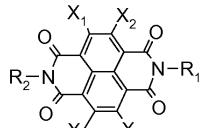
트롤린 (2,7-디아자페렌): 

을 포함한다.

[0005]

JP2255789는 양성 포어 주입 및 수송층, 방출층 및, 임의로는, 애노드 및 캐소드 상의 양성 포어 억제층을 연속

적으로 갖는 유기 전계발광 소자를 개시하며, 여기서, 전극 중 하나 이상은 투명하고, 400-800nm의 최대 형광



파장을 갖는 나프탈렌 유도체

[예를 들어 4,5-디메톡시나프탈렌-1,8-디카르복실산

(2'프로필)펜틸이미드, 1,5-디시아노나프탈렌-4,8-디카르복실산 이소부틸 에스테르]가 방출층으로서 사용된다.

[0006]

이러한 개발에도 불구하고, 신규한 전자 수송 물질, 방출 물질 및/또는 호스트 물질, 및 특히 인광 물질과 함께 기능하여 전계발광 장치의 개선된 효율성, 안정성, 제조성 및/또는 분광 특성을 제공할 호스트를 포함하는 EL 장치에 대한 요구가 여전히 존재한다.

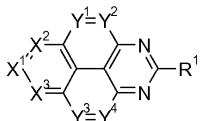
### 발명의 내용

[0007]

따라서, 본 발명은 하기 화학식 I 또는 화학식 III의 화합물을 포함하는 전자 장치를 제공한다:

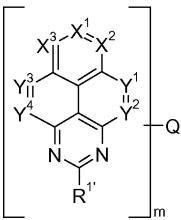
[0008]

<화학식 I>



[0009]

<화학식 III>



[0011]

상기 식에서,

[0013]

$Y^1, Y^2, Y^3, Y^4, X^1, X^2$  및  $X^3$ 은 서로 독립적으로 N 또는  $CR^4$ 이고,

[0014]

단,  $X^1, X^2$  및  $X^3$  기 중 하나 이상은  $CR^4$  기이고,

[0015]

$R^1$ 은 수소, F,  $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$  또는 유기 치환기이고,

[0016]

$R^{1'}$  및  $R^4$ 는 서로 독립적으로 수소, F,  $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$  또는 유기 치환기이거나, 또는

[0017]

서로 인접한 치환기  $R^1, R^{1'}$  및  $R^4$  중 임의의 것이 함께 방향족 또는 해태로방향족 고리 또는 고리계 (이는 임의로 치환될 수 있음)를 형성하고,

[0018]

$m$ 은 1 내지 6의 정수이고,

[0019]

$R^{100}, R^{101}$  및  $R^{102}$ 는 서로 독립적으로  $C_1-C_8$ 알킬기,  $C_6-C_{24}$ 아릴기 또는  $C_7-C_{12}$ 아르알킬기 (이는 임의로 치환될 수 있음)이고, Q는 연결기이고, 단, 화학식 III의 화합물에서 치환기  $R^{1'}$  또는  $R^4$  중 하나 이상은 Q 기이다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0020]

화학식 I의 화합물은 특히  $X^1$ 이 N 또는  $CR^4$ 이고,

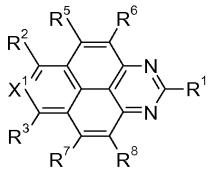
[0021]

$R^1$ 이 수소, F,  $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$  또는 유기 치환기이고,

[0022]

$R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7$  및  $R^8$ 이 서로 독립적으로 수소, F,  $-SiR^{100}R^{101}R^{102}$  또는 유기 치환기이거나, 또는

[0023] 서로 인접한 치환기  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$  및  $R^8$  중 임의의 것이 함께 방향족 또는 헤테로방향족 고리 또는 고리계 (이는 임의로 치환될 수 있음)를 형성하고,  $R^{100}$ ,  $R^{101}$  및  $R^{102}$ 가 상기 정의된 바와 같은 것인 화학식 II



의 화합물이다.

[0024] 본 발명의 전자 장치는 바람직하게는 전계발광 (EL) 장치이다. 화학식 I 또는 화학식 III의 화합물은 유기 발광 다이오드 (OLED)에서 인광 화합물용 호스트로서, 방출 및/또는 전자 수송 물질로서 사용될 수 있다. 본 발명의 화합물은 유기 발광 장치에 적용되는 원리와 유사한 원리에 따라 유기 태양 전지, 유기 광전도체 및 유기 트랜지스터를 비롯한 유기 전자 장치에서 기능할 수 있다. 유기 발광 장치 이외에 수많은 다른 유형의 반도체 장치가 존재한다. 모두에 대하여 보편적인 것은 하나 이상의 반도체 물질이 존재한다는 것이다. 반도체 장치는, 예를 들어, 문헌 [S. M. Sze in Physics of Semiconductor Devices, 2<sup>nd</sup> edition, John Wiley and Sons, New York (1981)]에 기재되어 있다. 이와 같은 장치는 정류기, 트랜지스터 (p-n-p, n-p-n 및 박막 트랜지스터를 비롯하여 많은 유형의 트랜지스터가 있음), 광전도체, 전류 제한기, 서미스터, p-n 접합, 전계 효과 다이오드, 쇼트키 다이오드 등을 포함한다. 각각의 반도체 장치에서, 반도체 물질은 하나 이상의 금속 또는 절연체와 조합되어 장치를 형성한다. 반도체 장치는, 예를 들어 문헌 [Peter Van Zant in Microchip Fabrication, Fourth Edition, McGraw-Hill, New York (2000)]에 기재된 공지된 방법에 의해 제조 또는 생산될 수 있다. 특히 유용한 유형의 트랜지스터 장치인 박막 트랜지스터 (TFT) (여기서 본 발명의 물질이 사용될 수 있음)는 일반적으로 게이트 전극, 게이트 전극 상의 게이트 유전체, 게이트 유전체에 인접한 소스 전극 및 드레인 전극, 및 게이트 유전체에 인접하며 소스 및 드레인 전극에 인접한 반도체층을 포함한다 (예를 들어, 문헌 [S. M. Sze, Physics of Semiconductor Devices, 2.sup.nd edition, John Wiley and Sons, page 492, New York (1981)] 참조). 이러한 구성 요소는 다양한 구성으로 조립될 수 있다. 예를 들어 유기 박막 트랜지스터 (OTFT)는 유기 반도체층을 갖는다. 이러한 장치의 예가 WO2007/118799 및 WO2009/047104에 기재되어 있다.

[0025] 이종접합 태양 전지 (별크 이종접합 태양 전지)에 있어서, 활성 (광활성)층은 p-형 및 n-형 유기 반도체 혼합물을 포함한다. 활성층에서 광에 의해 유도되는 하전 분리가 발생한다. 화학식 I 또는 화학식 III의 화합물은 상기 장치에서 바람직하게는 n-형 반도체로서 사용된다. 이종접합 태양 전지는 하기의 순서로 추가의 층을 포함한다: a) 캐소드 (전극), b) 임의로 전이층, 예컨대 알칼리 할로게니드, 특히 불화리튬, c) 화학식 I 또는 화학식 III의 화합물을 함유하는 활성 (광활성)층, d) 임의로 평활층, e) 애노드 (전극), f) 기판. 상기 장치의 예가 WO2008/000664 및 WO2009/047104에 기재되어 있다.

[0026]  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$  및  $R^8$ 은 바람직하게는 수소 또는 유기 치환기이다.

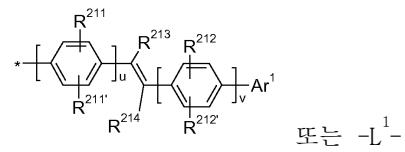
[0027] 연결기 Q는, 예를 들어 아릴렌 또는 헤테로아릴렌기이다.

[0028] 더 바람직하게는

[0029]  $X^1$ 이 N 또는 CR<sup>4</sup>이고,

[0030]  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$  및  $R^8$ 이 서로 독립적으로 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 (이는 E에 의해 치환되고/거나 D가 개재됨), C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>페플루오로알킬, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴 (이는 G에 의해 치환됨), C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헤테로아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헤테로아릴 (이는 G에 의해 치환됨), C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>알카닐, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시 (이는 E에 의해 치환되고/거나 D가 개재됨), C<sub>7</sub>-C<sub>25</sub>아르알킬, -CO-R<sup>28</sup>, -CN 또는 -L<sup>1</sup>-NR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>기, 또는 NR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>기이고, 여기서

고/거나 D가 개재됨), C<sub>7</sub>-C<sub>25</sub>아르알킬, -CO-R<sup>28</sup>, -CN 또는 -L<sup>1</sup>-NR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>기, 또는 -L<sup>1</sup>-



[0031] u는 0 또는 1이고, v는 0 또는 1이고,

[0032]  $R^{211}$ ,  $R^{211'}$ ,  $R^{212}$  및  $R^{212'}$ 는 서로 독립적으로 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시이고,

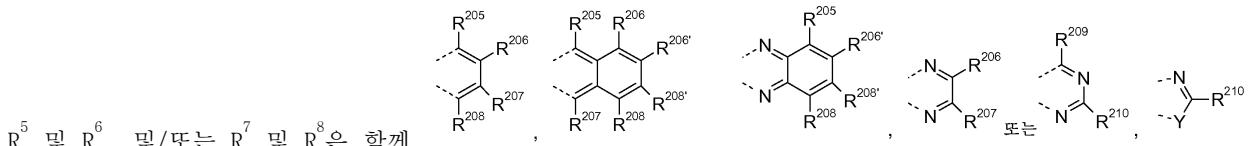
[0033]  $R^{213}$  및  $R^{214}$ 는 서로 독립적으로 H 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬이고,

[0034] Ar<sup>1</sup>은 -NR<sup>25'</sup>R<sup>26'</sup>, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴 (이는 G에 의해 치환됨), C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헥테로아릴, 또는 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헥테로아릴 (이는 G에 의해 치환됨)이고,

[0035] 여기서 R<sup>25'</sup> 및 R<sup>26'</sup>는 서로 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 (이는 E에 의해 치환되고/거나 D가 개재됨), C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴 (이는 G에 의해 치환됨), C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헥테로아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헥테로아릴 (이는 G에 의해 치환됨)이거나, 또는

[0036] R<sup>25'</sup> 및 R<sup>26'</sup>가 그들이 결합된 질소 원자와 함께 헥테로방향족 고리 또는 고리계 (이는 임의로 치환될 수 있음)를 형성하고,

[0037] L<sup>1</sup>은 단일 결합 또는 가교 단위 BU이고,



[0038] R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup> 및/또는 R<sup>7</sup> 및 R<sup>8</sup>은 함께 기를 형성하고, 여기서 R<sup>206'</sup>, R<sup>208'</sup>, R<sup>205</sup>, R<sup>206</sup>, R<sup>207</sup>, R<sup>208</sup>, R<sup>209</sup> 및 R<sup>210</sup>은 서로 독립적으로 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 (이는 E에 의해 치환되고/거나 D가 개재됨), C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시 (이는 E에 의해 치환되고/거나 D가 개재됨), C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>페플루오로알킬, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴 (이는 G에 의해 치환됨), C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헥테로아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헥테로아릴 (이는 G에 의해 치환됨), C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>알케닐, C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>알카닐, C<sub>7</sub>-C<sub>25</sub>아르알킬, CN 또는 -CO-R<sup>28</sup>이고,

[0039] Y는 O 또는 N-R<sup>25</sup>이고,

[0040] D는 -CO-, -COO-, -S-, -SO-, -SO<sub>2</sub>-, -O-, -NR<sup>25</sup>-, -SiR<sup>30</sup>R<sup>31</sup>-, -POR<sup>32</sup>-, -CR<sup>23</sup>=CR<sup>24</sup>- 또는 -C≡C-O-이고,

[0041] E는 -OR<sup>29</sup>, -SR<sup>29</sup>, -NR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>, -COR<sup>28</sup>, -COOR<sup>27</sup>, -CONR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>, -CN 또는 할로겐이고,

[0042] G는 E, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 (D가 개재됨), C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>페플루오로알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시 (이는 E에 의해 치환되고/거나 D가 개재됨)이고, 여기서

[0043] R<sup>23</sup>, R<sup>24</sup>, R<sup>25</sup> 및 R<sup>26</sup>은 서로 독립적으로 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴 (이는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시에 의해 치환됨), C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 (-O-가 개재됨)이고, 또는

[0044] R<sup>25</sup> 및 R<sup>26</sup>은 함께 5 또는 6원 고리 또는 고리계를 형성하고,

[0045] R<sup>27</sup>은 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴 (이는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시에 의해 치환됨), C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 (-O-가 개재됨)이고,

[0046] R<sup>28</sup>은 H, C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴 (이는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시에 의해 치환됨), C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 (-O-가 개재됨)이고,

[0047] R<sup>29</sup>은 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴 (이는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시에 의해 치환됨), C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 (-O-가 개재됨)이고,

[0048]  $R^{30}$  및  $R^{31}$ 은 서로 독립적으로  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_6-C_{18}$ 아릴, 또는  $C_6-C_{18}$ 아릴 (이는  $C_1-C_{18}$ 알킬에 의해 치환됨)이고,

[0049]  $R^{32}$ 는  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_6-C_{18}$ 아릴, 또는  $C_6-C_{18}$ 아릴 (이는  $C_1-C_{18}$ 알킬에 의해 치환됨)인 화학식 II의 화합물이다.

[0050]  $L^1$ 은 단일 결합,  $-(CR^{47}=CR^{48})_{m2}-$ ,  $-(Ar^3)_{m3}-$ ,  $-[Ar^3(Y^1)_{m5}]_{m4}-$ ,  $-[(Y^1)_{m5}Ar^3]_{m4}-$  또는  $-[Ar^3(Y^2)_{m5}Ar^4]_{m4}-\diamond$ 고, 여기서

[0051]  $Y^1$ 은  $-(CR^{47}=CR^{48})-\diamond$ 고,

[0052]  $Y^2$ 는  $NR^{49}$ ,  $O$ ,  $S$ ,  $C=O$ ,  $C(=O)O$ 이고, 여기서  $R^{49}$ 는  $C_6-C_{18}$ 아릴 (이는  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 임의로 치환될 수 있음),  $C_1-C_{18}$ 알킬, 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬 (-0-가 개재됨)이고,

[0053]  $R^{47}$  및  $R^{48}$ 은 서로 독립적으로 수소,  $C_1-C_{20}$ 알킬 또는  $C_6-C_{24}$ 아릴 (이는 G에 의해 임의로 치환될 수 있음)이고,

[0054]  $m5$ 는 1 내지 10의 정수이고,  $m2$ 는 1 내지 10의 정수이고,  $m3$ 은 1 내지 5의 정수이고,  $m4$ 는 1 내지 5의 정수이고,

[0055]  $Ar^3$  및  $Ar^4$ 는 서로 독립적으로 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 (이는 임의로 치환될 수 있음)이고, 여기서 G는 상기 정의된 바와 같다.

[0056] 바람직하게는,  $L^1$ 이 단일 결합, 또는 화학식  $\begin{array}{c} (R^{41})_{m1} \\ | \\ \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} \end{array}$ ,  $\begin{array}{c} (R^{41})_{m1} \\ | \\ \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} \end{array}$  또는  $\begin{array}{c} (R^{41})_{m1} \\ | \\ \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} \\ | \\ R^{119} \quad R^{120} \end{array}$ 의 가교 단위 BU이다.

[0057] 더욱 더 바람직하게는

[0058]  $-L^1-X^1-\diamond$ 의 화학식  $\begin{array}{c} (R^{41})_{m1} \\ | \\ \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} \text{N}(\text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} \text{N}(\text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---}))_{m1} \end{array}$ 의 기,  $-NR^{25'}R^{26'}$ , 또는  $\begin{array}{c} -\text{BU---} \text{N}^{25'} \\ | \\ R^{26'} \end{array}$  기이고, 여기서  $R^{25'}$  및  $R^{26'}$ 는 서로 독

립적으로  $\begin{array}{c} R^{116} \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} R^{117} \end{array}$ ,  $\begin{array}{c} R^{116} \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} R^{117} \end{array}$  또는  $\begin{array}{c} R^{116} \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} R^{117} \end{array}$  이거나, 또는  $R^{25'}$  및  $R^{26'}$ 가 그들이 결합된 질소 원자와 함께 화학식  $\begin{array}{c} (R^{41})_m \\ | \\ \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} \text{N}(\text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---}))_m \end{array}$ 의 기를 형성하고,

[0059]  $R^{116}$  및  $R^{117}$ 은 서로 독립적으로  $C_1-C_{25}$ 알킬 (-0-가 임의로 개재될 수 있음) 또는  $C_1-C_{25}$ 알콕시이고,

[0060] BU는  $\begin{array}{c} (R^{41})_{m1} \\ | \\ \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} \end{array}$  또는  $\begin{array}{c} (R^{41})_{m1} \\ | \\ \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} \text{C}_6\text{H}_4 \text{---} \end{array}$ 이고, 여기서  $R^{41}$ 은 각각의 경우에 동일하거나 상이할 수 있고,  $C_1-C_{25}$ 알킬 (-0-가 임의로 개재될 수 있음) 또는  $C_1-C_{25}$ 알콕시이고,  $m1$ 은 0, 1 또는 2인

[0061] 화학식 I 또는 화학식 III의 화합물이다.

[0062] 바람직하게는,  $R^{116}$  및  $R^{117}$ 은 서로 독립적으로 H,  $C_1-C_{12}$ 알킬, 예컨대 메틸, 에틸, n-프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소부틸, sec-부틸, t-부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, 이소펜틸, n-헥실, 2-에틸헥실 또는 n-헵틸,  $C_1-C_{12}$ 알킬 (이는 E에 의해 치환되고/거나 D가 개재됨), 예컨대  $-\text{CH}_2\text{OCH}_3$ ,  $-\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$ ,  $-\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$  또는  $-\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$ ,  $C_6-C_{14}$ 아릴, 예컨대 폐닐, 나프틸 또는 비페닐릴,  $C_5-C_{12}$ 시클로알킬, 예컨대 시클로헥실,  $C_6-$

$C_{14}$ -아릴 (이는 G에 의해 치환됨), 예컨대  $-C_6H_4OCH_3$ ,  $-C_6H_4OCH_2CH_3$ ,  $-C_6H_3(OCH_3)_2$  또는  $-C_6H_3(OCH_2CH_3)_2$ ,  $-C_6H_4CH_3$ ,  $-C_6H_3(CH_3)_2$ ,  $-C_6H_2(CH_3)_3$  또는  $-C_6H_4tBu$ 이다.

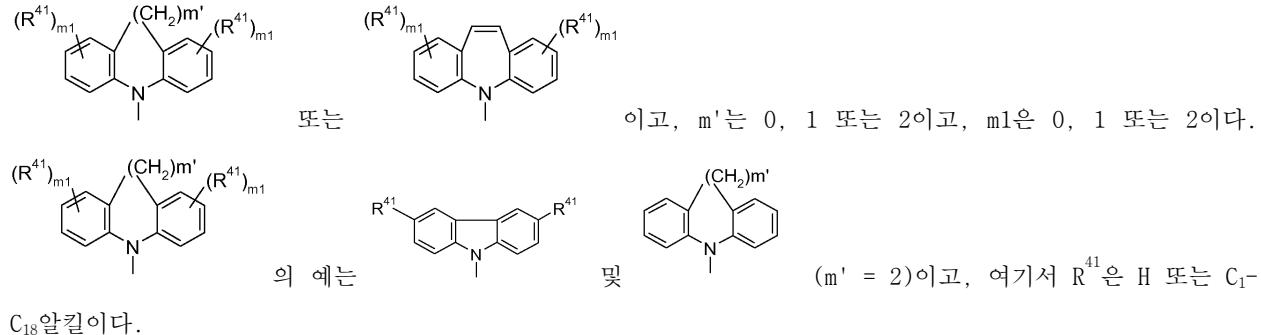
[0063] 바람직하게는,  $R^{119}$  및  $R^{120}$ 은 서로 독립적으로  $C_1-C_{12}$ 알킬, 예컨대 메틸, 에틸, n-프로필, 이소-프로필, n-부틸, sec-부틸, 헥실, 옥틸 또는 2-에틸-헥실,  $C_1-C_{12}$ 알킬 (이는 E에 의해 치환되고/거나 D가 개재됨), 예컨대  $-CH_2(OCH_2CH_2)_wOCH_3$  ( $w = 1, 2, 3$  또는 4),  $C_6-C_{14}$ -아릴, 예컨대 페닐, 나프틸 또는 비페닐릴,  $C_6-C_{14}$ -아릴 (이는 G에 의해 치환됨), 예컨대  $-C_6H_4OCH_3$ ,  $-C_6H_4OCH_2CH_3$ ,  $-C_6H_3(OCH_3)_2$ ,  $-C_6H_3(OCH_2CH_3)_2$ ,  $-C_6H_4CH_3$ ,  $-C_6H_3(CH_3)_2$ ,  $-C_6H_2(CH_3)_3$  또는  $-C_6H_4tBu$ 이거나, 또는  $R^{119}$  및  $R^{120}$ 이 함께 4 내지 8원 고리, 특히 5 또는 6원 고리, 예컨대 시클로헥실 또는 시클로펜틸 (이는  $C_1-C_8$ 알킬에 의해 임의로 치환될 수 있음)을 형성한다.

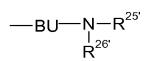
[0064] D는 바람직하게는  $-CO-$ ,  $-COO-$ ,  $-S-$ ,  $-SO-$ ,  $-SO_2-$ ,  $-O-$ ,  $-NR^{25}-$ 이고, 여기서  $R^{25}$ 은  $C_1-C_{12}$ 알킬, 예컨대 메틸, 에틸, n-프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소부틸, 또는 sec-부틸, 또는  $C_6-C_{14}$ -아릴, 예컨대 페닐, 나프틸 또는 비페닐릴이다.

[0065] E는 바람직하게는  $-OR^{29}$ ,  $-SR^{29}$ ,  $-NR^{25}R^{25}$ ,  $-COR^{28}$ ,  $-COOR^{27}$ ,  $-CONR^{25}R^{25}$ , 또는  $-CN$ 이고, 여기서  $R^{25}$ ,  $R^{27}$ ,  $R^{28}$  및  $R^{29}$ 은 서로 독립적으로  $C_1-C_{12}$ 알킬, 예컨대 메틸, 에틸, n-프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소부틸, sec-부틸, 헥실, 옥틸 또는 2-에틸-헥실, 또는  $C_6-C_{14}$ -아릴, 예컨대 페닐, 나프틸 또는 비페닐릴 (이는 임의로 치환될 수 있음)이다.

[0066] G는 E와 바람직한 바가 동일하거나, 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬, 특히  $C_1-C_{12}$ 알킬, 예컨대 메틸, 에틸, n-프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소부틸, sec-부틸, 헥실, 옥틸 또는 2-에틸-헥실이다.

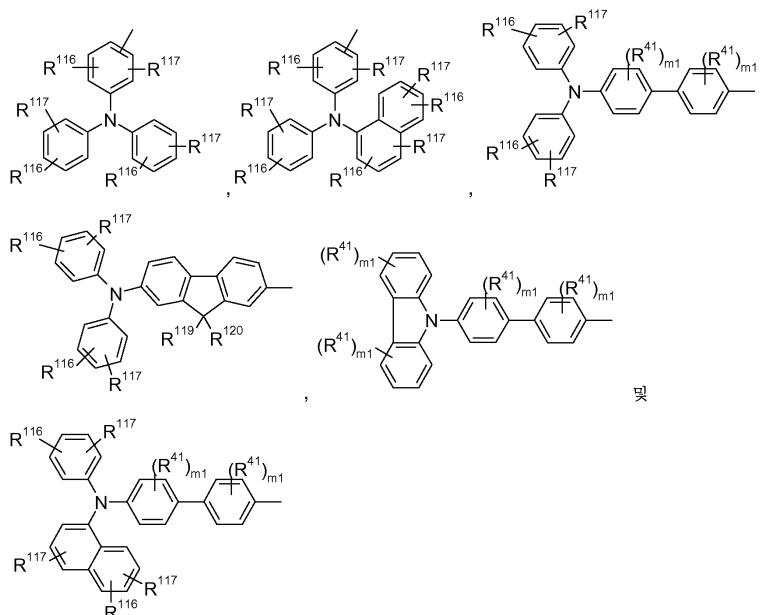
[0067]  $R^{25'}$  및  $R^{26'}$ 가 그들이 결합된 질소 원자와 함께 형성한 해테로방향족 고리 또는 고리계의 예는





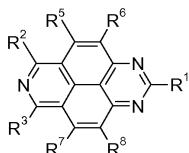
[0068]

기의 예가 하기에 제시된다:



및

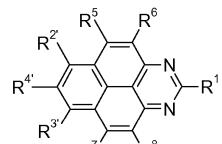
[0069]

[0070] 상기 식에서,  $\text{R}^{41}$ ,  $\text{R}^{116}$ ,  $\text{R}^{117}$ ,  $\text{R}^{119}$ ,  $\text{R}^{120}$  및  $m1$ 은 상기 정의된 바와 같다.

[0071]

더욱 더 바람직하게는 화학식 IIa

또는 화학식 IIb



의 화합물이고, 여기

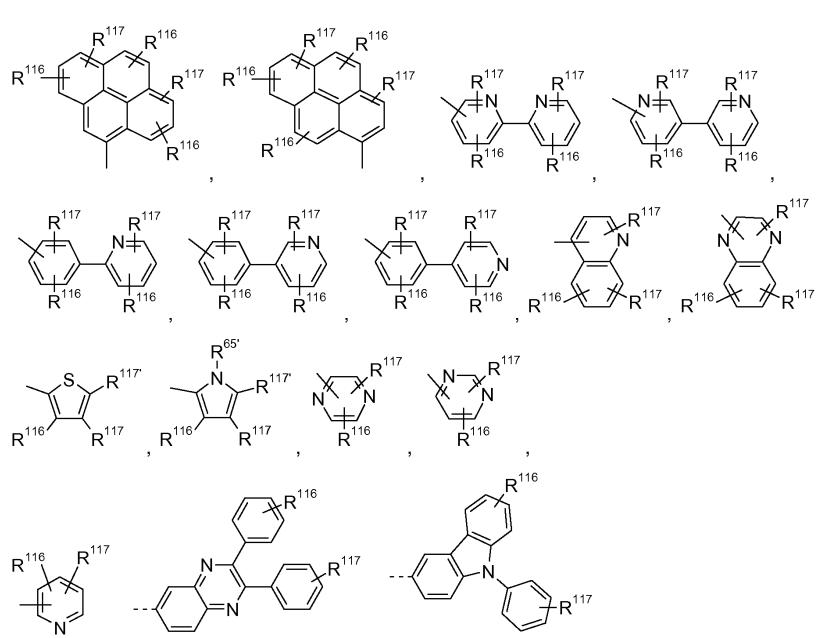
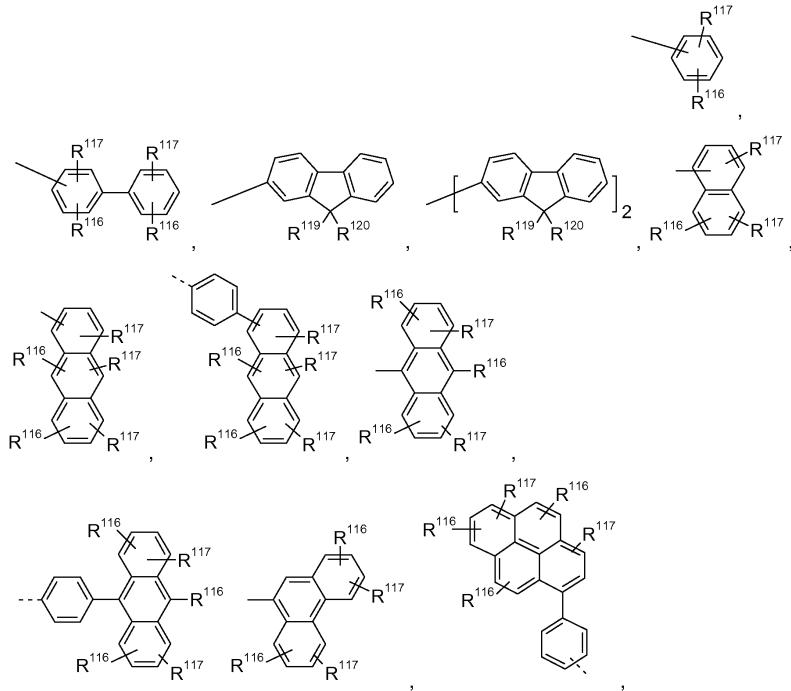
서

[0072]

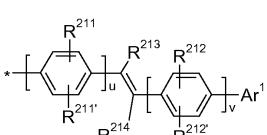
 $\text{R}^5$ ,  $\text{R}^6$ ,  $\text{R}^7$  및  $\text{R}^8$ 은 수소이고,

[0073]

 $\text{R}^1$ ,  $\text{R}^2$ ,  $\text{R}^3$ ,  $\text{R}^{2'}$ ,  $\text{R}^{3'}$  및  $\text{R}^{4'}$ 는 서로 독립적으로 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 (이는 E에 의해 치환되고/거나 D가 개재됨), C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴 (이는 G에 의해 치환됨), C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴 (이는 G에 의해 치환됨), 예컨대



E에 의해 치환되고/거나 D가 개재됨), 또는 -L<sup>1</sup>-NR<sup>25'</sup>R<sup>26'</sup>이고, 여기서



[0076]

u는 0 또는 1이고, v는 0 또는 1이고,

[0077]

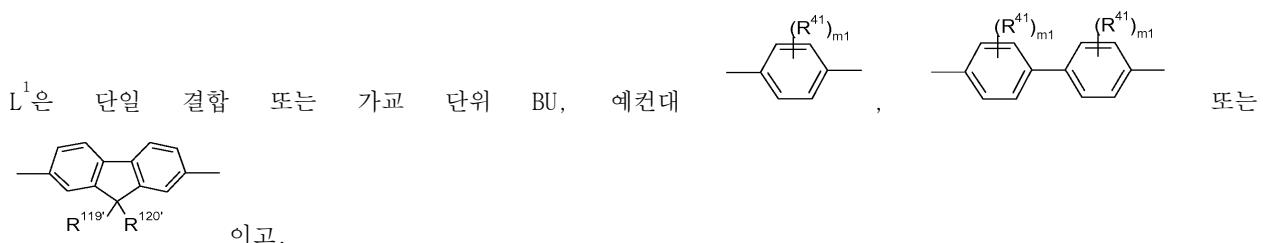
R<sup>211</sup>, R<sup>211'</sup>, R<sup>212</sup> 및 R<sup>212'</sup>는 서로 독립적으로 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시이고,

[0078]

R<sup>213</sup> 및 R<sup>214</sup>는 서로 독립적으로 H 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬이고,

[0079]

Ar<sup>1</sup>은 -NR<sup>25'</sup>R<sup>26'</sup>, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴 (이는 G에 의해 치환됨), C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴, 또는 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴 (이는 G에 의해 치환됨)이고,

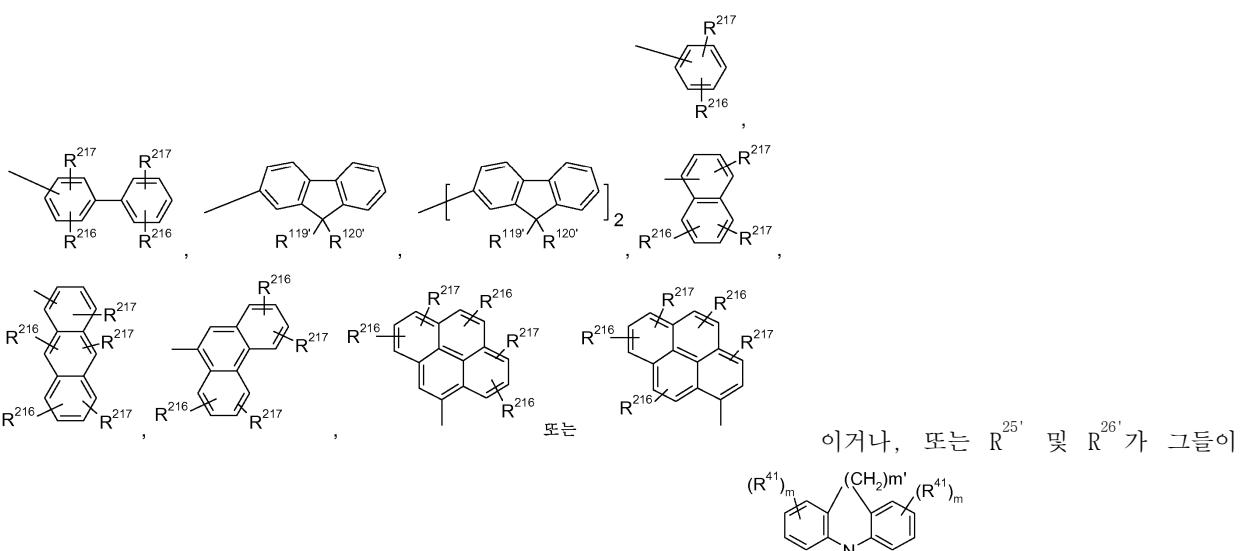


[0081] D는  $-O-$  또는  $-NR^{25}-$ 이고,

[0082] E는  $-OR^{29}$ ,  $-NR^{25}R^{26}$ ,  $-CN$  또는 F이고,  $R^{29}$ ,  $R^{25}$  및  $R^{26}$ 은 상기 정의된 바와 같고,

[0083] G는 E,  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 알킬(D가 개재됨),  $C_1-C_{18}$ 페플루오로알킬,  $C_1-C_{18}$ 알콕시, 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시(이는 E에 의해 치환되고/거나 D가 개재됨)이고,

[0084]  $R^{25}'$  및  $R^{26}'$ 은 서로 독립적으로 페닐, 나프틸, 안트릴, 비페닐릴, 2-플루오레닐, 페난트릴 또는 페릴레닐(이는 임의로 치환될 수 있음), 예컨대



결합된 질소 원자와 함께 헤테로방향족 고리 또는 고리계, 예컨대 또는 2이고,

[0086]  $m$ 은 각각의 경우에 동일하거나 상이할 수 있고, 0, 1, 2 또는 3이고, 특히 0, 1 또는 2이고, 매우 특히 0 또는 1이고,

[0087]  $m1$ 은 각각의 경우에 동일하거나 상이할 수 있고, 0, 1, 2, 3 또는 4이고, 특히 0, 1 또는 2이고, 매우 특히 0 또는 1이고,

[0088]  $R^{41}$ 은 각각의 경우에 동일하거나 상이할 수 있고, Cl, F, CN,  $N(R^{45})_2$ ,  $C_1-C_{25}$ 알킬기,  $C_4-C_{18}$ 시클로알킬기,  $C_1-C_{25}$ 알콕시기(여기서 서로에 대해 이웃하지 않는 하나 이상의 탄소 원자가  $-NR^{45}-$ ,  $-O-$ ,  $-S-$  또는  $-C(=O)-O-$ 에 의해 대체될 수 있고/거나, 여기서 하나 이상의 수소 원자가 F에 의해 대체될 수 있음),  $C_6-C_{24}$ 아릴기 또는  $C_6-C_{24}$ 아릴옥시기(여기서 하나 이상의 탄소 원자가 0, S 또는 N에 의해 대체될 수 있고/거나, 이는 하나 이상의 비-방향족  $R^{41}$ 기에 의해 치환될 수 있음)이거나, 또는 둘 이상의  $R^{41}$ 기가 고리계를 형성하고,

[0089]  $R^{45}$ 는  $C_1-C_{25}$ 알킬기,  $C_4-C_{18}$ 시클로알킬기(여기서 서로 이웃하지 않는 하나 이상의 탄소 원자가  $-NR^{45}-$ ,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-C(=O)-O-$  또는  $-O-C(=O)-O-$ 에 의해 대체될 수 있고/거나, 여기서 하나 이상의 수소 원자가 F에 의해 대체될 수 있음),  $C_6-C_{24}$ 아릴기 또는  $C_6-C_{24}$ 아릴옥시기(여기서 하나 이상의 탄소 원자가 0, S 또는 N에 의해 대체될 수 있고/거나 이는 하나 이상의 비-방향족  $R^{41}$ 기에 의해 치환될 수 있음)이고,

[0090]  $R^{45''}$ 는  $C_1-C_{25}$ 알킬기 또는  $C_4-C_{18}$ 시클로알킬기이고,

[0091]  $R^{216}$ ,  $R^{217}$ ,  $R^{116}$ ,  $R^{117}$  및  $R^{117'}$ 는 서로 독립적으로 H, 할로겐, -CN,  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 알킬 (이는 E'에 의해 치환되고/거나 D'가 개재됨),  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_6-C_{24}$ 아릴 (이는 G'에 의해 치환됨),  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴,  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴 (이는 G'에 의해 치환됨),  $C_2-C_{18}$ 알케닐,  $C_2-C_{18}$ 알카닐,  $C_1-C_{18}$ 알콕시,  $C_1-C_{18}$ 알콕시 (이는 E'에 의해 치환되고/거나 D'가 개재됨),  $C_7-C_{25}$ 아르알킬,  $-C(=O)-R^{127}$ ,  $-C(=O)OR^{127}$  또는  $-C(=O)NR^{127}R^{126}$ 이거나, 또는

[0092] 서로 인접한 치환기  $R^{116}$ ,  $R^{117}$  및  $R^{117'}$ 가 고리를 형성할 수 있고,

[0093]  $R^{119'}$  및  $R^{120'}$ 는 서로 독립적으로  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 알킬 (이는 E'에 의해 치환되고/거나 D'가 개재됨),  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_6-C_{24}$ 아릴 (이는 G'에 의해 치환됨),  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴,  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴 (이는 G'에 의해 치환됨),  $C_2-C_{18}$ 알케닐,  $C_2-C_{18}$ 알카닐 또는  $C_7-C_{25}$ 아르알킬이거나, 또는

[0094]  $R^{119'}$  및  $R^{120'}$ 가 함께 화학식  $=CR^{121'}R^{122'}$ 의 기를 형성하고, 여기서

[0095]  $R^{121'}$  및  $R^{122'}$ 는 서로 독립적으로 H,  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 알킬 (이는 E'에 의해 치환되고/거나 D'가 개재됨),  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_6-C_{24}$ 아릴 (이는 G'에 의해 치환됨), 또는  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴, 또는  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴 (이는 G'에 의해 치환됨)이거나, 또는

[0096]  $R^{119'}$  및  $R^{120'}$ 가 함께 5 또는 6원 고리 (이는  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 알킬 (이는 E'에 의해 치환되고/거나 D'가 개재됨),  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_6-C_{24}$ 아릴 (이는 G'에 의해 치환됨),  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴,  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴 (이는 G'에 의해 치환됨),  $C_2-C_{18}$ 알케닐,  $C_2-C_{18}$ 알카닐,  $C_1-C_{18}$ 알콕시,  $C_1-C_{18}$ 알콕시 (이는 E'에 의해 치환되고/거나 D'가 개재됨),  $C_7-C_{25}$ 아르알킬 또는  $-C(=O)-R^{127}$ 에 의해 임의로 치환될 수 있음)를 형성하고,

[0097]  $R^{126}$  및  $R^{127}$ 은 서로 독립적으로  $C_6-C_{18}$ 아릴,  $C_6-C_{18}$ 아릴 (이는  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환됨),  $C_1-C_{18}$ 알킬, 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬 (-0-가 개재됨)이고,

[0098] D'는  $-CO-$ ,  $-COO-$ ,  $-S-$ ,  $-SO-$ ,  $-SO_2-$ ,  $-O-$ ,  $-NR^{65}-$ ,  $-SiR^{70}R^{71}-$ ,  $-POR^{72}-$ ,  $-CR^{63}=CR^{64}-$  또는  $-C\equiv C-\circ$ 고,

[0099] E'는  $-OR^{69}$ ,  $-SR^{69}$ ,  $-NR^{65}R^{66}$ ,  $-COR^{68}$ ,  $-COOR^{67}$ ,  $-CONR^{65}R^{66}$ ,  $-CN$  또는 할로겐이고,

[0100] G'는 E' 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬이고,

[0101]  $R^{63}$  및  $R^{64}$ 는 서로 독립적으로 H,  $C_6-C_{18}$ 아릴,  $C_6-C_{18}$ 아릴 (이는  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환됨),  $C_1-C_{18}$ 알킬, 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬 (-0-가 개재됨)이고,

[0102]  $R^{65}$ ,  $R^{65'}$  및  $R^{66}$ 은 서로 독립적으로  $C_6-C_{18}$ 아릴,  $C_6-C_{18}$ 아릴 (이는  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환됨),  $C_1-C_{18}$ 알킬, 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬 (-0-가 개재됨)이거나, 또는

[0103]  $R^{65}$  및  $R^{66}$ 이 함께 5 또는 6원 고리를 형성하고,

[0104]  $R^{67}$  및  $R^{68}$ 은 서로 독립적으로  $C_6-C_{18}$ 아릴,  $C_6-C_{18}$ 아릴 (이는  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환됨),  $C_1-C_{18}$ 알킬, 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬 (-0-가 개재됨)이고,

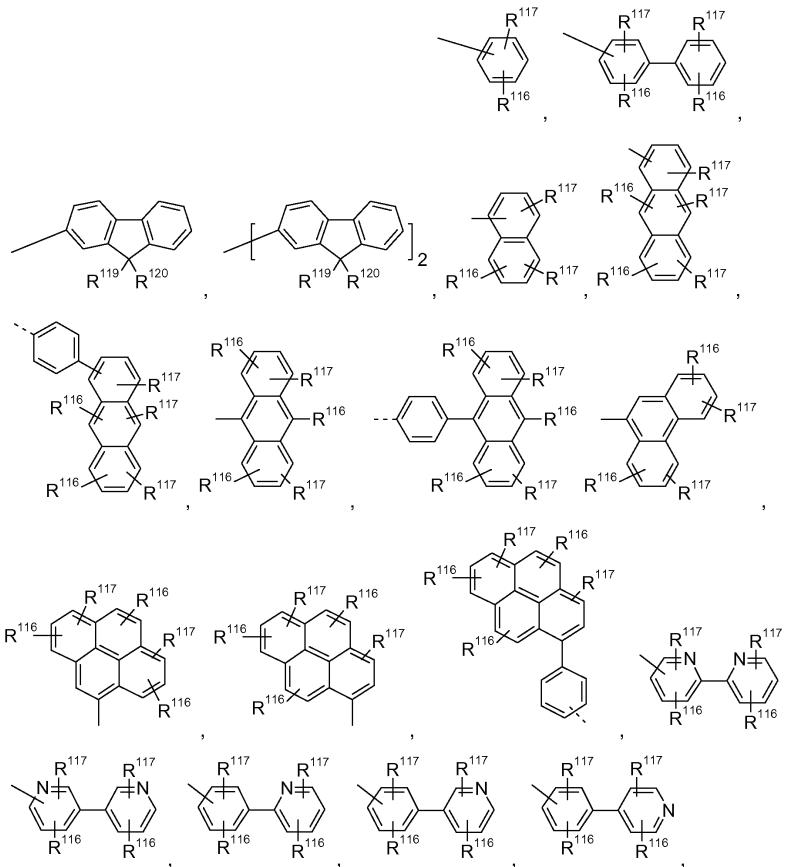
[0105]  $R^{69}$ 는  $C_6-C_{18}$ 아릴,  $C_6-C_{18}$ 아릴 (이는  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환됨),  $C_1-C_{18}$ 알킬, 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬 (-0-가 개재됨)이고,

[0106]  $R^{70}$  및  $R^{71}$ 은 서로 독립적으로  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_6-C_{18}$ 아릴, 또는  $C_6-C_{18}$ 아릴(이는  $C_1-C_{18}$ 알킬에 의해 치환됨)이고,

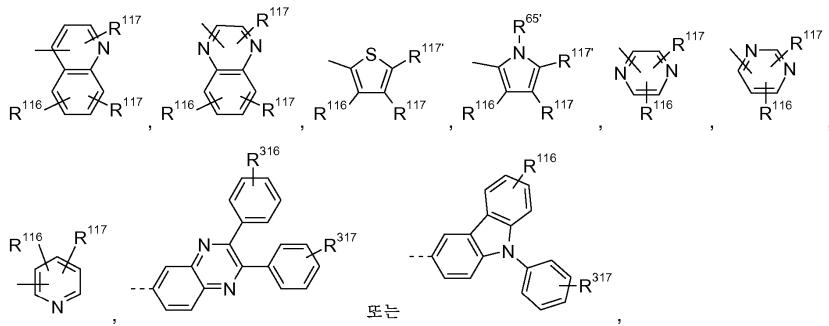
[0107]  $R^{72}$ 는  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_6-C_{18}$ 아릴, 또는  $C_6-C_{18}$ 아릴(이는  $C_1-C_{18}$ 알킬에 의해 치환됨)이다.

[0108]  $D'$ ,  $E'$  및  $G'$ 는 각각  $D$ ,  $E$  및  $G$ 와 바람직한 바가 같다.  $R^{119'}$  및  $R^{120'}$ 는 각각  $R^{119}$  및  $R^{120}$ 과 바람직한 바가 같다.

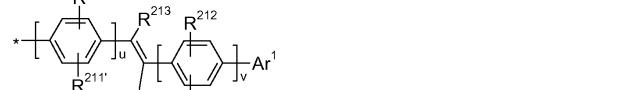
[0109] 화학식 IIa 및 화학식 IIb의 화합물에서  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^{2'}$  및  $R^{3'}$ 는 바람직하게는 서로 독립적으로  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_6-C_{24}$ 아릴(이는  $G$ 에 의해 치환됨),  $C_2-C_{20}$ 헥테로아릴,  $C_2-C_{20}$ 헥테로아릴(이는  $G$ 에 의해 치환됨), 예컨대



[0110]



또는



[0111]

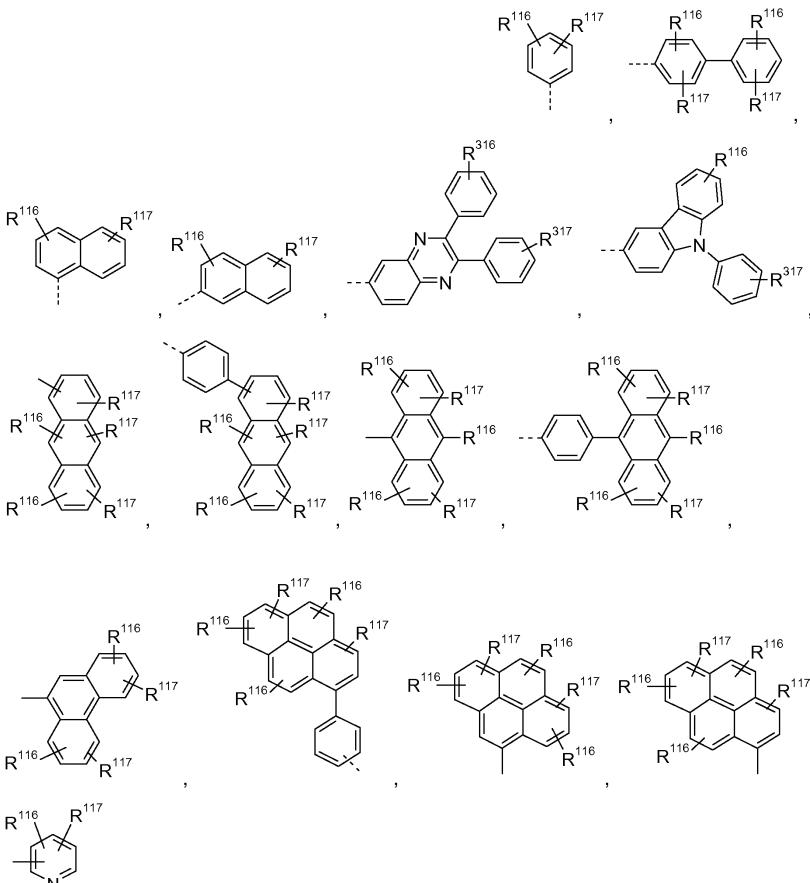
서  $R^{316}$  및  $R^{317}$ 은  $R^{116}$ 의 의미를 가지며, 바람직하게는  $C_1-C_{25}$ 알킬(-0-가 임의로 개재될 수 있음) 또는  $C_1-C_{25}$ 알콕시이다.

[0112]  $R^{4'}$ 는 수소,  $C_6-C_{24}$ 아릴, 또는  $C_6-C_{24}$ 아릴(이는 G에 의해 치환됨)이다.

[0113] 가장 바람직하게는

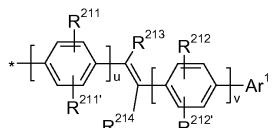
[0114]  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$  및  $R^8$ 이 수소이고,

[0115]  $R^1$ ,  $R^2$  및  $R^3$ 이 서로 독립적으로

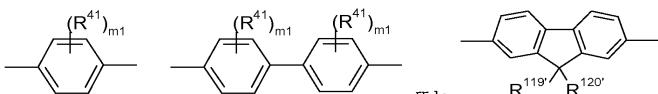


[0116] ],  $C_1-C_{18}$ 알콕시,  $C_1-C_{18}$ 알콕시(이)

[0117] 는 E에 의해 치환되고/거나 D가 개재됨),



또는  $-L^1-NR^{25'}R^{26'}$ 이고,



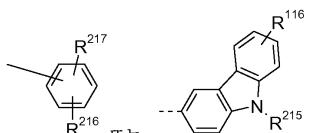
[0118]  $L^1$ 이 단일 결합, 또는  $o$ 고,

[0119]  $m1$ 이 0 또는 1이고,

[0120]  $u$ 가 0 또는 1이고,  $v$ 가 0 또는 1이고,

[0121]  $R^{211}$ ,  $R^{211'}$ ,  $R^{212}$  및  $R^{212'}$ 가 서로 독립적으로 H 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬이고,

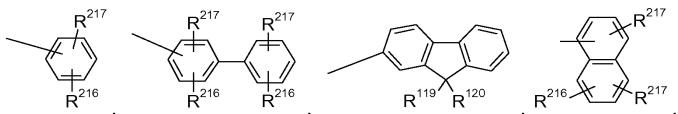
[0122]  $R^{213}$  및  $R^{214}$ 가 서로 독립적으로 H 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬이고,



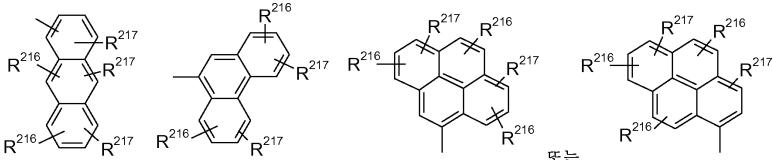
[0123] Ar<sup>1</sup>이 -NR<sup>25</sup>-R<sup>26</sup>, 또는

[0124] R<sup>215</sup>가 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알킬 또는 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴이고,

[0125] R<sup>25</sup> 및 R<sup>26</sup>가 서로 독립적으로

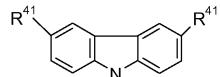


[0126]



[0127]

이거나, 또는



[0128] R<sup>25</sup> 및 R<sup>26</sup>가 그들이 결합된 질소 원자와 함께

기자를 형성하고, 여기서 R<sup>41</sup>은 H 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알

킬이고,

[0129] R<sup>116</sup> 및 R<sup>117</sup>이 서로 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알킬 (-O-가 임의로 개재될 수 있음) 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알콕시, 1-나프틸, 2-나프

틸, 페닐 또는 피리딘 (이는 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알킬 (-O-가 임의로 개재될 수 있음) 또는 페닐에 의해 임의로 치환될 수 있음)이고,

[0130] R<sup>316</sup> 및 R<sup>317</sup>이 R<sup>116</sup>의 의미를 가지며, 바람직하게는 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알킬 (-O-가 임의로 개재될 수 있음) 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알콕시인

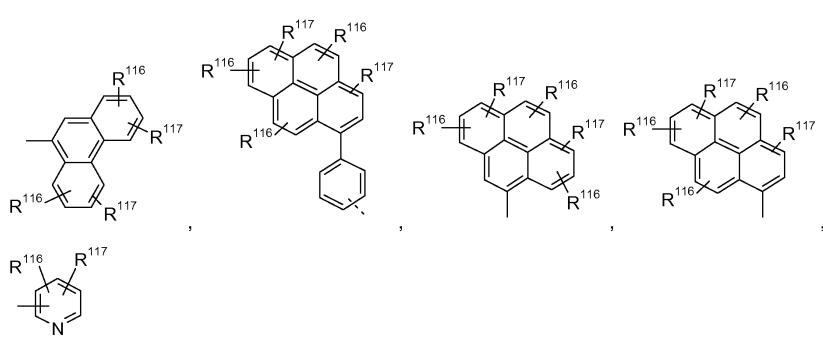
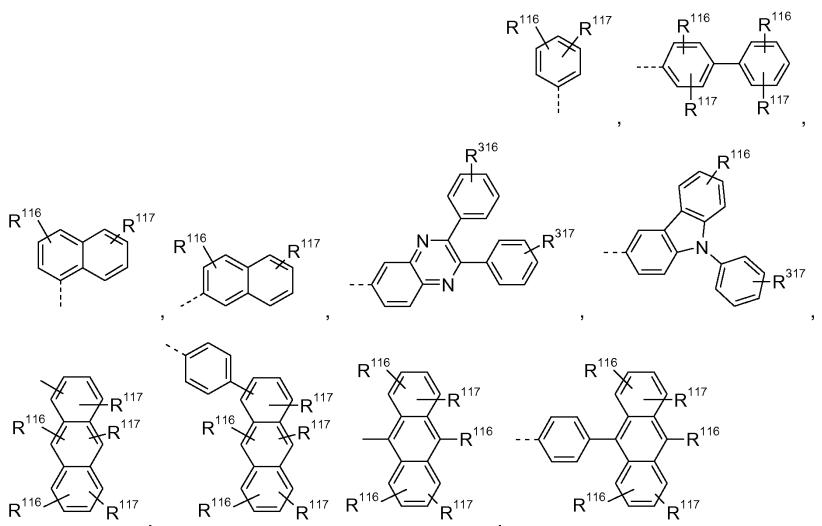
이고,

[0131] R<sup>216</sup> 및 R<sup>217</sup>이 서로 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알킬 (-O-가 임의로 개재될 수 있음) 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알콕시인

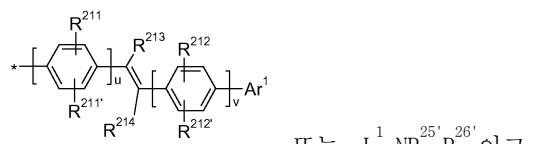
[0132] 화학식 IIa의 화합물, 및

[0133] R<sup>5</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup> 및 R<sup>8</sup>이 수소이고,

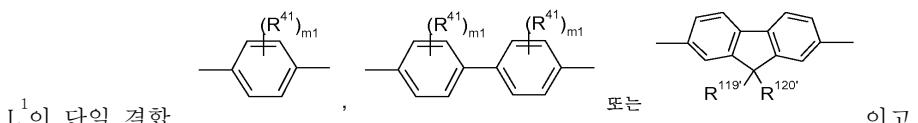
[0134] R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup> 및 R<sup>3</sup>가 서로 독립적으로



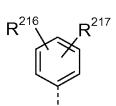
기], C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시], C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시 (이)는



E에 의해 치환되고/거나 D가 개재됨),



m1이 0 또는 1이고,

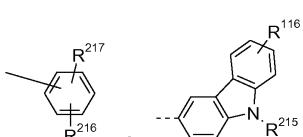


R<sup>4'</sup>가 수소 또는 기이고,

u가 0 또는 1이고, v가 0 또는 1이고,

R<sup>211</sup>, R<sup>211'</sup>, R<sup>212</sup> 및 R<sup>212'</sup>가 서로 독립적으로 H 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬이고,

R<sup>213</sup> 및 R<sup>214</sup>가 서로 독립적으로 H 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬이고,

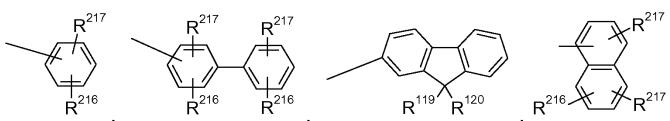


[0143] Ar<sup>1</sup>이 -NR<sup>25'</sup>R<sup>26'</sup>,

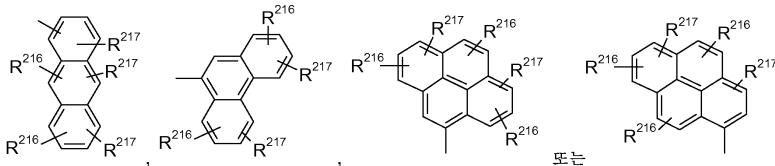
또는

이고, 여기서 R<sup>215</sup>는 상기 정의된 바와 같고,

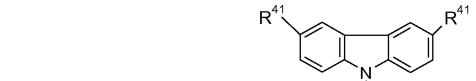
[0144]  $R^{25'}$  및  $R^{26'}$  가 서로 독립적으로



[0145]



[0146]



된 질소 원자와 함께

이거나, 또는  $R^{25'}$  및  $R^{26'}$  가 그들이 결합

하거나,

기를 형성하고, 여기서  $R^{41}$ 은 H 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬이고,

[0147]  $R^{116}$  및  $R^{117}$ 이 서로 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알킬 (-O-가 임의로 개재될 수 있음) 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알콕시, 1-나프틸, 2-나프틸, 폐닐 또는 피리딘 (이는 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알킬 (-O-가 임의로 개재될 수 있음) 또는 폐닐에 의해 임의로 치환될 수 있음)이고,

[0148]  $R^{316}$  및  $R^{317}$ 이  $R^{116}$ 의 의미를 가지며, 바람직하게는 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알킬 (-O-가 임의로 개재될 수 있음) 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알콕시이고,

[0149]  $R^{119'}$  및  $R^{120'}$ 가 서로 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알킬 (이는 E에 의해 치환되고/거나 D가 개재됨)이고,

[0150]  $R^{216}$  및  $R^{217}$ 이 서로 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알킬 (-O-가 임의로 개재될 수 있음) 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알콕시이고,

[0151] D가 -O- 또는 -NR<sup>25</sup>-O]고,

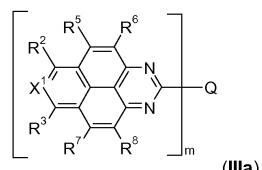
[0152] E가 -OR<sup>29</sup>, -NR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>, -CN 또는 F이고, R<sup>29</sup>, R<sup>25</sup> 및 R<sup>26</sup>이 상기 정의된 바와 같은 것인

[0153] 화학식 IIb의 화합물이다.

[0154] 특히 바람직한 화학식 IIa의 화합물의 예는 화합물 A-1-A-19이고, 이는 청구항 제6항에 제시된다.

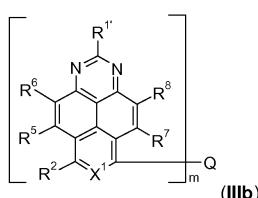
[0155] 특히 바람직한 화학식 IIb의 화합물의 예는 화합물 B-1-B-42이고, 이는 청구항 제6항에 제시된다.

[0156] 또 다른 바람직한 실시양태에서 본 발명은 화학식 III의 화합물, 특히 화학식 IIIa, 화학식 IIIb 또는 화학식 IIIc의 화합물을 포함하는 전자 장치에 관한 것이다:



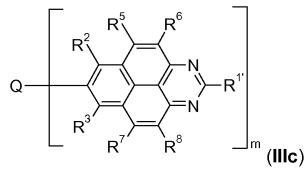
[0157]

(IIIa)

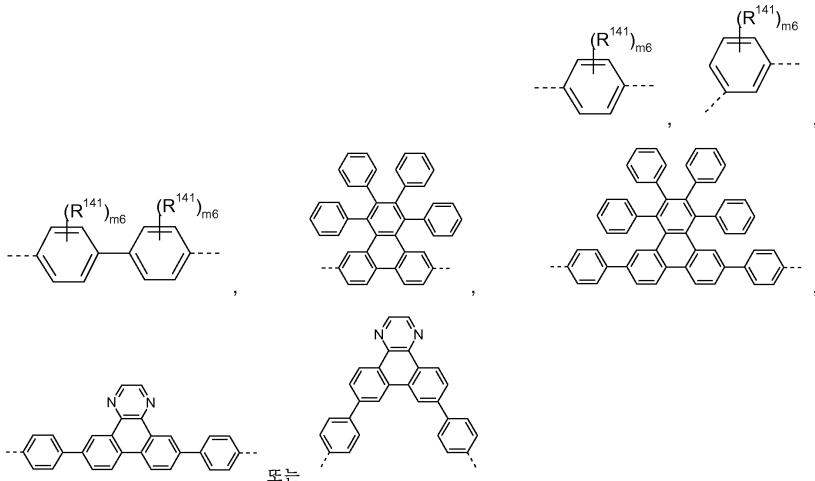


[0158]

(IIIb)



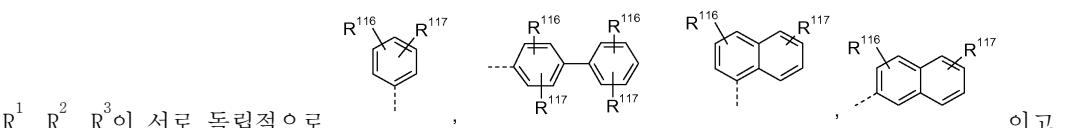
[0160] 상기 식에서,  $m$ ,  $\text{R}^1$ ,  $\text{R}^2$ ,  $\text{R}^3$ ,  $\text{X}^1$ ,  $\text{R}^5$ ,  $\text{R}^6$ ,  $\text{R}^7$  및  $\text{R}^8$ 은 상기 정의된 바와 같고, Q는 화학식



[0161] 의 기이고, 여기서  $\text{R}^{141}$ 은 각각의 경우에 동일하거나 상이할 수 있고,  $\text{C}_1\text{-}\text{C}_{25}$ 알킬 (-0-가 임의로 개재될 수 있음) 또는  $\text{C}_1\text{-}\text{C}_{25}$ 알콕시이고,  $m$ 은 0, 1 또는 2이다.

[0162] 더욱 더 바람직하게는  $\text{X}^1$ 이  $\text{CH}$  또는  $\text{N}$ 이고,

[0163]  $\text{R}^5$ ,  $\text{R}^6$ ,  $\text{R}^7$  및  $\text{R}^8$ 이 수소이고,



[0165]  $\text{R}^{116}$  및  $\text{R}^{117}$ 이 서로 독립적으로  $\text{C}_1\text{-}\text{C}_{25}$ 알킬 (-0-가 임의로 개재될 수 있음) 또는  $\text{C}_1\text{-}\text{C}_{25}$ 알콕시이고,

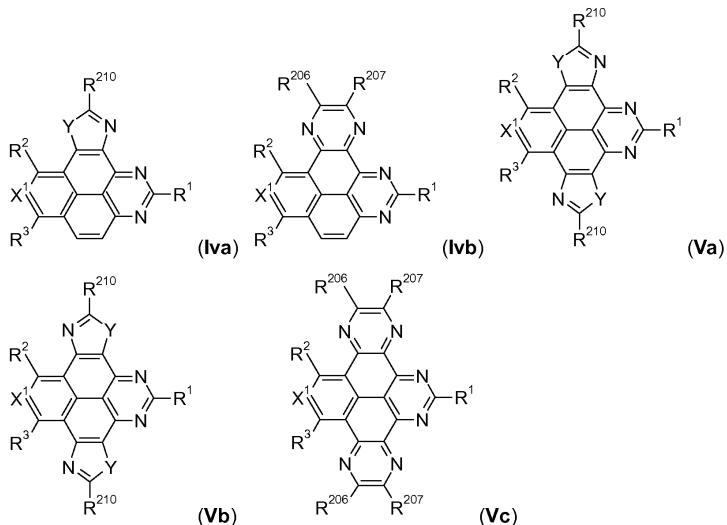
[0166] Q 및  $m$ 이 상기 정의된 바와 같은 것인

[0167] 화학식 IIIa, 화학식 IIIb 또는 화학식 IIIc의 화합물이다.

[0168] 특히 바람직한 화학식 IIIa의 화합물의 예는 화합물 C1-C7이고, 이는 청구항 제9항에 제시된다.

[0169] 특히 바람직한 화학식 IIIb의 화합물의 예는 화합물 D1-D6이고, 이는 청구항 제9항에 제시된다.

[0170] 또 다른 바람직한 실시양태에서 본 발명은 하기 화학식 Iva, 화학식 Ivb, 화학식 Va, 화학식 Vb 및 화학식 Vc의 화합물을 포함하는 전자 장치에 관한 것이다:



[0171]

[0172] 상기 식에서,

[0173]  $X^1$  은 N 또는

[0174]  $y = 0$  또는  $NR^{25}$  이고

[0175]  $R^{25} \Leftarrow C_1 - C_2 - g_1 \cdot R$      $C_1 \leftarrow$

0-가) 개재됨)이고,

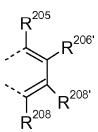
[01/6] R, R, R, R, R, R 은 장기 정의된 바와 같다.

[0177]  $R^1$ 의  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_6-C_{24}$ 아릴 (이는 G에 의해 치환됨) 또는 화학식  $\text{---BU---N---R}^2$ 의 기이고,

[0178]  $R^2$  및  $R^3$ 이 서로 독립적으로  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_6-C_{24}$ 아릴 (이는  $G$ 에 의해 치환됨)이고,

[0179]  $R^{25}$ 가  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_6-C_{24}$ 아릴 (이는 G에 의해 치환됨)이고,

[0180]  $R^{206}$  및  $R^{207}$ 이 서로 독립적으로 H,  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 알킬 (이는 E에 의해 치환되고/거나 D가 개재됨),  $C_1-C_{18}$ 페플루오로알킬,  $C_6-C_{24}$ 아릴,  $C_6-C_{24}$ 아릴 (이는 G에 의해 치환됨),  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴,  $C_2-C_{20}$ 헵테로아릴 (이는 G에 의해 치환됨)이거나, 또는



[0181]  $R^{206}$  및  $R^{207}$ 이 함께 화학식  $R^{208}$ 의 기를 혼성하고 여기서

[0182] R<sup>205</sup> 乃 R<sup>208</sup> 〇 H〇 乃

[0183]  $R^{206'}$  및  $R^{208'}$  가 서로 독립적으로 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 (이는 E에 의해 치환되고/거나 D가 개재됨), C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>페  
플루오로알킬, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴 (이는 G에 의해 치환됨), C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴 (이는 G에 의  
해 치환됨) 또는 CN이고,

[0184]  $\text{P}^{210}\text{Cl}$  C-C 아림 C-C 아림 ( 또는 C에 의해 치환됨) 또는 화합물  $-\text{BU}-\text{N}^{\text{25}'}\text{R}^{\text{25}'}-\text{R}^{\text{26}'}-\text{N}^{\text{26}'}\text{R}^{\text{26}'}$ 의 기수고

[0185]  $X^1$ 이 N 또는 CH이고,

[0186] Y가 O 또는  $NR^{25}$ 이고, 여기서

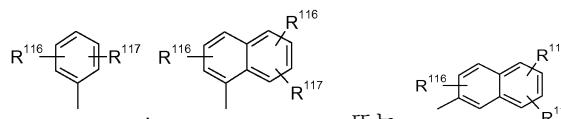
[0187] D가  $-O-$  또는  $-NR^{25}-$ 이고,

[0188] E가  $-OR^{29}$ ,  $-NR^{25}R^{26}$ ,  $-CN$ , 또는 F이고,

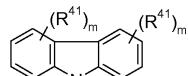
[0189] G가 E,  $C_1-C_{18}$ 알킬,  $C_1-C_{18}$ 알킬 (D가 개재됨),  $C_1-C_{18}$ 페플루오로알킬,  $C_1-C_{18}$ 알콕시, 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시 (이는 E에 의해 치환되고/거나 D가 개재됨)이고,

[0190]  $R^{25}$  및  $R^{26}$ 이  $C_6-C_{18}$ 아릴,  $C_6-C_{18}$ 아릴 (이는  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환됨),  $C_1-C_{18}$ 알킬, 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬 ( $-O-$ 가 개재됨)이고,

[0191]  $R^{29}$ 이  $C_6-C_{18}$ 아릴,  $C_6-C_{18}$ 아릴 (이는  $C_1-C_{18}$ 알킬 또는  $C_1-C_{18}$ 알콕시에 의해 치환됨),  $C_1-C_{18}$ 알킬, 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬 ( $-O-$ 가 개재됨)이고,



[0192]  $R^{25'}$  및  $R^{26'}$ 이 서로 독립적으로



그들이 결합된 질소 원자와 함께 화학식

의 기를 형성하고,

[0193]  $R^{116}$  및  $R^{117}$ 이 서로 독립적으로  $C_1-C_{25}$ 알킬 ( $-O-$ 가 임의로 개재될 수 있음) 또는  $C_1-C_{25}$ 알콕시이고,

[0194] BU가 또는 이고, 여기서  $R^{41}$ 은 각각의 경우에 동일하거나 상이할 수 있고,  $C_1-C_{25}$ 알킬 ( $-O-$ 가 임의로 개재될 수 있음) 또는  $C_1-C_{25}$ 알콕시이고,  $m1$ 은 0, 1 또는 2인

[0195] 화학식 Iva, 화학식 Ivb, 화학식 Va, 화학식 Vb 및 화학식 Vc의 화합물이 더욱 더 바람직하다.

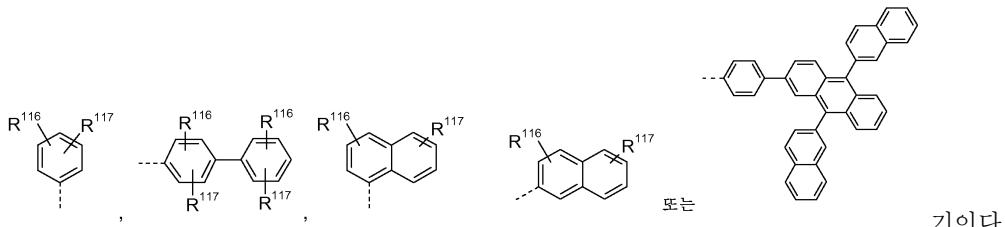
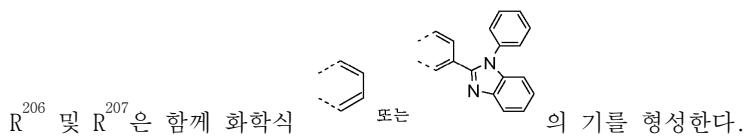
[0196]  $R^1$ 은 바람직하게는 , , , 또는  $-BU-N(R^{25'})R^{26'}$ 이다.

[0197]  $R^2$ ,  $R^3$  및  $R^{25}$ 는 바람직하게는 , , 또는 이다.

[0198]  $R^{25'}$  및  $R^{26'}$ 은 서로 독립적으로 또는 이나, 또는  $R^{25'}$  및  $R^{26'}$ 은 그들이 결합된 질소 원자와 함께

기를 형성하고, 여기서  $R^{41}$ 은 H 또는  $C_1-C_8$ 알킬이다.

[0199]  $R^{206}$  및  $R^{207}$ 은 서로 독립적으로 H,  $C_1-C_{18}$ 알킬, CN, 또는  $C_1-C_{18}$ 알킬 ( $O$ 가 개재됨)이나, 또는



[0202]  $R^{116}$  및  $R^{117}$ 은  $C_1-C_{25}$ 알킬 (-0-가 임의로 개재될 수 있음), CN 또는  $C_1-C_{25}$ 알콕시이다.

[0203]  $R^{216}$  및  $R^{217}$ 은  $C_1-C_{25}$ 알킬 (-0-가 임의로 개재될 수 있음) 또는  $C_1-C_{25}$ 알콕시이다.

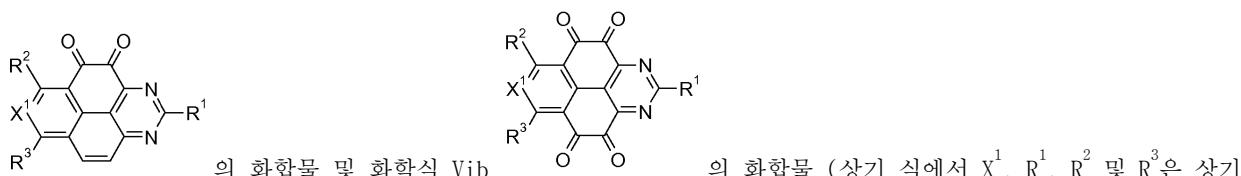
[0204] 화학식 Iva의 바람직한 화합물은 청구항 제6항에 제시된 바와 같은 화합물 E-1 내지 E-8, F-1 및 F-2이다.

[0205] 화학식 Ib의 바람직한 화합물은 청구항 제6항에 제시된 바와 같은 화합물 G-1 내지 G-5, H-1 및 H-2이다.

[0206] 화학식 Vb의 바람직한 화합물은 청구항 제6항에 제시된 바와 같은 화합물 I-1 내지 I-5 및 J-1 내지 J-4이다.

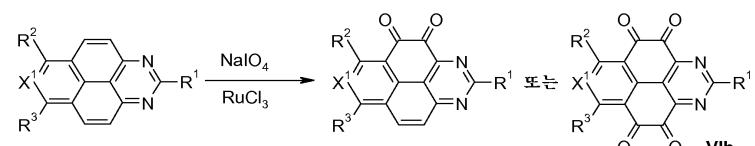
[0207] 화학식 Vc의 바람직한 화합물은 청구항 제6항에 제시된 바와 같은 화합물 K-1 내지 K-8, L-1 및 L-2이다.

[0208] 화학식 Iva, 화학식 Ib, 화학식 Va, 화학식 Vb 및 화학식 Vc의 화합물은 각각 출발 물질로서 화학식 VIa



[0209] 화학식 VIa 및 화학식 Vib의 화합물은 신규하며, 본 발명의 추가의 주제를 형성한다.

[0210] 화학식 VIa 및 Vib의 화합물은 문헌 [J. Org. Chem. 2005, 70, 707-708]에 기재된 절차에 따라 화학식 II의 아자페렌 (여기서  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$  및  $R^8$ 은 H임)을 메틸렌클로라이드 중에서 류테늄 트리클로레이트의 존재 하에 나트륨 퍼클로레이트 또는 나트륨 폐리오네이트로 산화시킴으로써 제조할 수 있다.



[0211]

[0212] 산화제의 양 및 반응 시간에 따라 화학식 VIa의 화합물 및/또는 화학식 Vib의 화합물을 수득한다.

[0213] 화학식 Iva, 화학식 Ib, 화학식 Va, 화학식 Vb 및 화학식 Vc의 화합물은 염기성 구조를 가지며, 여기서 유도체는 유기 전자 장치에서 전자 또는 정공 주입 및/또는 수송의 기능 뿐 아니라, 발광의 기능, 예를 들어, 단일 발광 물질, 발광 도편트와 적합한 호스트, 또는 청색 발광 호스트와 적합한 도편트의 기능을 수행할 수 있다. 호스트로서 형광 또는 인광 방출체 물질이 사용될 수 있다. 유기 전자 장치에서 화학식 Iva, 화학식 Ib, 화학식 Va, 화학식 Vb 및 화학식 Vc의 화합물을 적용함으로써, 장치의 효율, 구동 전압 및 안정성 면에서 탁월한 효과

를 달성할 수 있다.

[0214] 본 발명의 화합물은 유기 발광 장치에 적용되는 것과 유사한 원리에 따라, 유기 태양 전지, 유기 광전도체 및 유기 트랜지스터를 포함하는 유기 전자 장치에서 기능할 수 있다.

[0215] 할로겐은 불소, 염소, 브롬 및 요오드이다.

[0216] C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알킬 (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬)은 전형적으로는 선형 또는 분지형 (가능한 경우)이다. 예로는 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, sec.-부틸, 이소부틸, tert.-부틸, n-펜틸, 2-펜틸, 3-펜틸, 2,2-디메틸프로필, 1,1,3,3-테트라메틸펜틸, n-헥실, 1-메틸헥실, 1,1,3,3,5,5-헥사메틸헥실, n-헵틸, 이소헵틸, 1,1,3,3-테트라메틸부틸, 1-메틸헵틸, 3-메틸헵틸, n-옥틸, 1,1,3,3-테트라메틸부틸과 2-에틸헥실, n-노닐, 데실, 운데실, 도데실, 트리데실, 테트라데실, 펜타데실, 헥사데실, 옥타데실, 에이코실, 헤네이코실, 도코실, 테트라코실 또는 웨타코실이 있다. C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬은 전형적으로 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, sec.-부틸, 이소부틸, tert.-부틸, n-펜틸, 2-펜틸, 3-펜틸, 2,2-디메틸-프로필, n-헥실, n-헵틸, n-옥틸, 1,1,3,3-테트라메틸부틸 및 2-에틸헥실이다. C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알킬은 전형적으로는 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, sec.-부틸, 이소부틸, tert.-부틸이다.

[0217] C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알콕시 (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시) 기는 직쇄 또는 분지형 알콕시기, 예를 들어 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 이소프로폭시, n-부톡시, sec-부톡시, tert-부톡시, 아밀옥시, 이소아밀옥시 또는 tert-아밀옥시, 헵틸옥시, 옥틸옥시, 이소옥틸옥시, 노닐옥시, 데실옥시, 운데실옥시, 도데실옥시, 테트라데실옥시, 펜타데실옥시, 헥사데실옥시, 헵타데실옥시 및 옥타데실옥시이다. C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알콕시의 예는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 이소프로폭시, n-부톡시, sec.-부톡시, 이소부톡시, tert.-부톡시, n-펜틸옥시, 2-펜틸옥시, 3-펜틸옥시, 2,2-디메틸프로폭시, n-헥실옥시, n-헵틸옥시, n-옥틸옥시, 1,1,3,3-테트라메틸부톡시 및 2-에틸헥실옥시이고, 바람직하게는 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>알콕시 예컨대 전형적으로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 이소프로폭시, n-부톡시, sec.-부톡시, 이소부톡시, tert.-부톡시이다. 용어 "알킬티오기"는 에테르 연결부의 산소 원자가 황 원자에 의해 대체된 것을 제외하고는, 알콕시기와 동일한 기를 의미한다.

[0218] C<sub>2</sub>-C<sub>25</sub>알케닐 (C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub>알케닐) 기는 직쇄 또는 분지형 알케닐기, 예를 들어 비닐, 알릴, 메트알릴, 이소프로페닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 이소부테닐, n-펜타-2,4-디에닐, 3-메틸-부트-2-에닐, n-옥트-2-에닐, n-도데스-2-에닐, 이소도데세닐, n-도데스-2-에닐 또는 n-옥타데스-4-에닐이다.

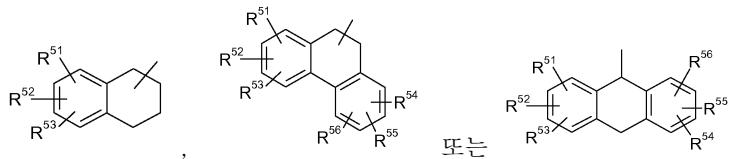
[0219] C<sub>2-24</sub>알키닐 (C<sub>2-18</sub>알키닐)은 직쇄 또는 분지형이고, 바람직하게는 C<sub>2-8</sub>알키닐 (이는 비치환 또는 치환될 수 있음), 예를 들어, 에티닐, 1-프로핀-3-일, 1-부틴-4-일, 1-펜틴-5-일, 2-메틸-3-부탄-2-일, 1,4-펜타디인-3-일, 1,3-펜타디인-5-일, 1-헥신-6-일, 시스-3-메틸-2-펜텐-4-인-1-일, 트랜스-3-메틸-2-펜텐-4-인-1-일, 1,3-헥사디인-5-일, 1-옥탄-8-일, 1-노닌-9-일, 1-데신-10-일 또는 1-테트라코신-24-일이다.

[0220] C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>퍼플루오로알킬, 특히 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>퍼플루오로알킬은 분지형 또는 비분지형 라디칼, 예를 들어 -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>CF<sub>2</sub>CF<sub>3</sub>, -CF(CF<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, -(CF<sub>2</sub>)<sub>3</sub>CF<sub>3</sub> 및 -C(CF<sub>3</sub>)<sub>3</sub>이다.

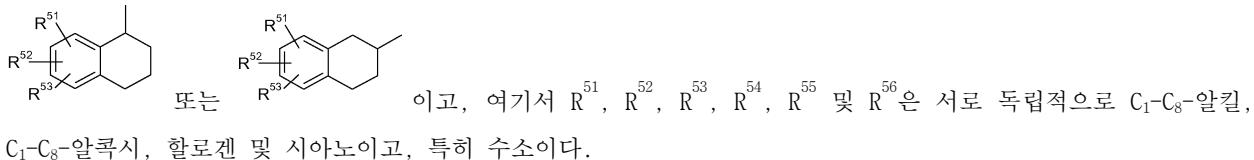
[0221] 용어 "할로알킬, 할로알케닐 및 할로알키닐"은 상기 알킬기, 알케닐기 및 알키닐기가 부분적으로 또는 완전히 할로겐으로 치환됨으로써 제공되는 기, 예컨대 트리플루오로메틸 등을 의미한다. "알데히드기, 케톤기, 에스테르기, 카르바모일기 및 아미노기"는 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기, 아르알킬기 또는 헤테로시클릭기에 의해 치환된 것들을 포함하며, 여기서 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기, 아르알킬기 및 헤테로시클릭기는 비치환 또는 치환될 수 있다. 용어 "실릴기"는 화학식 -SiR<sup>262</sup>R<sup>263</sup>R<sup>264</sup>의 기를 의미하며, 여기서 R<sup>262</sup>, R<sup>263</sup> 및 R<sup>264</sup>는 서로 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬기, 특히 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> 알킬기, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴기 또는 C<sub>7</sub>-C<sub>12</sub>아르알킬기, 예컨대 트리메틸실릴기이다. 용어 "실록사닐기"는 화학식 -O-SiR<sup>262</sup>R<sup>263</sup>R<sup>264</sup>의 기를 의미하며, 여기서 R<sup>262</sup>, R<sup>263</sup> 및 R<sup>264</sup>는 상기에 정의된 바와 같고, 예컨대 트리메틸실록사닐기이다.

[0222] 용어 "시클로알킬기"는 전형적으로는 C<sub>5</sub>-C<sub>18</sub>시클로알킬, 특히 C<sub>5</sub>-C<sub>12</sub>시클로알킬, 예컨대 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸, 시클로노닐, 시클로데실, 시클로운데실, 시클로도데실, 바람직하게는 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸 또는 시클로옥틸 (이는 비치환 또는 치환될 수 있음)이다. 용어 "시클로알케닐기"는 하나 이상의 이중 결합을 함유하는 불포화 지환족 탄화수소기, 예컨대 시클로펜테닐, 시클로펜타디에닐, 시클로헥

세닐 등 (이는 비치환 또는 치환될 수 있음)을 의미한다. 시클로알킬기, 특히 시클로헥실기는 C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-알킬, 할로젠 및 시아노로 1 내지 3회 치환될 수 있는 페닐에 의해 1 또는 2회 축합될 수 있다.



[0223] 상기 축합된 시클로헥실기의 예는 , 또는 이고, 특히



[0224] 아릴은 통상 C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>아릴, 바람직하게는 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴 (이는 임의로 치환될 수 있음)이고, 예를 들어, 페닐, 4-메틸페닐, 4-메톡시페닐, 나프틸, 특히 1-나프틸 또는 2-나프틸, 비페닐릴, 터페닐릴, 피레닐, 2- 또는 9-플루오레닐, 폐난트릴, 안트릴, 테트라실, 펜타실, 헥사실 또는 쿼더페닐릴 (이는 비치환 또는 치환될 수 있음)이다.

[0225] 용어 "아르알킬기"는 전형적으로는 C<sub>7</sub>-C<sub>25</sub>아르알킬, 예컨대 벤질, 2-벤질-2-프로필, β-페닐-에틸, α, α-디메틸벤질, ω-페닐-부틸, ω, ω-디메틸-ω-페닐-부틸, ω-페닐-도데실, ω-페닐-옥타데실, ω-페닐-에이코실 또는 ω-페닐-도코실이고, 바람직하게는 C<sub>7</sub>-C<sub>18</sub>아르알킬 예컨대 벤질, 2-벤질-2-프로필, β-페닐-에틸, α, α-디메틸벤질, ω-페닐-부틸, ω, ω-디메틸-ω-페닐-부틸, ω-페닐-도데실 또는 ω-페닐-옥타데실이고, 특히 바람직하게는 C<sub>7</sub>-C<sub>12</sub>아르알킬 예컨대 벤질, 2-벤질-2-프로필, β-페닐-에틸, α, α-디메틸벤질, ω-페닐-부틸 또는 ω, ω-디메틸-ω-페닐-부틸이고, 여기서 지방족 탄화수소기 및 방향족 탄화수소기의 둘 모두가 비치환 또는 치환될 수 있다.

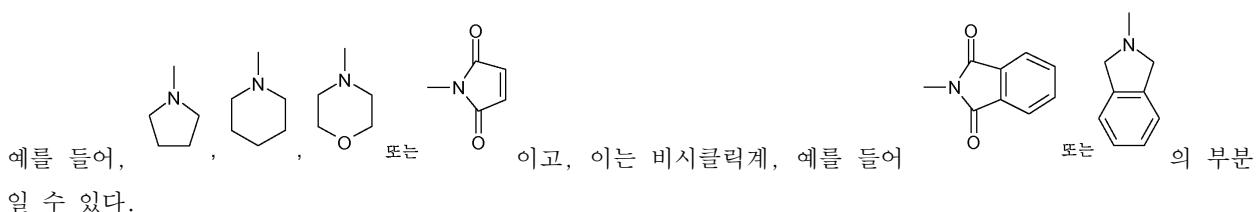
[0226] 용어 "아릴 에테르기"는 전형적으로는 C<sub>6-24</sub>아릴옥시기, 즉 O-C<sub>6-24</sub>아릴, 예를 들어, 페녹시 또는 4-메톡시페닐이다. 용어 "아릴 티오에테르기"는 전형적으로는 C<sub>6-24</sub>아릴티오기, 즉 S-C<sub>6-24</sub>아릴, 예를 들어, 페닐티오 또는 4-메톡시페닐티오이다. 용어 "카르바모일기"는 전형적으로는 C<sub>1-18</sub>카르바모일 라디칼, 바람직하게는 C<sub>1-8</sub>카르바모일 라디칼 (이는 비치환 또는 치환될 수 있음), 예를 들어, 카르바모일, 메틸카르바모일, 에틸카르바모일, n-부틸카르바모일, tert-부틸카르바모일, 디메틸카르바모일옥시, 모르폴리노카르바모일 또는 피롤리디노카르바모일이다.

[0227] 알킬아미노기, 디알킬아미노기, 알킬아릴아미노기, 아릴아미노기 및 디아릴기 내 용어 "아릴" 및 "알킬"은 전형적으로 각각 C<sub>1</sub>-C<sub>25</sub>알킬 및 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴이다.

[0228] 알킬아릴은 알킬-치환된 아릴 라디칼, 특히 C<sub>7</sub>-C<sub>12</sub>알킬아릴을 지칭한다. 예로는 톨릴, 예컨대 3-메틸- 또는 4-메틸페닐, 또는 크실릴, 예컨대 3,4-디메틸페닐 또는 3,5-디메틸페닐이 있다.

[0229] 헤테로아릴은 전형적으로는 C<sub>2</sub>-C<sub>26</sub>헤테로아릴 (C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헤테로아릴), 즉 5 내지 7개의 고리 원자를 갖는 고리 또는 축합 고리계이며, 여기서 질소, 산소 또는 황이 가능한 헤테로 원자이고, 전형적으로는 6개 이상의 컨쥬게이트된 π-전자를 갖는 5 내지 30개의 원자를 갖는 불포화 헤테로시클릭기, 예컨대 티에닐, 벤조[b]티에닐, 디벤조[b,d]티에닐, 티안트로닐, 푸릴, 푸르푸릴, 2H-피라닐, 벤조푸라닐, 이소벤조푸라닐, 디벤조푸라닐, 페녹시티에닐, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 피리딜, 비피리딜, 트리아지닐, 피리미디닐, 피라지닐, 피리다지닐, 인돌리지닐, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 퓨리닐, 퀴놀리지닐, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 프탈라지닐, 나프티리디닐, 퀴녹살리닐, 퀴나졸리닐, 신놀리닐, 프테리디닐, 카르볼리닐, 벤조트리아졸릴, 벤족사졸릴, 페난트리디닐, 아크리디닐, 피리미디닐, 페난트롤리닐, 페나지닐, 이소티아졸릴, 페노티아지닐, 이속사졸릴, 푸라지닐 또는 페녹사지닐 (이는 비치환 또는 치환될 수 있음)이다.

[0230] 예를 들어, R<sup>25'</sup> 및 R<sup>26'</sup>에 의해 형성된 5 또는 6원 고리의 예는 각각 3 내지 5개의 탄소 원자를 갖고 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나의 부가적 헤테로원자를 가질 수 있는 헤테로시클로알칸 또는 헤�테로시클로알켄,



[0231] 상기 기의 가능한 치환기는 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬, 히드록실기, 메르캅토기, C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬티오, 할로겐, 할로-C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub> 알킬, 시아노기, 알데히드기, 케톤기, 카르복실기, 에스테르기, 카르바모일기, 아미노기, 니트로기 또는 실릴기이고, 여기서 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알콕시, 시아노기 또는 실릴기가 바람직하다.

[0232] 치환기, 예컨대 R<sup>41</sup>이 하나의 기에서 1회 초과로 나타나는 경우, 이는 각 경우에 상이할 수 있다.

[0233] 용어 "G에 의해 치환된"은 1개 이상, 특히 1 내지 3개의 G기가 존재할 수 있음을 의미한다.

[0234] 상기된 바와 같이, 상기 기는 E에 의해 치환되고/거나, 원하는 경우, D가 개재될 수 있다. 개재는 단일 결합에 의해 서로 연결된 2개 이상의 탄소 원자를 함유하는 기의 경우에만 물론 가능하며, C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴에는 개재되지 않고, 개재된 아릴알킬 또는 알킬아릴은 알킬 잔기 내에 단위 D를 함유한다. 하나 이상의 E에 의해 치환되고/거나 하나 이상의 단위 D가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬은, 예를 들어, (CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>1-9</sub>R<sup>x</sup> (여기서 R<sup>x</sup>는 H 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬 또는 C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>알카노일 (예를 들어 CO-CH(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>), CH<sub>2</sub>-CH(OR<sup>y</sup>)-CH<sub>2</sub>-O-R<sup>y</sup> (여기서 R<sup>y</sup>는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>5</sub>-C<sub>12</sub>시클로알킬, 페닐, C<sub>7</sub>-C<sub>15</sub>페닐알킬이고, R<sup>y</sup>는 R<sup>x</sup>와 동일한 정의를 포함하거나 또는 H임)),

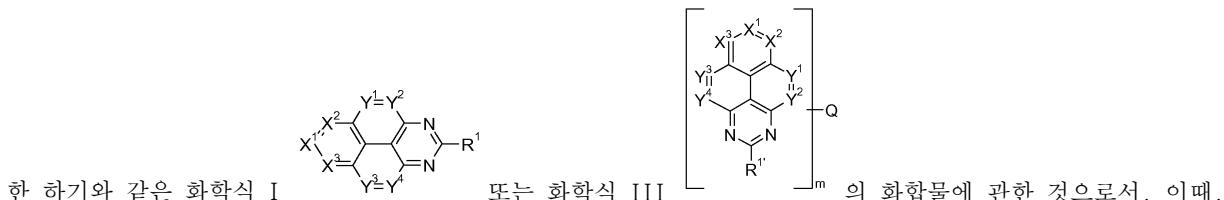
[0235] C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬렌-COO-R<sup>z</sup>, 예를 들어 CH<sub>2</sub>COOR<sub>z</sub>, CH(CH<sub>3</sub>)COOR<sup>z</sup>, C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>COOR<sup>z</sup> (여기서 R<sup>z</sup>는 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, (CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>1-9</sub>R<sup>x</sup> (여기서 R<sup>x</sup>는 상기 지시된 정의를 포함함)),

[0236] CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>-O-CO-CH=CH<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>CH(OH)CH<sub>2</sub>-O-CO-C(CH<sub>3</sub>)=CH<sub>2</sub>이다.

[0237] 바람직한 아릴렌 라디칼은 1,4-페닐렌, 2,5-톨릴렌, 1,4-나프틸렌, 1,9 안트라실렌, 2,7-페난트릴렌과 2,7-디히드로페난트릴렌이다.

[0238] 바람직한 헤테로아릴렌 라디칼은 2,5-페리다이닐렌, 3,6-페리다지닐렌, 2,5-페리미디닐렌, 1,3,4-티아디아졸-2,5-일렌, 1,3-티아졸-2,4-일렌, 1,3-티아졸-2,5-일렌, 2,4-티오페닐렌, 2,5-티오페닐렌, 1,3-옥사졸-2,4-일렌, 1,3-옥사졸-2,5-일렌 및 1,3,4-옥사디아졸-2,5-일렌, 2,5-인데닐렌 및 2,6-인데닐렌이다.

[0239] 화학식 I 및 화학식 III의 특정 화합물을 신규하며 본 발명의 추가의 주제를 형성한다. 따라서, 본 발명은 또



[0240] Y<sup>1</sup>, Y<sup>2</sup>, Y<sup>3</sup>, Y<sup>4</sup>, X<sup>1</sup>, X<sup>2</sup> 및 X<sup>3</sup>은 서로 독립적으로 N 또는 CR<sup>4</sup>이고,

[0241] 단, X<sup>1</sup>, X<sup>2</sup> 및 X<sup>3</sup> 기 중 하나 이상은 CR<sup>4</sup> 기이고,

[0242] R<sup>1</sup>은 F, -SiR<sup>100</sup>R<sup>101</sup>R<sup>102</sup> 또는 유기 치환기이고,

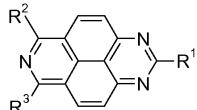
[0243] R<sup>1'</sup> 및 R<sup>4</sup>는 서로 독립적으로 수소, F, -SiR<sup>100</sup>R<sup>101</sup>R<sup>102</sup> 또는 유기 치환기이거나, 또는

[0244] 서로 인접한 치환기 R<sup>1</sup>, R<sup>1'</sup> 및 R<sup>4</sup> 중 임의의 것이 함께 방향족 또는 헤테로방향족 고리 또는 고리계 (이는 임의로 치환될 수 있음)를 형성하고,

[0245] m은 1 내지 6의 정수이고,

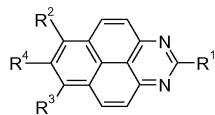
[0246] R<sup>100</sup>, R<sup>101</sup> 및 R<sup>102</sup>는 서로 독립적으로 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬기, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴기 또는 C<sub>7</sub>-C<sub>12</sub>아르알킬기 (이는 임의로 치환될 수 있음)이고, Q는 연결기이고, 단, 화학식 III의 화합물에서 치환기 R<sup>1</sup> 또는 R<sup>4</sup> 중 하나 이상은 Q 기이고,

[0247] 단 하기 화합물 1 내지 12는 제외된다:



화합물	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>
1	···	···	···
2	···-Br	···-Br	···-Br
3	···-N(O <sup>+</sup> ) <sub>2</sub> <sup>-</sup>	···-N(O <sup>+</sup> ) <sub>2</sub> <sup>-</sup>	···-N(O <sup>+</sup> ) <sub>2</sub> <sup>-</sup>
4	-CH <sub>3</sub>	H	H
5	···	H	H
6	-CH <sub>3</sub>	-CH <sub>3</sub>	-CH <sub>3</sub>

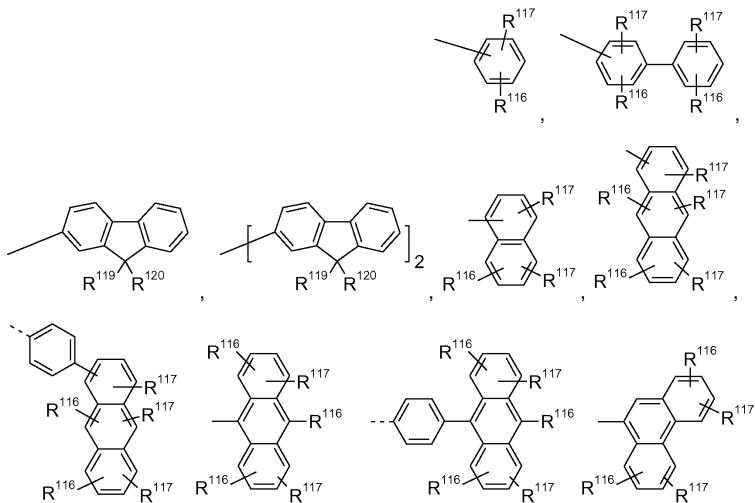
[0248]



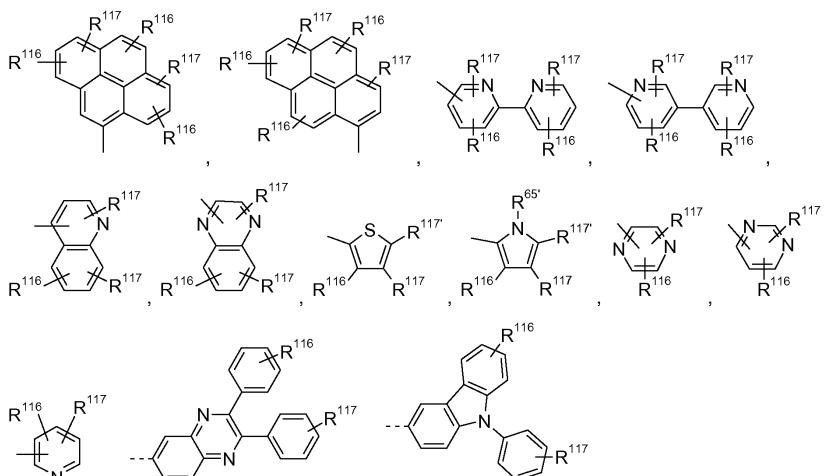
화합물	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>
7	-CH <sub>3</sub>	···	···	H
8	···	···	···	H
9	-CH <sub>3</sub>	H	-CH <sub>3</sub>	-CO <sub>2</sub> C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>
10	···	···	···	H
11	-CH <sub>3</sub>	-CH <sub>3</sub>	···	H
12	···	-CH <sub>3</sub>	···	H

[0249]

[0250] R<sup>1</sup>은 바람직하게는 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴 (이는 G에 의해 치환됨), C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴 (이는 G에 의해 치환됨), 예컨대



[0251]



[0252]

또는  $-L^1-NR^{25'}R^{26'}$  기이다.

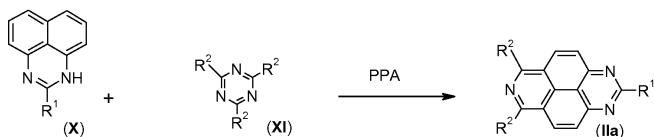
[0253]

화학식 I의 화합물의 합성은 공지된 과정에 따라 또는 그와 유사하게 수행할 수 있다. 예를 들어, 문헌 [A. V. Aksenov et. al., Chemistry of Heterocyclic Compounds (2003) 1417]을 참고한다.

[0254]

화학식 IIa의 화합물은 폴리인산 (PPA)의 존재 하에 화학식 X의 화합물을 화학식 XI의 화합물과 반응시킴으로써 수득할 수 있다 (A. V. Aksenov et. al., Tetrahedron Letters (2008) 707 and ibid. (2008) 1808).

[0255]



[0256]

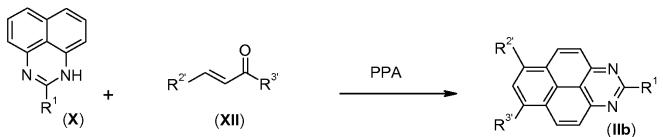
별법으로, 화학식 IIa의 화합물 (여기서 R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = R<sup>3</sup>)은 폴리인산 (PPA)의 존재 하에 화학식 XIII의 화합물을 화학식 XIV의 화합물과 반응시킴으로써 수득할 수 있다 (A. V. Aksenov et. al., Chemistry of Heterocyclic Compounds (2002) 665).

[0257]



[0258]

화학식 IIb의 화합물은 폴리인산 (PPA)의 존재 하에 화학식 X의 화합물을 화학식 XII의 화합물과 반응시킴으로써 수득할 수 있다 (A. V. Aksenov et. al., Chemistry of Heterocyclic Compounds (1997) 1367 and ibid. (2007) 257).

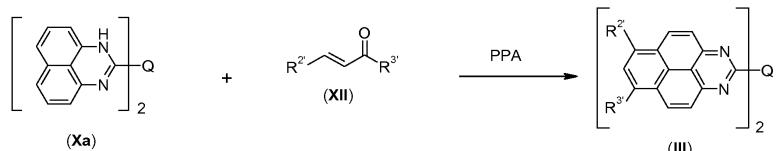


[0259]

[0260] 화학식 X의 화합물의 합성은 문헌 [A. L. Llamas-Saiz, J. Chem. Soc. Perkin. Trans. (1995) 1389]에 기재된 과정에 따라 또는 그와 유사하게 수행할 수 있다.

[0261]

[0261] 화학식 III의 화합물 (여기서 Q는 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 라디칼임)은, 예를 들어, PPA 중 화학식 Xa의 화합물과 화학식 XII의 화합물의 반응에 의해 제조할 수 있다.

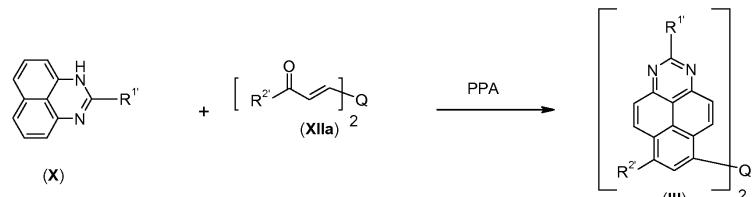


[0262]

[0263] 화학식 Xa의 화합물은 문헌 [Khimiya Geterotsiklicheskikh Soedinenii (1980) 96–100]에 기재된 바와 같이 제조할 수 있다.

[0264]

[0264] 화학식 III의 화합물 (여기서 Q는 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 라디칼임)을 또한 화합물 X 및 XIIa로부터 출발하여 제조할 수 있다.



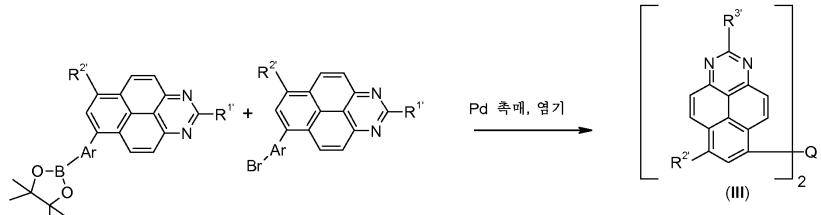
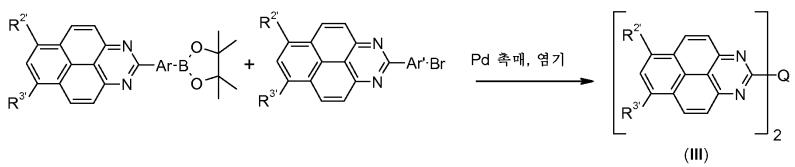
[0265]

[0266] 화학식 XIIa의 화합물은, 예를 들어, 문헌 [Synthetic Communications 32 (2002) 3389]에 기재된 바와 같이 제조할 수 있다.



[0267]

[0268] 별법으로, 화학식 III의 화합물은 또한 브로모아릴 아자페렌 및 보론산 에스테르 관능을 보유하는 아자페렌의 스즈끼 (Suzuki) 커플링에 의해 제조할 수 있다.



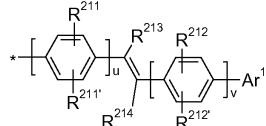
[0269]

[0270] 스즈끼 반응은 WO04039786에 기재된 바와 같이 수행할 수 있다. Ar 및 Ar'는 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 라디칼이며, 이는 브로모아릴 아자페렌 및 보론산 에스테르 관능을 보유하는 아자페렌의 스즈끼 커플링 이후 함께 가교 단위 Q를 형성한다.

[0271]

[0271] 본 발명의 전자 장치는 바람직하게는 전계발광 (EL) 장치이다. 화학식 I 또는 화학식 III의 화합물은 유기 발

광 다이오드 (OLED)에서 인광 화합물을 위한 호스트로서, 방출 및/또는 전자 수송 물질로서 사용될 수 있다.



[0272] 화학식 II의 화합물 (여기서 R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup> 및 R<sup>3</sup> 중 하나 이상은 화학식 출체로서, 특히 호스트 물질과 함께, 사용될 수 있다.

의 기임)은 형광 방

화학식 II의 화합물 (여기서 R<sup>1</sup>은  
기이고, R<sup>2</sup> 및 R<sup>3</sup>은 서로 독립적으로 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴임)이 바람직하다.

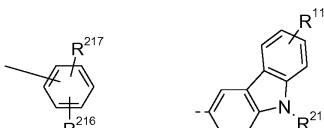
[0273] u는 0 또는 1이고, v는 0 또는 1이다.

[0274] R<sup>211</sup>, R<sup>211'</sup>, R<sup>212</sup> 및 R<sup>212'</sup>는 서로 독립적으로 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시이다.

[0275] R<sup>213</sup> 및 R<sup>214</sup>는 서로 독립적으로 H 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬이다.

[0276] X<sup>1</sup>은 N 또는 CH이고, 특히 CH이다. R<sup>5</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup> 및 R<sup>8</sup>은 H이다.

[0277] Ar<sup>1</sup>은 -NR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴 (이는 G에 의해 치환됨), C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴, 또는 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴 (이는



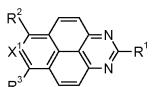
G에 의해 치환됨), 바람직하게는 -NR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>, 또는 이고, 여기서 R<sup>25</sup> 및 R<sup>26</sup>은 상기 정의된 바와 같다.

[0278] 상기 화합물의 예는 청구항 제6항에 제시된 바와 같은 화합물 B-26 내지 B-32이다.

[0279] R<sup>5</sup>, R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup> 및 R<sup>8</sup>이 H이고,

[0280] X<sup>1</sup>이 N 또는 CR<sup>4</sup>이고, 특히 N, CH, 매우 특히 CH이고,

[0281] R<sup>1</sup> 내지 R<sup>4</sup>가 서로 독립적으로 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, 특히 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, 특히 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬에 의해 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴인 화학식



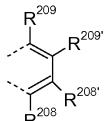
II VI 의 화합물이 형광 방출체를 위한 호스트 물질로서 바람직하다.

[0282] 상기 화합물의 예는 청구항 제6항에 제시된 바와 같은 화합물 A-1, B-1, B-2, B-9, B-34, B-35 및 B-36이다.

[0283] X<sup>1</sup>이 N 또는 CR<sup>4</sup>이고, 특히 N, CH, 매우 특히 CH이고,

[0284] R<sup>1</sup> 내지 R<sup>4</sup>가 서로 독립적으로 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, 특히 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, 특히 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬에 의해 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴이고,

[0285] R<sup>206</sup> 및 R<sup>207</sup>이 서로 독립적으로 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, 특히 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, 특히 C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>알킬에 의해 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴, 또는 CN<sup>1</sup>이나, 또는



[0286]  $R^{206}$  및  $R^{207}$ 이 함께 화학식 의 기를 형성하고, 여기서

[0287]  $R^{209}$  및  $R^{208}$ 은 H이고,

[0288]  $R^{209'}$  및  $R^{208'}$ 는 서로 독립적으로 H, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, -O-가 개재된 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>페플루오로알킬, C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시에 의해 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>24</sub>아릴, C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴, 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알킬 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>알콕시에 의해 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헵테로아릴인

[0289] 화학식 Ivb 및 Vc의 화합물은 전자 용품에서 적합한 전자 수송 물질이다. 상기 화합물은 OLED에서 전자 수송 또는 주입층에서 사용될 수 있다. 이 경우, 화합물은 단독으로 또는 도편트와 함께 사용될 수 있다. 상기 화합물은 또한 유기 광전지셀에서 전자 수용 물질로서 사용 가능하다.

[0290] 상기 화합물의 예는 청구항 제6항에 제시된 바와 같은 화합물 G-1 내지 G-5, H-1, H-2, K-1 내지 K-8, L-1 및 L-2이다.

[0291] 적합한 도편트는 US2008/018237에 기재된 바와 같은 알칼리 할로겐화물, 예컨대 LiF, NaF, KF, CsF, LiCl, 알칼리 금속 칼코제나이드, 예컨대 Li<sub>2</sub>O, K<sub>2</sub>O, Cs<sub>2</sub>O, Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, 알칼리토 칼코제나이드, 예컨대 CaO, BaO이다. Li로 도핑된 Bphen (몰비 1:1)을 이용한 n-도핑된 전자 수송층의 예가 US6,337,102에 기재되어 있다. WO2009000237은 유기 도편트 및 상기 물질의 용도를 개시하고 있다.

[0292] 본 발명의 한 실시양태에서 EL 장치는 캐소드, 애노드, 및 그 사이의, 호스트 물질 및 인광성 발광 물질을 함유하는 발광층을 포함하고, 여기서 호스트 물질은 화학식 I 또는 화학식 III의 화합물이다.

[0293] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 EL 장치는 캐소드, 애노드 및 전자 수송 물질을 포함하고, 여기서 전자 수송 물질은 화학식 I 또는 화학식 III의 화합물이거나 또는 그를 포함한다.

[0294] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 EL 장치는 캐소드, 애노드 및 방출층을 포함하고, 여기서 방출층은 화학식 I 또는 화학식 III의 화합물로 이루어지거나 또는 그를 포함한다.

[0295] 본 발명의 또 다른 실시양태에서 EL 장치는 캐소드, 애노드, 및 그 사이의, 화학식 I 또는 화학식 III의 물질을 함유하는 발광층을 포함하고, 여기서 화학식 I 또는 화학식 III의 화합물은 형광 호스트 물질 또는 형광성 발광 물질로서 사용된다.

[0296] 또한, 본 발명은 또한 전자사진 광수용체, 광전 컨버터, 태양 전지, 화상 감지기, 염료 레이저 및 전계발광 장치를 위한 화학식 I 또는 화학식 III의 화합물의 용도에 관한 것이다.

[0297] 적합하게는, OLED 장치의 발광층은 발광을 위한 호스트 물질 및 하나 이상의 게스트 물질을 포함한다. 호스트 물질 중 하나는 화학식 I 또는 홀화식 III의 화합물일 수 있다. 발광 게스트 물질(들)은 통상적으로 호스트 물질의 양 미만의 양으로 존재하고, 전형적으로 호스트의 15 중량% 이하, 더 전형적으로는 0.1 내지 10 중량%, 일반적으로 호스트의 2 내지 8 중량%의 양으로 존재한다. 편의상, 본원에서는 인광 착체 게스트 물질을 인광 물질로 지칭할 수 있다. 방출층은 수송 및 방출 특성을 겸비한 단일 물질을 포함할 수 있다. 방출 물질이 도편트가든지 또는 주요 성분이든지에 관계없이, 방출층은 기타 물질, 예컨대 방출층의 방출을 조율하는 도편트를 포함할 수 있다. 방출층은 조합하여 목적하는 광스펙트럼을 방출할 수 있는 복수개의 방출 물질을 포함할 수 있다.

[0298] 인광 물질을 위한 다른 호스트 물질

[0299] 본 발명에 유용한 호스트 물질은 단독으로, 또는 기타 호스트 물질과 조합하여 사용할 수 있다. 기타 호스트 물질은 삼중선 엑시톤이 호스트 물질로부터 인광 물질로 효율적으로 이동될 수 있도록 선택되어야 한다. 적합한 호스트 물질은 WO00/70655, 01/39234, 01/93642, 02/074015, 02/15645 및 US20020117662에 기재되어 있다. 적합한 호스트에는 특정 아릴 아민, 트리아졸, 인돌 및 카르바졸 화합물이 포함된다. 호스트의 예는 4,4'-N,N'-디카르바졸-비페닐 (CBP), 2,2'-디메틸-4,4'-N,N'-디카르바졸-비페닐, m-(N,N'-디카르바졸)벤젠과 폴리(N-비닐카르바졸), 및 그의 유도체이다.

- [0300] 바람직한 호스트 물질은 연속 막을 형성할 수 있다. 발광층은 장치의 막 형태성, 전기적 특성, 발광 효율성 및 수명을 개선시키기 위해 1종 초과의 호스트 물질을 함유할 수 있다. 발광층은 우수한 정공 수송 특성을 갖는 제1 호스트 물질, 및 우수한 전자 수송 특성을 갖는 제2 호스트 물질을 함유할 수 있다.
- [0301] 인광 물질
- [0302] 인광 물질은 동일하거나 상이한 층에서 단독으로, 또는 특정 경우, 서로 조합하여 사용할 수 있다. 인광 물질 및 관련 물질의 예는 W000/57676, W000/70655, W001/41512, W002/15645, US2003/0017361, W001/93642, W001/39234, US6,458,475, W002/071813, US6,573,651, US2002/0197511, W002/074015, US6,451,455, US2003/0072964, US2003/0068528, US6,413,656, 6,515,298, 6,451,415, 6,097,147, US2003/0124381, US2003/0059646, US2003/0054198, EP1239526, EP1238981, EP1244155, US2002/0100906, US2003/0068526, US2003/0068535, JP2003073387, JP2003073388, US2003/0141809, US2003/0040627, JP2003059667, JP2003073665 및 US2002/0121638에 기재되어 있다.
- [0303] 녹색-방출 fac-트리스(2-페닐피리디네이토-N,C<sup>2'</sup>)이리듐(III) 및 비스(2-페닐피리디네이토-N,C<sup>2'</sup>)이리듐(III)(아세틸아세토네이트)와 같은 IrL<sub>3</sub> 및 IrL<sub>2</sub>L' 유형의 시클로금속화 Ir(III) 착체의 방출 광장은 시클로금속화성 리간드 L 상의 적절한 위치에 전자 공여 또는 인출 기를 치환시키거나, 또는 시클로금속화성 리간드 L에 대하여 상이한 혜테로사이클을 선택함으로써 이동시킬 수 있다. 방출 광장은 또한 보조적 리간드 L'를 선택함으로써 이동시킬 수 있다. 적색 방출체의 예는 비스(2-(2'-벤조티에닐)피리디네이토-N,C<sup>3'</sup>)이리듐(E1)(아세틸아세토네이트) 및 트리스(1-페닐이소퀴놀리네이토-N,C)이리듐(III)이다. 청색-방출 예는 비스(2-(4,6-디플루오로페닐)-피리디네이토-N,C<sup>2'</sup>)이리듐(III)(피콜리네이트)이다.
- [0304] 인광 물질로서 비스(2-(2'-벤조[4,5-a]티에닐)피리디네이토-N, C<sup>3</sup>)이리듐(아세틸아세토네이트)[Btp<sub>2</sub>Ir(acac)]를 이용한 적색 전기인광이 보고되어 있다 (Adachi, C., Lamansky, S., Baldo, M. A., Kwong, R. C., Thompson, M. E. 및 Forrest, S. R., App. Phys. Lett., 78, 1622 1624 (2001)).
- [0305] 다른 중요한 인광 물질로는 시클로금속화 Pt(II) 착체 예컨대 시스-비스(2-페닐피리디네이토-N,C<sup>2'</sup>)백금(II), 시스-비스(2-(2'-티에닐)피리디네이토-N,C<sup>3'</sup>) 백금(II), 시스-비스(2-(2'-티에닐)퀴놀리네이토-N,C<sup>5'</sup>) 백금(II) 또는 (2-(4,6-디플루오로페닐)피리디네이토-N,C<sup>2'</sup>) 백금(II)아세틸아세토네이트가 포함된다. Pt(II)포르파린 착체, 예컨대 2,3,7,8,12,13,17,18-옥타에틸-21H, 23H-포르핀 백금(H)가 또한 유용한 인광 물질이다.
- [0306] 유용한 인광 물질의 또 다른 예로는 3가 란탄족 예컨대 Th<sup>3+</sup> 및 Eu<sup>3+</sup>의 배위 착체가 포함된다 (J. Kido et al., Appl. Phys. Lett., 65, 2124 (1994)).
- [0307] 다른 중요한 인광 물질이 W006/000544 및 유럽 특허 출원 번호 07102949.0에 기재되어 있다.
- [0308] 인광 물질의 예는 화합물 A-1 내지 B-234, B-1 내지 B-234, C-1 내지 C-44 및 D-1 내지 D-234 (W008/101842에 기재됨), 및 화합물 A1-A144 및 B1-B144 (PCT/EP2009/051109에 기재됨)이다.
- [0309] 차단층
- [0310] 적합한 호스트 이외에, 인광 물질을 이용하는 OLED 장치는 종종 엑시톤 또는 전자-정공 재조합 중심을 호스트 및 인광 물질을 포함하는 발광층에 국한시키는 것을 돋거나 또는 전하 캐리어 (전자 또는 정공)의 수를 감소시키기 위해 적어도 하나의 엑시톤 또는 정공 차단층을 필요로 한다. 한 실시양태에서, 이러한 차단층은 전자 수송층과 발광층 사이에 위치될 것이다. 이 경우, 차단층의 이온화 전위는 호스트에서부터 전자 수송층으로의 정공 이동에 대한 에너지 장벽이 존재하도록 해야 하며, 전자 친화도는 전자가 전자 수송층에서부터 호스트 및 인광 물질을 포함하는 발광층으로 보다 쉽게 통과되도록 해야 한다. 추가로, 차단 물질의 삼중선 에너지는 인광 물질의 것보다 큰 것이 바람직하나, 이는 반드시 요구되는 것은 아니다. 적합한 정공 차단 물질은 W000/70655 및 W001/93642에 기재되어 있다. 유용한 물질의 두 가지 예는 배토쿠프로인 (BCP) 및 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이토)(4-페닐페놀레이토)알루미늄(III) (BalQ)이다. US20030068528에 기재된 바와 같이, BalQ 이외의 다른 금속 착체가 또한 정공 및 엑시톤을 차단하는 것으로 공지되어 있다. US20030175553에는 전자/엑시톤 차단층에 서의 fac-트리스(1-페닐피라졸레이토-N,C<sup>2'</sup>)이리듐(III) (Irppz)의 용도가 기재되어 있다.

- [0311] 본 발명의 실시양태는 작동 효율성, 보다 높은 휘도, 색조, 낮은 구동 전압 및 개선된 작동 안정성과 같은 유리한 특성을 제공할 수 있다. 본 발명에서 유용한 유기금속 화합물의 실시양태는 백색광의 방출에 유용한 색조를 비롯하여 광범위한 색조를 제공할 수 있다 (직접적으로 또는 필터를 통해 다색 디스플레이를 제공함).
- [0312] 일반적 장치 구조
- [0313] 본 발명의 화합물은 소분자 물질, 올리고머 물질, 중합체 물질 또는 그의 조합의 사용으로 다수의 OLED 장치 형태에서 활용될 수 있다. 이들은 단일 애노드 및 캐소드를 포함하는 매우 단순한 구조에서부터 더 복잡한 장치, 예컨대 애노드 및 캐소드가 직교 배치되어 화소를 형성하는 수동 매트릭스 디스플레이, 및 각각의 화소가 독립적으로, 예를 들어, 박막 트랜지스터 (TFT)로 제어되는 활성-매트릭스 디스플레이를 포함한다.
- [0314] 수많은 형태의 유기층이 존재한다. OLED의 필수 요건은 애노드, 캐소드 및 상기 애노드와 캐소드 사이에 위치한 유기 발광층이다. 하기에 보다 자세히 기재되는 바와 같이 부가적 층을 사용할 수 있다.
- [0315] 소분자 장치에 특히 유용한 통상적인 구조는 기판, 애노드, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 임의로 정공-또는 엑시톤-차단층, 전자 수송층 및 캐소드로 구성된다. 이들 층은 하기에 상세히 기재된다. 대안적으로, 기판이 캐소드에 인접하여 위치할 수 있거나, 또는 기판이 사실상 애노드 또는 캐소드를 구성할 수 있음을 유념하기 바란다. 애노드와 캐소드 사이의 유기층은 편의상 유기 EL 소자라고 지칭된다. 또한, 유기층의 조합된 층 두께는 바람직하게는 500 nm 미만이다.
- [0316] 화학식 IIa의 화합물은 발광층 (방출층)에서 호스트로서 사용될 수 있다.
- [0317] 화학식 IIa 및 화학식 IIb의 화합물은, 임의로는 도편트와의 조합물로, 전자 수송층에서 사용될 수 있다.
- [0318] 바람직한 실시양태에서 장치는 유리 기판, 애노드 (인듐 주석 산화물 (ITO)), 정공 주입층 (2-TNATA (4,4',4'''-트리스(N-(나프타-2-일)-N-페닐-아미노)트리페닐아민), α-NPD (유기 또는 무기 도편트로 도핑됨)), 정공 수송층 (4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 (α-NPD)), 방출층 (알루미늄(III) 비스(2-메틸-8-히드록시퀴놀리네이토)-4-페닐페놀레이트 (Ba1Q), α-NPD, Cpd. A-1 또는 Cpd. A-19 (비스(1-페닐이소퀴놀린) (아세틸아세토네이트)이리듐(III) 또는 이리듐(III)비스-(2-메틸디벤조[f,h]퀴녹살린) (아세틸아세토네이트)로 도핑됨)), 전자 수송층 (Ba1Q/A1Q<sub>3</sub>, A1Q<sub>3</sub>, A-1의 Cpd./A1Q<sub>3</sub>, 1,3,5-트리스(N-페닐벤즈이미다졸-2-일)벤젠 (TPBI)/Cpd. A-1, TPBI/A1Q<sub>3</sub>, Cpd. B-38, Ba1Q/BCP (Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 또는 유기 도편트로 도핑됨), Ba1Q/Cpd. A-1 (Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 또는 유기 도편트로 도핑됨), Ba1Q/B-38의 Cpd. (Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 또는 유기 도편트로 도핑됨), Cpd. B-1, Cpd. B-39, Ba1Q/B-1의 Cpd.), 및 캐소드 LiF/A1 또는 Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>/A1을 이 순서로 포함한다. p-도편트의 예는, 예를 들어, 문헌 [K. Walzer, B. Maennig, M. Pfeiffer 및 K. Leo, Chem. Rev. 107 (2007) 1233-1271], EP1596445A1, WO2009/003455A1, DE100357044, WO2008/058525, WO2008/138580, US20080171228 및 US2008/0265216에 기재되어 있다. 적합한 n-도편트는 WO2008/018237에 기재된 바와 같은 알칼리 할로겐화물, 예컨대 LiF, NaF, KF, CsF, LiCl, 알칼리 금속 칼코제나이드, 예컨대 Li<sub>2</sub>O, K<sub>2</sub>O, Cs<sub>2</sub>O, Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, 알칼리토 칼코제나이드, 예컨대 CaO, BaO이다. Li로 도핑된 Bphen (몰비 1:1)을 이용한 n-도핑된 전자 수송층의 예가 US6,337,102에 기재되어 있다. WO2009000237은 유기 도편트 및 상기 물질의 용도를 개시하고 있다.
- [0320] 기판
- [0321] 기판은 의도하는 발광 방향에 따라 광 투과적이거나 또는 불투명할 수 있다. 광 투과 특성은 기판을 통한 EL 방출의 가시화를 위해 바람직하다. 투명한 유리 또는 플라스틱이 상기 경우에 통상적으로 사용된다. 기판은 다중층의 물질을 포함하는 복합 구조일 수 있다. 이는 통상적으로, TFT가 OLED 층 아래에 제공되는 능동 매트릭스 기판에 대한 경우이다. 적어도 방출 화소화된 영역의 기판은 여전히 유리 또는 중합체와 같은 거의 투명한 물질로 구성될 필요가 있다. EL 방출이 상부 전극을 통해 가시화되는 적용분야의 경우, 하부 지지체의 투과 특성은 중요치 않으며, 따라서 광투과성, 광흡수성 또는 광반사성일 수 있다. 이러한 경우에 사용하기 위한 기판으로는 유리, 플라스틱, 반도체 물질, 규소, 세라믹 및 회로 기판 재료가 포함되나 이에 제한되지 않는다. 또한, 기판은 능동 매트릭스 TFT 디자인에서 발견되는 바와 같이, 다중층의 물질을 포함하는 복합 구조일 수 있다. 이러한 장치 형태에는 광투명성 상부 전극을 제공할 필요가 있다.
- [0322] 애노드
- [0323] 목적하는 전계발광성 발광 (EL)이 애노드를 통해 가시화되는 경우, 애노드는 해당 방출에 대해 투명하거나 또는 실질적으로 투명해야 한다. 본 발명에서 사용되는 통상적인 투명한 애노드 물질은 인듐-주석 산화물 (ITO), 인

듐-아연 산화물 (IZO) 및 주석 산화물이나, 알루미늄-도핑된 아연 산화물, 마그네슘-인듐 산화물 및 니켈-텅스텐 산화물을 비롯한 (그러나, 이에 제한되지 않음) 다른 금속 산화물도 작용할 수 있다. 이들 산화물 이외에, 금속 질화물, 예컨대 질화갈륨, 금속 셀레니드, 예컨대 아연 셀레니드 및 금속 황화물, 예컨대, 황화아연을 애노드로서 사용할 수 있다. EL 방출이 캐소드를 통해서만 가시화되는 적용분야의 경우, 애노드의 투과 특성은 중요치 않으며, 투명하거나 불투명하거나 반사성이 임의의 전도성 물질을 사용할 수 있다. 이러한 적용분야를 위한 전도체의 예에는 금, 이리듐, 몰리브덴, 팔라듐 및 백금이 포함되나 이에 제한되지 않는다. 바람직한 애노드 물질은 임의의 적합한 방식, 예컨대 증발, 스퍼터링, 화학적 증착법 또는 전기화학적 방식으로 통상적으로 침착된다. 애노드는 익히 공지된 광식각(photolithographic) 공정을 이용하여 패턴화할 수 있다. 임의적으로, 다른 층의 적용 전에 애노드를 연마하여 표면 조도를 감소시켜 단락(short)을 최소화시키거나 반사성을 증진시킬 수 있다.

#### [0324] 캐소드

발광이 오로지 애노드를 통해서만 가시화되는 경우, 본 발명에 사용되는 캐소드는 거의 모든 전도성 물질로 구성될 수 있다. 바람직한 물질은 우수한 막-형성 특성을 가진 하부 유기층과의 우수한 접촉을 보장하고, 낮은 전압에서 전자 주입을 촉진하고, 우수한 안정성을 갖는다. 유용한 캐소드 물질은 흔히 낮은 일 함수의 금속 (<4.0 eV) 또는 금속 합금을 함유한다. 한 유용한 캐소드 물질은 US-A-4,885,221에 기재된 바와 같이, 은의 백분율이 1 내지 20% 범위인 Mg:Ag 합금으로 구성된다. 캐소드 물질의 또 다른 적합한 부류에는 캐소드, 및 보다 두꺼운 층의 전도성 금속으로 캡핑된 유기층 (예를 들어, 전자 수송층 (ETL))과 접촉해 있는 얇은 전자 주입 층 (EIL)을 포함하는 이중층을 포함된다. 여기서, EIL은 바람직하게는 낮은 일 함수의 금속 또는 금속 염을 포함하며, 이 경우, 보다 두꺼운 캡핑층은 낮은 일 함수를 가질 필요가 없다. 이러한 한 가지 캐소드는 US-A-5,677,572에 기재된 바와 같이, LiF의 얇은 층 다음에 Al의 보다 두꺼운 층으로 구성된다. 알칼리 금속으로 도핑된 ETL 물질, 예를 들어 Li-도핑된 Alq는 유용한 EIL의 또 다른 예이다. 다른 유용한 캐소드 물질 군으로는 US-A-5,059,861, 5,059,862 및 6,140,763에 개시된 것이 포함되나 이에 제한되지 않는다.

발광이 캐소드를 통해 가시화되는 경우, 캐소드는 투명하거나 거의 투명해야 한다. 이러한 적용분야의 경우, 금속은 얇아야 하거나 또는 투명한 전도성 산화물 또는 이들 물질의 조합물을 사용해야 한다. 광학적으로 투명한 캐소드는 US-A-4,885,211, 5,247,190, JP 3,234,963, 미국 특허 번호 5,703,436, 5,608,287, 5,837,391, 5,677,572, 5,776,622, 5,776,623, 5,714,838, 5,969,474, 5,739,545, 5,981,306, 6,137,223, 6,140,763, 6,172,459, EP1076368, US-A-6,278,236 및 6,284,3936에 보다 상세히 기재되어 있다. 캐소드 물질은 임의의 적합한 방법, 예컨대 증발, 스퍼터링 또는 화학적 증착법에 의해 통상적으로 침착된다. 필요에 따라, US-A-5,276,380 및 EP0732868에 기재된 바와 같은 관통-마스크(through-mask) 침착법, 접적 색도우 마스킹법 (integral shadow masking), 레이저 융삭 및 선택적 화학적 증착법을 비제한적으로 포함하는 다수의 익히 공지된 방법을 통해 패턴화를 달성할 수 있다.

#### [0327] 정공 주입층 (HIL)

정공 주입층은 애노드와 정공 수송층 사이에 제공될 수 있다. 정공 주입 물질은 이후의 유기층의 막-형성 특성을 개선시키고 정공 수송층으로의 정공의 주입을 용이하게 하는 작용을 할 수 있다. 정공 주입층에 사용하기에 적합한 물질은 US-A-4,720,432에 기재된 바와 같은 포르파린계 화합물, US-A-6,208,075에 기재된 바와 같은 플라즈마-증착 플루오로카본 중합체, 및 일부 방향족 아민, 예를 들어, m-MTDATA (4,4',4'''-트리스[(3-메틸페닐)페닐아미노]트리페닐아민), 또는 2-TNATA (4,4',4'''-트리스(N-(나프타-2-일)-N-페닐-아미노)트리페닐아민)을 비제한적으로 포함한다. 유기 EL 장치에서 유용한 것으로 보고된 대안적인 정공 주입 물질은 EP0891121 및 EP1029909에 기재되어 있다.

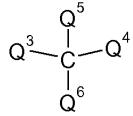
#### [0329] 정공 수송층 (HTL)

유기 EL 장치의 정공 수송층은 하나 이상의 정공 수송 화합물 예컨대 방향족 3급 아민을 함유하며, 여기서 후자는 탄소 원자에만 결합된, 하나 이상의 3가 질소 원자 (그 중 하나 이상은 방향족 고리의 구성원임)를 함유하는 화합물로 이해된다. 한 형태에서, 방향족 3급 아민은 아릴아민, 예컨대 모노아릴아민, 디아릴아민, 트리아릴아민 또는 중합체성 아릴아민일 수 있다. 예시적인 단량체성 트리아릴아민은 US-A-3,180,730에 예시되어 있다. 하나 이상의 비닐 라디칼로 치환되고/되거나 하나 이상의 활성 수소-함유 기를 포함하는 다른 적합한 트리아릴아민은 US-A-3,567,450 및 3,658,520에 개시되어 있다.

방향족 3급 아민의 더 바람직한 부류는 US-A-4,720,432 및 5,061,569에 기재된 바와 같이 둘 이상의 방향족 3급

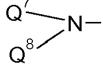
아민 잔기를 포함하는 것들이다. 이러한 화합물은 화학식  $\text{Q}^1\text{G}-\text{Q}^2$  (A) (상기 식에서,  $\text{Q}^1$  및  $\text{Q}^2$ 는 독립적으로 선택된 방향족 3급 아민 잔기이고, G는 연결기, 예컨대 탄소 대 탄소 결합의 아릴렌, 시클로알킬렌 또는 알킬렌 기임)로 나타내어지는 화합물을 포함한다. 한 실시양태에서,  $\text{Q}^1$  또는  $\text{Q}^2$  중 하나 이상은 폴리시클릭 융합된 고리 구조, 예를 들어, 나프탈렌을 함유한다. G가 아릴기인 경우, 이는 편리하게는 폐닐렌, 비페닐렌 또는 나프탈렌 잔기이다.

[0332] 화학식 (A)를 만족시키며 두 개의 트리아릴아민 잔기를 함유하는 트리아릴아민의 유용한 부류는 화학식



(B)

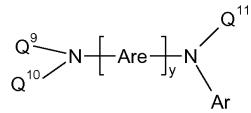
(상기 식에서,  $\text{Q}^3$  및  $\text{Q}^4$ 는 각각 독립적으로 수소 원자, 아릴기 또는 알킬기를 나타내거나 또는  $\text{Q}^3$  및  $\text{Q}^4$ 는 함께 시클로알킬기를 완성시키는 원자를 나타내고,  $\text{Q}^5$  및  $\text{Q}^6$ 은 각각 독립적으로 화학식



(C)

(상기 식에서,  $\text{Q}^7$  및  $\text{Q}^8$ 은 독립적으로 선택된 아릴기임)에 의해 제시되는 바와 같은, 디아릴 치환된 아미노기로 치환된 아릴기를 나타냄)로 나타낸다. 한 실시양태에서,  $\text{Q}^7$  또는  $\text{Q}^8$  중 하나 이상은 폴리시클릭 융합된 고리 구조, 예를 들어, 나프탈렌을 함유한다.

[0333] 방향족 3급 아민의 또 다른 부류는 테트라아릴디아민이다. 원하는 테트라아릴디아민은 아릴렌기를 통해 연결된 두 개의 디아릴아미노기, 예컨대 화학식 I로 나타낸 것을 포함한다. 유용한 테트라아릴디아민은 화학식



(D)로 나타낸 것을 포함하며, 여기서 각각의 Are는 독립적으로 선택된 아릴렌기, 예컨대 폐닐렌 또는 안트라센 잔기이고, y는 1 내지 4의 정수이고, Ar,  $\text{Q}^9$ ,  $\text{Q}^{10}$  및  $\text{Q}^{11}$ 은 독립적으로 선택된 아릴기이다. 전형적 실시양태에서, Ar,  $\text{Q}^9$ ,  $\text{Q}^{10}$  및  $\text{Q}^{11}$  중 하나 이상은 폴리시클릭 융합된 고리 구조, 예를 들어, 나프탈렌이다. 상기 화학식 (A), (B), (C), (D)의 다양한 알킬, 알킬렌, 아릴 및 아릴렌 잔기는 각각 이후 치환될 수 있다. 전형적 치환기는 알킬기, 알콕시기, 아릴기, 아릴옥시기 및 할로겐 예컨대 플루오라이드, 클로라이드 및 브로마이드를 포함한다. 다양한 알킬 및 알킬렌 잔기는 전형적으로는 약 1 내지 6개의 탄소 원자를 함유한다. 시클로알킬 잔기는 3 내지 약 10개의 탄소 원자를 함유할 수 있지만, 전형적으로는 5, 6 또는 7개의 고리 탄소 원자를 함유한다 (예를 들어 시클로펜틸, 시클로헥실 및 시클로헵틸 고리 구조). 아릴 및 아릴렌 잔기는 통상적으로 폐닐 및 폐닐렌 잔기이다.

[0334] 정공 수송층은 1종의 방향족 3급 아민 화합물 또는 그의 혼합물로 형성될 수 있다. 구체적으로, 트리아릴아민, 예컨대 화학식 (B)를 충족시키는 트리아릴아민을 화학식 (D)로 제시된 바와 같은 테트라아릴디아민과 조합하여 사용할 수 있다. 트리아릴아민을 테트라아릴디아민과 조합하여 사용하는 경우, 테트라아릴디아민은 트리아릴아민과 전자 주입층 및 수송층 사이에 끼워진 층으로서 배치된다. 유용한 방향족 3급 아민의 예는 다음과 같다: 1,1-비스(4-디-p-톨릴아미노페닐)시클로헥산, 1,1-비스(4-디-p-톨릴아미노페닐)-4-페닐시클로헥산, N,N,N',N'-테트라페닐-4,4''-디아미노-1,1':4',1'':4'',1'''-쿼터페닐 비스(4-디메틸아미노-2-메틸페닐)페닐메탄, 1,4-비스[2-[4-[N,N-디(p-톨릴)아미노]페닐]비닐]벤젠 (BDTAPVB), N,N,N',N'-테트라-p-톨릴-4,4'-디아미노비페닐, N,N,N',N'-테트라페닐-4,4'-디아미노비페닐, N,N,N',N'-테트라-1-나프틸-4,4'-디아미노비페닐, N,N,N',N'-테트라-2-나프틸-4,4'-디아미노비페닐, N-페닐카르바졸, 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 ( $\alpha$ -NPD), 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-(2-나프틸)아미노]비페닐 (TNB), 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]p-터페닐, 4,4'-비스[N-(2-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐, 4,4'-비스[N-(3-아세나프테닐)-N-페닐아미노]비페닐, 1,5-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]나프탈렌, 4,4'-비스[N-(9-안트릴)-N-페닐아미노]비페닐, 4,4'-비스[N-(1-안트릴)-N-페닐아미노]-p-터페닐, 4,4'-비스[N-(2-페난트릴)-N-페닐아미노]비페닐, 4,4'-비스[N-(8-플루오르안테닐)-N-페닐아미노]비페닐, 4,4'-비스[N-(2-페닐)-N-페닐아미노]비페닐, 4,4'-비스[N-(2-나프타세닐)-N-페닐아미노]비페닐, 4,4'-비스[N-(2-페닐레닐)-N-페닐아미노]비페닐, 4,4'-비스[N-(1-코로네닐)-N-페닐아미노]비페닐, 2,6-비스(디-p-톨릴아미노)나프탈렌, 2,6-비스[디-(1-나프틸)아미노]나프탈렌, 2,6-비스[N-(1-나프틸)-N-(2-나프틸)아미노]나프탈렌, N,N,N',N'-테트라(2-나프틸)-4,4"-

디아미노-p-터페닐, 4,4'-비스[4-(1-나프틸)-페닐]아미노}비페닐, 2,6-비스[N,N-디(2-나프틸)아미노]불소, 4,4',4'''-트리스[(3-메틸페닐)페닐아미노]트리페닐아민 (MTDATA), 및 4,4'-비스[N-(3-메틸페닐)-N-페닐아미노]비페닐 (TPD). 전도성이 증진되도록 정공 수송층을 사용할 수 있다.  $\alpha$ -NPD 및 TPD는 고유 정공 수송층의 예이다. p-도핑된 정공 수송층의 예는 US6,337,102 또는 DE10058578에 개시된 바와 같이 1:50의 몰비로  $F_4$ -TCNQ로 도핑된 m-MTADATA이다.

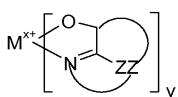
[0335] 또 다른 부류의 유용한 정공 수송 물질에는 EP1009041에 기재된 바와 같은 폴리시클릭 방향족 화합물이 포함된다. 올리고머 물질을 비롯한 둘 초과의 아민기를 갖는 3급 방향족 아민을 사용할 수 있다. 또한, 중합체성 정공 수송 물질, 예컨대 폴리(N-비닐카르바졸) (PVK), 폴리티오펜, 폴리페롤, 폴리아닐린 및 공중합체, 예컨대 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술설네이트) (PEDOT/PSS라고도 지칭됨)를 사용할 수 있다.

[0336] 형광성 발광 물질 및 발광층 (LEL)

[0337] 인광 물질 이외에, 형광 물질을 비롯한 기타 발광 물질을 OLED 장치에서 사용할 수 있다. 화학식 I 및 화학식 III의 화합물은 형광성 발광 물질로서 기능할 수 있다. 용어 "형광"은 통상적으로 임의의 발광 물질을 설명하는데 사용되지만, 이 경우에는 단일항 여기 상태로부터 발광하는 물질을 지칭한다. 형광 물질은 인광 물질과 동일한 층, 인접한 층, 인접한 화소에서, 또는 임의의 조합에서 사용할 수 있다. 인광 물질의 성능에 부정적인 영향을 미칠 물질을 선택하지 않도록 주의해야 한다. 당업자는 인광 물질과 동일한 층 또는 인접한 층에서의 물질의 삼중선 여기 상태 에너지가 원치않는 켄칭을 막을 수 있도록 적절하게 설정되어야 함을 이해할 것이다. US-A-4,769,292 및 5,935,721에 보다 자세히 기재된 바와 같이, 유기 EL 소자의 발광층 (LEL)은 전계 발광이 상기 영역에서 전자-정공 쌍 재조합의 결과로서 생성되는 발광성 형광 또는 인광 물질을 포함한다. 발광층은 단일 물질로 구성될 수 있으나, 보다 일반적으로는 게스트 발광 물질 또는 물질들로 도핑된 호스트 물질로 이루어진다 (여기서 발광은 주로 방출 물질로부터 야기되며 임의의 색상일 수 있음). 발광층의 호스트 물질은 하기 정의되는 바와 같은 전자 수송 물질, 상기 정의된 바와 같은 정공 수송 물질, 또는 정공-전자 재조합을 지지하는 또 다른 물질 또는 물질들의 조합일 수 있다. 형광성 발광 물질은 통상적으로, 호스트 물질의 0.01 내지 10 중량%로 도입된다. 호스트 및 방출 물질은 비-중합체성 소분자 또는 중합체성 물질, 예컨대 폴리플루오렌 및 폴리비닐아릴렌 (예를 들어, 폴리(p-페닐렌비닐렌), PPV)일 수 있다. 중합체의 경우, 소분자 방출 물질이 중합체성 호스트로 분자적으로 분산될 수 있거나 또는 소수 성분을 호스트 중합체로 공중합시킴으로써 방출 물질이 첨가될 수 있다. 막 형성성, 전기적 특성, 발광 효율성, 수명 또는 제조가능성을 개선시키기 위해, 호스트 물질을 함께 혼합할 수 있다. 호스트는 우수한 정공 수송 특성을 갖는 물질 및 우수한 전자 수송 특성을 갖는 물질을 포함할 수 있다.

[0338] 유용한 것으로 공지된 호스트 및 방출 물질에는 US-A-4,768,292, 5,141,671, 5,150,006, 5,151,629, 5,405,709, 5,484,922, 5,593,788, 5,645,948, 5,683,823, 5,755,999, 5,928,802, 5,935,720, 5,935,721 및 6,020,078에 개시된 물질이 포함되나, 이에 제한되지 않는다.

[0339] 8-히드록시퀴놀린 및 유사한 유도체의 금속 치체 (화학식 E)는 전계발광을 지지할 수 있는 유용한 호스트 화합물의 한 부류를 구성하고, 이는 500 nm 초과 파장, 예를 들어 녹색, 황색, 오렌지색 및 적색 광 방출에 대해 특히 적합하다.



[0340]

상기 식에서, M은 금속을 나타내고, v는 1 내지 4의 정수이고, ZZ는 독립적으로 각 경우 둘 이상의 융합된 방향족 고리를 갖는 핵을 완성하는 원자를 나타낸다. 상기로부터, 금속은 1가, 2가, 3가 또는 4가 금속일 수 있음이 명백하다. 금속은, 예를 들어 알칼리 금속, 예컨대 리튬, 나트륨 또는 칼륨, 알칼리 토금속, 예컨대 마그네슘 또는 칼슘, 토금속, 예컨대 알루미늄 또는 갈륨, 또는 전이 금속, 예컨대 아연 또는 지르코늄일 수 있다. 일반적으로, 유용한 퀄레이트화 금속인 것으로 공지된 임의의 1가, 2가, 3가 또는 4가 금속을 사용할 수 있다. ZZ는 둘 이상의 융합된 방향족 고리를 함유하고, 그 중 하나 이상이 아졸 또는 아진 고리인 헤테로시클릭 핵을 완성한다. 필요한 경우, 지방족 및 방향족 고리를 비롯한 추가의 고리를 두 개의 요망되는 고리와 융합시킬 수 있다. 기능상의 개선 없이 문자 벌크를 증가시키는 것을 피하기 위해, 고리 원자의 수는 일반적으로 18 이하로 유지시킨다.

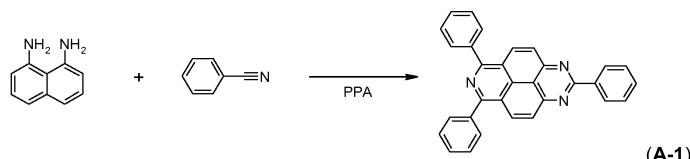
[0342] 유용한 퀄레이트된 옥시노이드 화합물의 예시는 다음과 같다.

- [0343] CO-1: 알루미늄 트리스옥신 [일명, 트리스(8-퀴놀리놀레이토)알루미늄(III)]
- [0344] CO-2: 마그네슘 비스옥신 [일명, 비스(8-퀴놀리놀레이토)마그네슘(II)]
- [0345] CO-3: 비스[벤조{f}-8-퀴놀리놀레이토]아연(II)
- [0346] CO-4: 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이토)알루미늄(III)- $\mu$ -옥소-비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이토)알루미늄(III)
- [0347] CO-5: 인듐 트리스옥신 [일명, 트리스(8-퀴놀리놀레이토)인듐]
- [0348] CO-6: 알루미늄 트리스(5-메틸옥신) [일명, 트리스(5-메틸-8-퀴놀리놀레이토)알루미늄(III)]
- [0349] CO-7: 리튬 옥신 [일명, (8-퀴놀리놀레이토)리튬(I)]
- [0350] CO-8: 갈륨 옥신 [일명, 트리스(8-퀴놀리놀레이토)갈륨(III)]
- [0351] CO-9: 지르코늄 옥신 [일명, 테트라(8-퀴놀리놀레이토)지르코늄(IV)]
- [0352] 유용한 형광 방출 물질은 안트라센, 테트라센, 크산텐, 페릴렌, 루브렌, 쿠마린, 로다민 및 퀴나크리돈의 유도체, 디시아노메틸렌페란 화합물, 티오퍼란 화합물, 폴리메탄 화합물, 페릴롭과 티아페릴롭 화합물, 플루오렌 유도체, 폐리플란텐 유도체, 인데노페릴렌 유도체, 비스(아지닐)아민 붕소 화합물, 비스(아지닐)메탄 화합물 및 카르보스티릴 화합물을 포함하지만 이에 한정되지는 않는다. 유용한 재료의 예는 US7,090,930B2에서 기재된 화합물 L1 내지 L52를 포함하지만 이에 한정되지는 않는다.
- [0353] 전자 수송층 (ETL)
- [0354] 본 발명의 유기 EL 장치의 전자 수송층의 형성에 사용하기 위한 바람직한 박막-형성 물질은 금속 킬레이트된 옥시노이드 화합물, 예컨대 옥신 그 자체의 킬레이트 (또한 8-퀴놀리놀 또는 8-히드록시퀴놀린으로 지칭됨)이다. 이러한 화합물은 전자의 주입 및 수송을 돋고, 두 경우에서 높은 성능 수준을 나타내며, 박막의 형성에서 용이하게 제작된다. 고려되는 옥시노이드 화합물의 예는 상기 기재된 화학식 (E)를 충족시키는 화합물이다. 기타 전자 수송 물질에는 US4,356,429에 개시된 바와 같은 다양한 부타디엔 유도체, 및 US4,539,507에 기재된 바와 같은 다양한 헤테로시클릭 형광 중백제가 포함된다. 화학식 (G)를 충족시키는 벤즈아졸 또한 유용한 전자 수송 물질이다. 트리아진이 또한 전자 수송 물질로서 유용한 것으로 공지되어 있다. 도핑을 사용하여 전도성을 증진시킬 수 있다. Alq<sub>3</sub>은 고유 전자 수송층의 예이다. n-도핑된 전자 수송층의 예는 US 6,337,102에 개시된 바와 같이 1:1의 몰비로 Li로 도핑된 BPhen이다.
- [0355] 유기층의 침착
- [0356] 상기 언급된 유기 물질은 유기 물질의 형태에 적합한 임의의 방식으로 적합하게 침착된다. 소분자의 경우, 열증발을 통해 편리하게 침착되나, 다른 방식으로, 예컨대 임의적 결합제와 함께 용매로부터 침착시켜 막형성성을 개선시킬 수 있다. 물질이 가용성이거나 올리고머/중합체 형태인 경우, 스판-코팅, 잉크젯 프린팅과 같은 용액 공정이 일반적으로 바람직하다. 덴드리머 치환기를 사용함으로써 소분자가 용액 공정을 견디는 능력을 증진시킬 수 있다. 패턴화된 침착은 샐도우 마스크, 집적 샐도우 마스크 (US5,294,870), 공여 시트로부터의 공간적으로 한정된 열 염료 이동 (US5,688,551, 5,851,709 및 6,066,357) 및 잉크젯 방법 (US6,066,357)을 이용하여 달성할 수 있다.
- [0357] 캡슐화
- [0358] 대부분의 OLED 장치는 수분 또는 산소 또는 둘 다에 민감하므로, 이들은 통상적으로 질소 또는 아르곤과 같은 불활성 분위기 하에, 알루미나, 보크사이트, 황산칼슘, 점토, 실리카겔, 제올라이트, 알칼리 금속 산화물, 알칼리 토금속 산화물, 술페이트 또는 금속 할라이드 및 퍼클로레이트와 같은 건조제와 함께 밀봉한다. 캡슐화 및 건조화 방법에는 US6,226,890에 기재된 방법이 포함되나 이에 제한되지 않는다. 또한, SiO<sub>x</sub>, 텐YLON 및 교대배열된 무기/중합체 층과 같은 장벽층이 캡슐화용으로 당업계에 공지되어 있다.
- [0359] 본 발명의 실시양태에 따라 제작된 장치는 평판 디스플레이, 컴퓨터 모니터, 텔레비전, 게시판, 내부 또는 외부 조명 및/또는 신호용 라이트, 완전히 투명한 디스플레이, 플렉서블 디스플레이, 레이저 프린터, 휴대전화, 개인용 휴대정보 단말기 (PDA), 램프 컴퓨터, 디지털 카메라, 캠코더, 뷰파인더, 마이크로-디스플레이, 차량, 극장 또는 스타디움 스크린 또는 간판을 비롯한 광범위한 소비 제품에 도입될 수 있다. 다양한 제어 메카니즘을 사용하여 수동 매트릭스 및 능동 매트릭스를 비롯한 본 발명에 따라 제작된 장치를 제어할 수 있다.

[0360] 본 발명의 각종 특성 및 측면이 하기 실시예에 추가로 예시되어 있다. 이들 실시예는 본 발명의 범주 내에서 어떻게 작업되는지를 당업자에게 보여주기 위해 제시된 것으로서, 본 발명의 범주를 제한하기 위한 것이 아니며, 본 발명의 범주는 청구의 범위로만 한정된다. 하기 실시예 및 명세서와 청구의 범위의 도처에서 달리 언급되지 않는 한, 모든 부 및 백분율은 중량 기준이며, 온도는 섭씨이고, 압력은 대기압 또는 대기압 부근이다.

[0361] 실시예

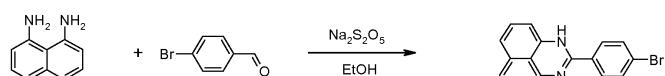
[0362] 실시예 1



[0363]

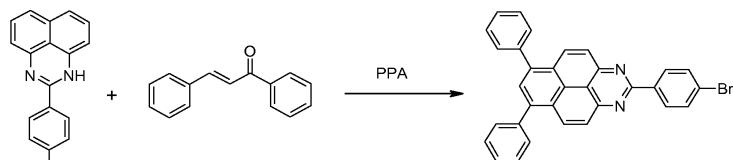
[0364] 생성물을 문헌 [Chemistry of Heterocyclic Compounds 43 (2007) 665]에 따라 제조하였다: 5.00 g (31.6 mmol) 나프탈렌-1,8-디아민 및 16.3 g (158 mmol) 벤조니트릴에 50 g 폴리 인산을 첨가하였다. 반응 혼합물을 질소 하에서 18 시간 동안 180°C에서 가열하였다. 가열조를 제거하고, 50 ml 에탄올을 첨가하였다. 반응 혼합물을 물에 붓고, 암모니아 수용액으로 중화시켰다. 생성물을 여과하고, 물 및 물/에탄올 1/1로 세척하였다. 생성물을 톨루엔 중에 용해시키고, 실리카겔 상에서 여과하였다. 용매를 진공에서 제거하고, 생성물을 에틸 아세테이트로 속슬랫 추출하였다 (수율: 1.26 g (9.2 %)). 용점: 295.0 – 296.0°C.

[0365] 실시예 2



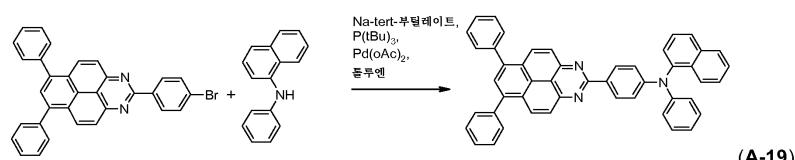
[0366]

[0367] a) 10.0 g (63.2 mmol) 나프탈렌-1,8-디아민, 12.9 g (69.5 mmol) 4-브로모-벤즈알데히드 및 13.2 g (69.5 mmol) 나트륨 디술파이트를 150 ml 에탄올에 용해시켰다. 반응 혼합물을 3 시간 동안 질소 하에 환류시키고, 25°C로 냉각시켰다. 생성물을 여과하고, 물 및 에탄올로 세척하였다 (수율: 14.4 g (71 %)).



[0368]

[0369] b) 실시예 2a의 생성물의 1.00 g (3.09 mmol), 및 0.710 g (3.40 mmol) (E)-1,3-디페닐-프로페논을 10 g 폴리 인산 및 5 ml 톨루엔의 혼합물에 첨가하였다. 반응 혼합물을 6 시간 동안 90 °C에서 질소 하에서 교반하였다. 20 ml 에탄올 및 30 ml 물을 첨가하였다. 혼탁액을 물에 부었다. 수상을 암모니아 수용액으로 중화시켰다. 생성물을 여과하고, 물, 에탄올 및 다시 물로 세척하였다 (수율: 0.66 g (42 %)).

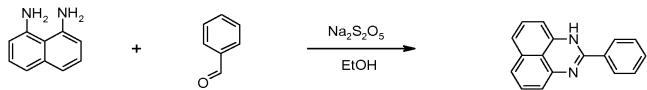


[0370]

[0371] c) 실시예 2b의 생성물의 3.00 g (5.86 mmol), 1.41 g (6.45 mmol) 나프탈렌-1-일-페닐-아민 및 620 mg (6.45 mmol) 나트륨 tert-부틸레이트를 80 ml 톨루엔 중에 용해시켰다. 반응 혼합물을 아르곤으로 탈기시켰다. 66 mg (0.29 mmol) 팔라듐 (II) 아세테이트를 첨가하였다. 반응 혼합물을 아르곤으로 탈기시켰다. 119 mg (0.59 mmol) 트리-tert-부틸-포스판을 첨가하였다. 반응 혼합물을 아르곤으로 탈기시키고, 3 시간 동안 90 °C에서 아르곤 하에 교반한 후, 25 °C로 냉각시키고, 1 % 시안화나트륨 수용액으로 세척하였다. 유기상을 분리하고, 용매를 제거하였다. 실리카겔 상에서 톨루엔/헥산 3/7로 컬럼 크로마토그래피하여 생성물을 수득하였다 (수율: 870 mg (23 %)). 용점: 309.5 °C.

[0372]

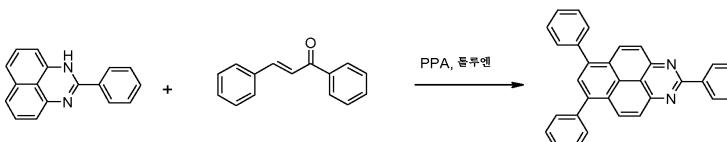
## 실시예 3



[0373]

[0374]

a) 50 ml 에탄올을 3.60 g (22.8 mmol) 나프탈렌-1,8-디아민, 2.66 g (25.0 mmol) 벤즈알데히드 및 4.76 g (25.0 mmol) 나트륨 디술파이트에 첨가하였다. 반응 혼합물을 2.5 시간 동안 환류시켰다. 생성물을 여과하고, 에탄올 및 물로 세척하였다 (수율: 89 %).



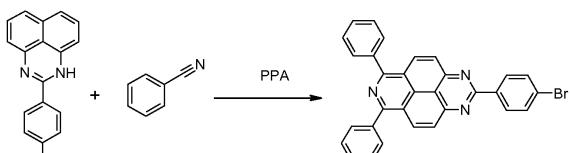
[0375]

[0376]

b) 20 g 폴리인산 및 10 ml 톨루エン을 실시예 1a의 생성물의 2.00 g (8.19 mmol), 및 1.88 g (9.01 mmol) (E)-1,3-디페닐-프로페논에 첨가하였다. 반응 혼합물을 80°C에서 질소 하에서 18 시간 동안 교반하였다. 가열조를 제거하고, 60 ml 물을 첨가하였다. 혼탁액을 물에 부었다. 수상을 암모니아 수용액으로 중화시켰다. 생성물을 여과하고, 에탄올 및 에틸 아세테이트로 속슬렛 추출하였다 (수율: 1.10 g (31 %)). 용점: 273.0 – 274.5 °C

[0377]

## 실시예 4



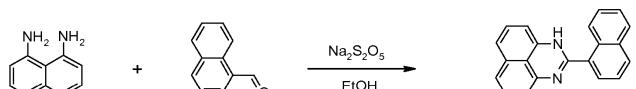
[0378]

[0379]

20 g 폴리인산을 실시예 2a의 생성물의 2.00 g (6.19 mmol), 및 2.55 g (24.8 mmol) 벤조니트릴에 첨가하였다. 반응 혼합물을 180°C에서 질소 하에서 17 시간 동안 가열하였다. 가열조를 제거하고, 20 ml 에탄올 및 30 ml 물을 첨가하였다. 혼탁액을 물에 붓고, 수상을 암모니아 수용액으로 중화시켰다. 생성물을 여과하고, 물, 에탄올 및 다시 물로 세척하고, 에틸 아세테이트로 속슬렛 추출하였다 (수율: 1.83 g (58 %)).

[0380]

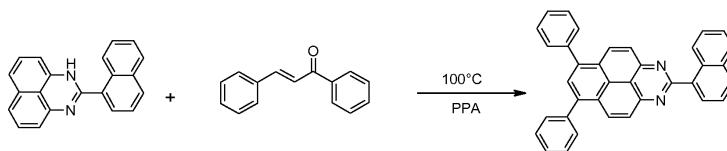
## 실시예 5



[0381]

[0382]

a) 100 ml 에탄올을 20.0 g (126 mmol) 나프탈렌-1,8-디아민, 21.7 g (139 mmol) 나프탈렌-1-카르브알데히드 및 26.4 g (139 mmol) 나트륨 디술파이트에 첨가하였다. 반응 혼합물을 6 시간 동안 질소 하에서 환류하였다. 생성물을 여과하고, 에탄올 및 물로 세척하였다 (수율: 25.6 g (69 %)). 생성물을 추가 정제없이 다음 반응 단계에서 사용하였다.



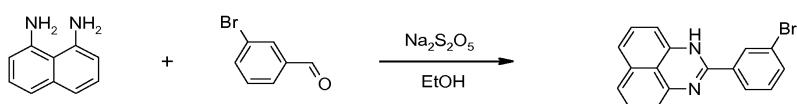
[0383]

[0384]

b) 실시예 5a의 생성물의 2 g (6.79 mmol), 1.56 g (7.47 mmol) (E)-1,3-디페닐-프로페논을 20 g 폴리인산 및 3 ml 톨루エン의 혼합물에 첨가하였다. 반응 혼합물을 100°C에서 57 시간 동안 가열하고, 물에 부었다. 수상을 암모니아 수용액으로 중화시켰다. 생성물을 여과하고, 물 및 에탄올로 세척하고, 에틸 아세테이트로 2 회 데콕트(decoct)시키고, 에틸 아세테이트로 속슬렛 추출하고, 실리카겔 상에서 톨루엔으로 여과하고, 디에틸 에테르로 데콕트시켰다 (수율: 830 mg (25 %)). 용점: 260–261 °C.

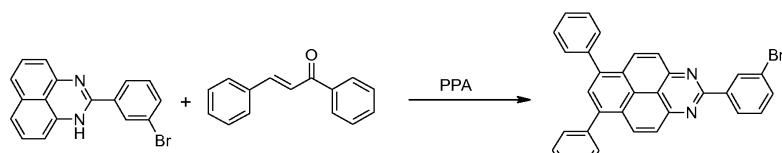
[0385]

실시예 6



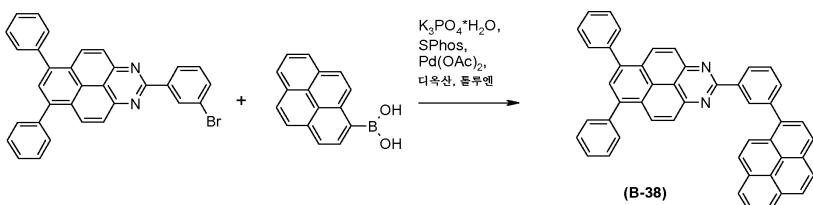
[0386]

a) 300 ml 에탄올을 9.00 g (56.9 mmol) 나프탈렌-1,8-디아민, 11.6 g (62.6 mmol) 3-브로모-벤즈알데히드 및 11.9 g (62.6 mmol) 나트륨 디술파이트에 첨가하였다. 반응 혼합물을 14 시간 동안 질소 하에서 환류시키고, 고온 여과하였다. 고체를 에탄올로 세척하였다. 에탄올상을 수거하였다. 에탄올을 부분적으로 중류 제거하고, 에탄올 용액을 물에 부었다. 생성물을 여과하고, 물로 세척하였다. 생성물을 추가 정제없이 다음 반응 단계에서 사용하였다 (수율: 17.0 g (93 %)).



[0388]

b) 실시예 6a의 생성물의 5 g (15.5 mmol), 3.54 g (17.0 mmol) (E)-1,3-디페닐-프로페논을 50 g 폴리인산 및 2 ml 톨루엔의 혼합물에 첨가하였다. 반응 혼합물을 100 °C에서 22 시간 동안 질소 하에서 가열하고, 물에 부었다. 수상을 암모니아 수용액으로 중화시켰다. 생성물을 여과하고, 물 및 에탄올로 세척하고, 에탄올로 데콕트시켰다. 수율 3.82 g (48 %).

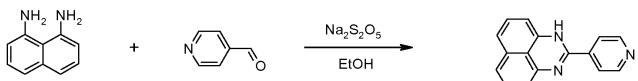


[0390]

c) 실시예 6b의 생성물의 2.00 g (39.1 mmol), 1.15 g (4.69 mmol) 1-페렌보론산 및 2.84 g (11.7 mmol) 인산 칼륨 삼염기성 일수화물을 아르곤으로 탈기시켰다. 10 ml 1,4-디옥산, 40 ml 톨루엔 및 8 ml 물을 첨가하였다. 반응 혼합물을 아르곤으로 탈기시켰다. 96 mg (0.24 mmol) 2-디시클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시비페닐 (Sphos) 및 8.8 mg (0.039 mmol) 팔라듐 (II) 아세테이트를 첨가하고, 반응 혼합물을 아르곤 하에서 4 시간 동안 가열하였다. 용매를 중류 제거하고, 생성물을 여과하고, 물 및 에탄올로 세척하였다. 실리카겔 상에서 톨루엔/시클로헥산 7/3으로 컬럼 크로마토그래피하여 생성물을 수득하였고, 이를 디에틸 에테르로 데콕트시켰다 (수율: 820 mg (33 %)). 융점: 240 °C.

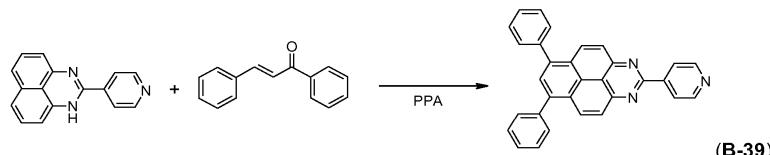
[0392]

실시예 7



[0393]

a) 50 ml 에탄올을 5.00 g (31.6 mmol) 나프탈렌-1,8-디아민, 3.72 g (34.8 mmol) 피리딘-4-카르브알데히드 및 6.61 g (34.8 mmol) 나트륨 디술파이트에 첨가하였다. 반응 혼합물을 17 시간 동안 질소 하에서 환류시키고, 고온 여과하였다. 고체를 에탄올로 세척하였다. 에탄올상을 수거하였다. 에탄올을 부분적으로 중류 제거하고, 에탄올 용액을 물에 부었다. 생성물을 여과하고, 물로 세척하고, 정제없이 다음 반응 단계에서 사용하였다 (수율: 7.33 g (95 %)).

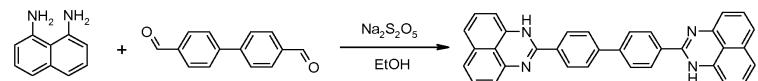


[0395]

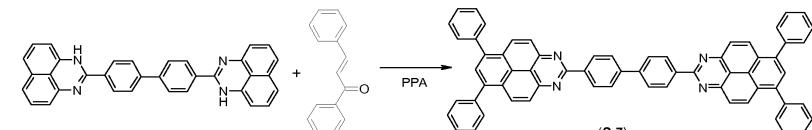
b) 실시예 8a의 생성물의 5 g (20.4 mmol), 4.67 g (22.4 mmol) (E)-1,3-디페닐-프로페논을 50 g 폴리인산 및

3 ml 툴루엔의 혼합물에 첨가하였다. 반응 혼합물을 100 °C로 26 시간 동안 질소 하에서 가열하고, 물에 부었다. 수상을 암모니아 수용액으로 중화시켰다. 생성물을 여과하고, 물, 에탄올 및 다시 물로 세척하였다. 실리카겔 상에서 툴루엔/에틸 아세테이트로 컬럼 크로마토그래피하여 생성물을 수득하였고, 이를 디에틸에테르로 속슬렛 추출하였다 (수율: 2.00 g (23 %)). 용점 280-284 °C.

[0397] 실시예 8



[0398] [0399] a) 80 ml 에탄올 중 5.00 g (31.6 mmol) 나프탈렌-1,8-디아민, 24.0 g (126 mmol) 나트륨 디술파이트 및 2.99 g (14.2 mmol) 비페닐-4,4'-디카르보알데히드의 혼합물을 22 시간 동안 질소 하에서 환류시켰다. 반응 혼합물을 25 °C로 냉각시키고, 생성물을 여과하고, 물 및 에탄올로 세척하고, 추가 정제없이 다음 반응 단계에서 사용하였다 (수율: 6.90 g (100 %)).



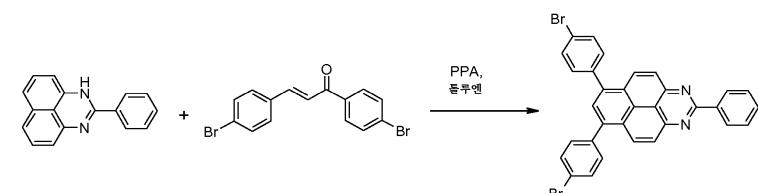
[0400]

[0401] b) 실시예 9a의 생성물의 1.50 g (3.08 mmol), 2.89 g (13.9 mmol) (E)-1,3-디페닐-프로페논을 20 g 폴리인산 및 5 ml 툴루엔의 혼합물에 첨가하였다. 반응 혼합물을 100 °C로 94 시간 동안 질소 하에서 가열하고, 물에 부었다. 수상을 암모니아 수용액으로 중화시켰다. 생성물을 여과하고, 물, 에탄올 및 다시 물로 세척하고, 부탄-2-온으로 데콕트시켰다. 실리카겔 상에서 툴루엔/에틸 아세테이트 100/1로 컬럼 크로마토그래피하여 생성물을 수득하였다 (수율: 230 mg (9 %)).

<sup>1</sup>H NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 8.94 (d, J = 8.4 Hz, 4H), 8.66 (d, J = 9.4 Hz, 4H), 8.31 (d, J = 9.4 Hz, 4H), 8.08 (s, 2H), 7.92 (d, 8.5 Hz, 4H), 7.48-7.65 ppm (m, 20H).

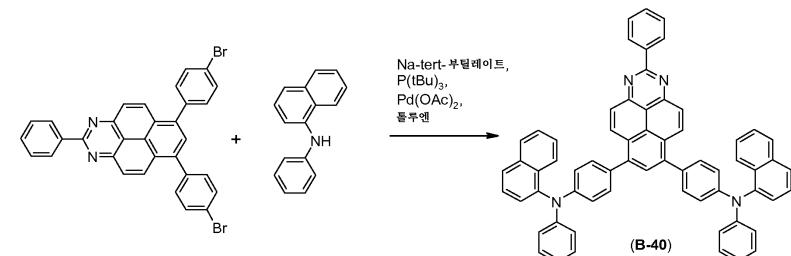
[0402]

[0403] 실시예 9



[0404]

[0405] a) 실시예 3a의 생성물의 3.50 g (14.3 mmol), 및 6.29 g (17.2 mmol) (E)-1,3-디페닐-프로페논을 35 g 폴리인산 및 5 ml 툴루엔의 혼합물에 첨가하였다. 반응 혼합물을 100 °C에서 45 시간 동안 질소 하에서 가열하고 물에 부었다. 수상을 암모니아 수용액으로 중화시켰다. 생성물을 여과하고, 물, 에탄올 및 다시 물로 세척하고, 클로로포름으로 속슬렛 추출하였다. 디에틸에테르를 클로로포름층에 첨가하고, 생성물을 여과해냈다 (수율: 2.75 g (33 %)).



[0406]

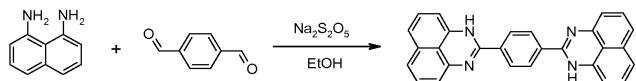
[0407] b) 실시예 9a의 생성물의 2.00 g (3.39 mmol), 1.63 g (7.45 mmol) 나프탈렌-1-일-페닐-아민 및 980 mg (10.2 mmol) 나트륨 tert-부틸레이트를 50 ml 툴루엔 중에 용해시켰다. 반응 혼합물을 아르곤으로 탈기시켰다. 38 mg (0.17 mmol) 팔라듐 (II) 아세테이트를 첨가하였다. 반응 혼합물을 아르곤으로 탈기시켰다. 69 mg (0.34

mmol) 트리-tert-부틸-포스판을 첨가하였다. 반응 혼합물을 아르곤으로 탈기시키고, 28 시간 동안 100 °C에서 아르곤 하에서 교반하였다. 생성물을 여과하고, 톨루엔, 에탄올, 물 및 다시 에탄올로 세척하였다 (수율: 2.65 g (90 %)).

<sup>1</sup>H NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 8.84 (d, J= 6.7 Hz, 2H), 8.78 (d, J= 9.4 Hz, 2H), 8.27 (d, J= .3 Hz, 2H), 8.12 (s, 1H), 8.07 (d, J= 8.4 Hz, 2H), 7.96 (d, J=7.9 Hz, 2H), 7.86 (d, J= 8.1 Hz, 2H), 7.44-7.68 (m, 15H), 6.90-7.37 ppm (m, 16H).

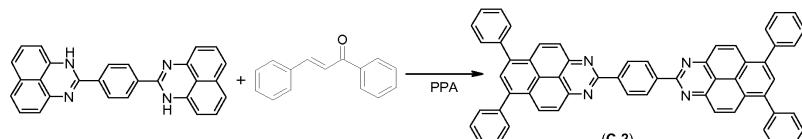
[0408]

실시예 10



[0410]

a) 120 ml 에탄올 중 10.0 g (63.2 mmol) 나프탈렌-1,8-디아민, 361 g (190 mmol) 나트륨 디슬파이트 및 3.82g (28.5 mmol) 벤젠-1,4-디카르보알데히드의 혼합물을 22 시간 동안 질소 하에서 환류시켰다. 반응 혼합물을 25 °C로 냉각시키고, 생성물을 여과하고, 에탄올, 물 및 에탄올로 세척하였다. 에탄올로 속슬랫 추출하여 생성물을 수득하였다 (수율 6.90 g (100 %)).



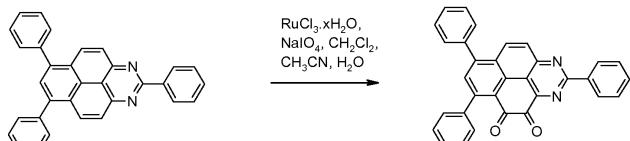
[0412]

b) 실시예 9a의 생성물의 5.70 g (13.9 mmol), 및 13.0 g (62.5 mmol) (E)-1,3-디페닐-프로페논을 60 g 폴리인산 및 5 ml 톨루엔의 혼합물을 첨가하였다. 반응 혼합물을 100 °C에서 47 시간 동안 질소 하에서 가열하고 물에 부었다. 생성물을 여과하고, 물 및 에탄올로 세척하였다. 물 중 생성물의 혼탁액을 암모니아 수용액으로 중화시켰다. 생성물을 여과하고, 물, 에탄올 및 다시 물로 세척하고, 부탄-2-온으로 데콕트시켰다. 실리카겔상에서 톨루엔/에틸 아세테이트 100/1로 컬럼 크로마토그래피하여 생성물을 수득하였다 (수율: 230 mg (8%)).

<sup>1</sup>H NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 9.10 (s, 4H), 8.72 (d, 2H, J= 9.5 Hz, 4H), 8.34 (d, J= 9.5 Hz, 4H), 8.15 (s, 2H), 7.53-7.78 ppm (m, 24H).

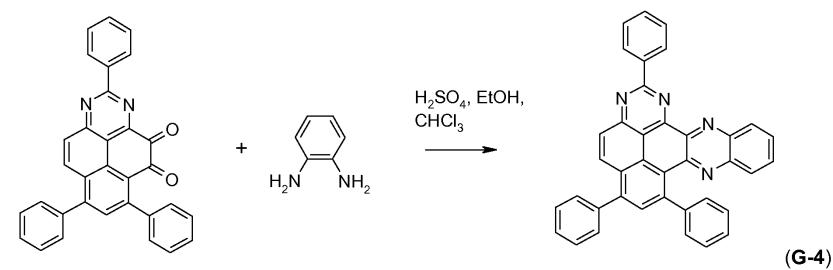
[0414]

실시예 11



[0416]

a) 50 ml 디클로로메탄, 50 ml 아세토니트릴 및 60 ml 물 중 실시예 3b의 생성물의 5.00 g (11.6 mmol), 550 mg (2.66 mmol) 루테늄(III)-클로라이드 수화물 (~41% Ru), 20.3 g (94.9 mmol) 나트륨 페리오도레이트의 혼합물을 60 °C에서 15 시간 동안 질소 하에서 교반하였다. 반응 혼합물을 물에 부었다. 생성물을 여과하고, 물 및 에탄올로 세척하고, 하이플로상에서 클로로포름으로 여과하고, 추가 정제없이 다음 반응 단계에서 사용하였다 (수율 2.70 g (48 %)).



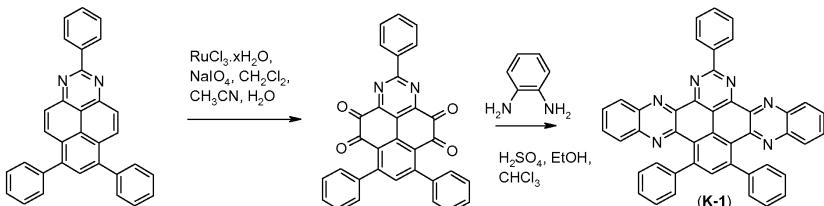
[0418]

b) 실시예 11a의 생성물의 2.70 g (5.48 mmol), 및 1.42 g (13.2 mmol) 벤젠-1,2-디아민을 15 ml 클로로포름

및 30 ml 에탄올 중에 용해시켰다. 5 방울의 황산 (97%)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 16 시간 동안 환류시키고, 25 °C로 냉각시켰다. 생성물을 여과하고, 에탄올, 물 및 다시 에탄올로 세척하였다. 실리카겔 상에서 디클로로메탄으로 컬럼 크로마토그래피하여 생성물을 10 % 수율로 수득하였다.

[0420] **<sup>1</sup>H NMR** (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 8.63-8.67 (m, 2H), 8.42 (d, J = 9.4 Hz, 1H), 8.05 (d, J = 9.4 Hz, 1H), 7.77 (s, 1H), 7.42-7.60 ppm (m, 17H).

## [0421] 실시예 12

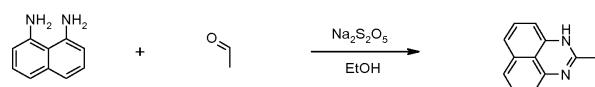


[0422]

[0423] 제1 반응 단계에서 더 많은 산화제 및 더 긴 반응 시간을 이용한 것을 제외하고는 실시예 11을 반복하였다.

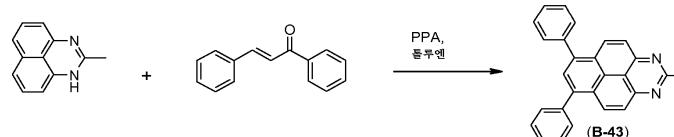
[0424] **<sup>1</sup>H NMR** (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 9.13 (d, J = 6.9 Hz, 2H), 8.53 (d, J = 8.4 Hz, 2H), 8.03 (s, 1H), 7.84 (dd, J = 8.4 Hz, J = 1.4 Hz, 2H), 7.76 (dd, J = 8.4 Hz, J = 1.3 Hz, 2H), 7.72 – 7.43 (m, 13H), 7.35 ppm (d, J = 8.6 Hz, 2H).

## [0425] 실시예 13



[0426]

[0427] a) 100 ml 에탄올을 10.0 g (63.2 mmol) 나프탈렌-1,8-디아민, 3.34 g (75.9 mmol) 아세트알데히드 및 24.0 g (126 mmol) 나트륨 디솔파이트에 첨가하였다. 반응 혼합물을 4 시간 동안 40 °C (오일조)에서 질소 하에서 교반하고, 물에 부었다. 수상을 디클로로메탄으로 추출하였다. 유기상을 황산마그네슘으로 건조시키고, 용매를 진공에서 제거하였다 (수율: 6.55 g (57 %)).

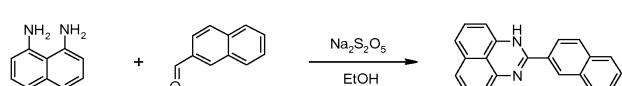


[0428]

[0429] b) 실시예 13a의 생성물의 4.00 g (22.0 mmol), 5.03 g (24.2 mmol) (E)-1,3-디페닐-프로페논을 40 g 폴리인산 (PPA) 및 3 ml 톨루엔의 혼합물에 첨가하였다. 반응 혼합물을 100 °C로 31 시간 동안 질소 하에서 가열하고, 물에 부었다. 생성물을 여과하고, 물, 에탄올 및 다시 물로 세척하였다. 물 중 생성물의 혼탁액을 암모니아 수용액으로 중화시켰다. 생성물을 여과하고, 에탄올로 세척하였다 (수율: 2.12 g (26 %)).

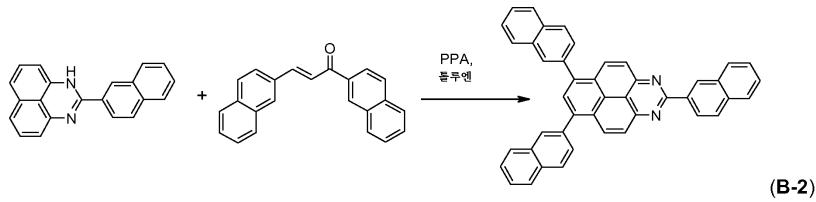
[0430] **<sup>1</sup>H NMR** (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 8.70 (d, J = 9.4 Hz, 2H), 8.18 (d, J = 9.4 Hz, 2H), 8.15 (s, 1H), 7.52 – 7.71 (m, 10H), 3.20 (s, 3H).

## [0431] 실시예 14



[0432]

[0433] a) 100 ml 에탄올을 7.00 g (44.3 mmol) 나프탈렌-1,8-디아민, 7.60 g (48.7 mmol) 나프탈렌-2-카르브알데히드 및 9.25 g (48.7 mmol) 나트륨 디솔파이트에 첨가하였다. 반응물을 17 시간 동안 질소 하에서 환류시켰다. 생성물을 여과하고, 에탄올 및 물로 세척하였다 (수율: 7.27 g (56 %)). 생성물을 정제없이 다음 반응 단계에서 사용하였다.

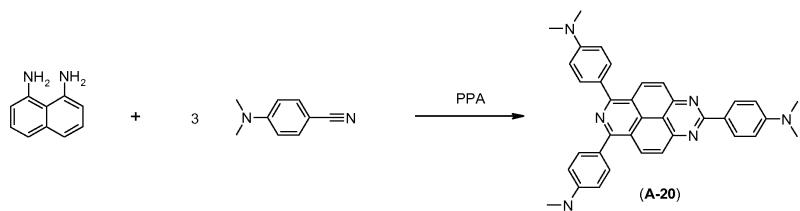


[0434]

[0435] b) 실시예 14a의 생성물의 5 g (17.0 mmol), 6.29 g (20.4 mmol) (E)-1,3-디-나프탈렌-2-일-프로페논을 50 g 폴리인산 및 2 ml 톨루엔의 혼합물에 첨가하였다. 반응 혼합물을 100 °C로 28 시간 동안 질소 하에서 가열하고, 물에 부었다. 수상을 암모니아 수용액으로 중화시켰다. 생성물을 여과하고, 물, 에탄올 및 다시 물로 세척하였다. 에틸 아세테이트 및 물과 톨루엔으로 속슬렛 추출하여 생성물을 수득하였고, 이를 에틸 아세테이트로 데콕트시켰다 (수율: 2.16 g (22 %)). 용점: 267-270 °C.

[0436]

실시예 15



[0437]

[0438] 2.94 g (18 mmol) 나프탈렌-1,8-디아민 및 9.40 g (63 mmol) 4-(디메틸아미노)-벤조니트릴을, 83%의 오산화인을 함유하는 100 g의 폴리인산으로 교반하며 첨가했다. 반응 혼합물을 180°C까지 가열하고, 이 온도에서 3 시간 동안 유지시켰다. 90°C로 냉각시킨 후, 반응 고체를 2.5 l의 열음/물 혼합물에 붓고, 격렬히 3 시간 동안 교반하였다. 침전물을 여과하고, 200 ml의 물 중에 슬러리화시키고, 혼탁액을 회석된 수성 수산화나트륨으로 pH 7까지 중화시키고, 2 시간 동안 교반하고, 여과하였다. 프레스케이크를 50°C에서 15 시간 동안 감압에서 건조시켰다. 잘 분쇄된 분말을 150 ml의 에틸 아세테이트로 5 시간 동안 속슬렛 추출하였다. 추출물을 약간의 감압에서 회전증발기 상에서 60 ml의 부피로 농축시키고, 실온에 18 시간 동안 두었다. 생성물을 여과에 의해 단리시키고, 다시 300 ml의 비등하는 에틸 아세테이트 중에 용해시키고, 회전증발기 상에서 약간의 감압에서 30 ml의 부피로 농축시키고, 실온에서 24 시간 동안 두었다. 최종 생성물을 여과에 의해 단리하였다 (수율: 0.39 g (4%)).

[0439]

원소 조성: 76.28 % C 5.95 % H 13.50 % N

[0440]

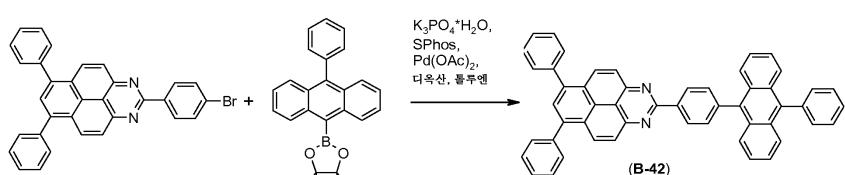
C<sub>37</sub>H<sub>34</sub>N<sub>6</sub> x H<sub>2</sub>O에 대한 계산치: 76.53 % C 6.25 % H 14.47 % N

[0441]

C<sub>37</sub>H<sub>34</sub>N<sub>6</sub>에 대한 계산치: 78.98 % C 6.09 % H 14.93 % N

[0442]

실시예 16



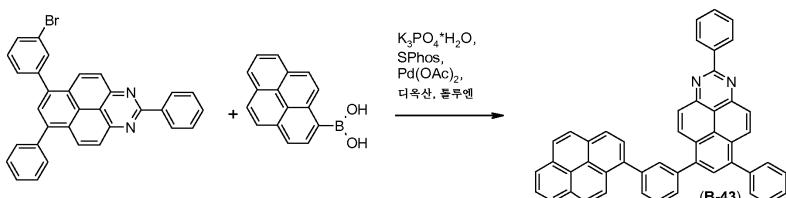
[0443]

[0444] 실시예 2b의 생성물의 3.00 g (5.87 mmol), 2.12 g (5.57 mmol) 4,4,5,5-테트라메틸-2-(10-페닐-안트라센-9-일)-1,3,2-디옥사보를란 및 2.84 g (11.7 mmol) 인산칼륨 삼염기성 일수화물을 아르곤으로 탈기시켰다. 200 ml 1,4-디옥산, 50 ml 톨루엔 및 10 ml 물을 첨가하였다. 반응 혼합물을 아르곤으로 탈기시켰다. 145 mg (0.35 mmol) 2-디시클로헥실포스파노-2',6'-디메톡시비페닐 (Sphos) 및 13 mg (0.059 mmol) 팔라듐(II)아세테이트를 첨가하였다. 반응 혼합물을 아르곤으로 탈기시키고, 아르곤 하에서 100 °C에서 4 시간 동안 가열하였다. 후처리를 실시예 6c와 유사하게 수행하였다 (수율: 1.47 g (17 %)).

**<sup>1</sup>H NMR** (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ = 9.06 (d, J = 8.3 Hz, 2H), 8.76 (d, J = 9.4 Hz, 2H), 8.37 (d, J = 9.4 Hz, 2H), 8.19 (s, 1H), 7.52 – 7.90 (m, 21H), 7.34 – 7.40 (m, 4H).

[0445]

실시예 17



[0447]

생성물을 실시예 6c와 유사하게 제조하였다.

**<sup>1</sup>H NMR** (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>, δ): 8.92 (d, J = 9.4 Hz, 2H), 8.87 (d, J = 8.4 Hz, 2H), 7.71 (d, J = 9.4 Hz, 2H), 7.48 – 7.40 (m, 22H).

[0449]

## 적용 실시예 1

[0451]

고 진공 ( $<10^{-6}$  mbar)에서 열증착에 의해 장치를 제작하였다. 애노드는 유리 기판 상에 미리 증착된 약 120 nm의 인듐 주석 옥시드 (ITO)로 이루어졌다. 캐소드는 1 nm의 LiF 이후 100 nm의 Al로 이루어졌다. 모든 장치를, 캡슐화 없이, 글로브 박스의 질소 분위기 하 ( $<1$  ppm의 H<sub>2</sub>O 및 O<sub>2</sub>)에서 제조 직후 시험하였다.

[0452]

유기 스택은, ITO 표면으로부터, 순차적으로, 정공 주입층 (HIL)으로서의 60 nm의 2-TNATA ( $4,4',4''$ -트리스(N-(나프타-2-일)-N-페닐-아미노)트리페닐아민), 정공 수송층으로서의 30 nm의  $4,4'$ -비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 ( $\alpha$ -NPD), 방출층으로서의 30 nm의 알루미늄(III) 비스(2-메틸-8-히드록시퀴놀리네이토)-4-페닐페놀레이트 (BaIQ) (10%의 적색 방출체, 비스(1-페닐이소퀴놀린) (아세틸아세토네이트)이리듐(III)으로도 광됨)으로 이루어졌다. 전자 수송층 (ETL)의 조성을 하기 표에 나타내었다.

[0453]

장치 1-1, 1-2 및 1-3에 대하여 측정된 개시 전압과 발광 효율 ( $@1000 \text{ cd/m}^2$ ) 및 최대 휘도를 하기 표에 나타내었다.

	ETL	<u>C.Eff@1000</u> cd/m <sup>2</sup>	<u>P.Eff@1000</u> cd/m <sup>2</sup>	V@1000 cd/m <sup>2</sup>	최대 화도(cd/m <sup>2</sup> )
1-1	실시에 1 의 화합물 (10 nm) / AlQ <sub>3</sub> (30 nm)	5.4	1.6	10.4	8200
1-2	TPBI (10 nm) / 실시에 1 의 화합물 (30 nm)	6.3	1.5	13.4	1100
1-3	실시에 6 의 화합물 (30 nm)	7.6	2.3	10.3	6000

三九三九

E04563

Balq 대신에 실시예 2의 화합물을 호스트로서 사용하고, 전자 수송층의 조성 (하기 표에 나타냄)이 상이하다는 점을 확인하고자 했던 실험에 대해 드리겠습니다.

장치 2-1 및 2-2에 대처한 층집된 개시 절차고 반과 흐름 ( $\text{@}1000 \text{ cd/m}^2$ ) 및 치과 회의를 찾기 표에 나타내었다.

	<b>ETL</b>	<b>C.Eff@1000</b> cd/m <sup>2</sup>	<b>P.Eff@1000</b> cd/m <sup>2</sup>	<b>V@1000</b> cd/m <sup>2</sup>	<b>최대 워도(cd/m<sup>2</sup>)</b>
2-1	BaIQ (10 nm) / AlIQ <sub>3</sub> (30 nm)	2.5	0.6	13	1300
2-2	AlIQ <sub>3</sub> (30 nm)	1.8	0.5	10.9	1600

[0459] 적용 실시예 3

[0460] Balq 대신에 실시예 1의 화합물을 호스트로서 사용하고, 전자 수송층의 조성 (하기 표에 나타냄)이 상이하다는 것을 제외하고는 장치 1-2와 동일한 방식으로 장치 3-1을 제작하였다.

[0461] 장치 3-1에 대하여 측정된 개시 전압과 발광 효율 (@1000 cd/m<sup>2</sup>) 및 최대 휘도를 하기 표에 나타내었다.

	<b>ETL (nm)</b>	<b>C.Eff@1000 cd/m<sup>2</sup></b>	<b>P.Eff@1000 cd/m<sup>2</sup></b>	<b>V@1000 cd/m<sup>2</sup></b>	<b>최대 휘도(cd/m<sup>2</sup>)</b>
<b>3-1</b>	<b>TPBI (10 nm) / AlQ<sub>3</sub> (30 nm)</b>	<b>2.7</b>	<b>0.8</b>	<b>10.3</b>	<b>4000</b>

[0462]

적용 실시예 4

[0464] 고 진공 (<10<sup>-6</sup> mbar)에서 열증착에 의해 장치를 제작하였다. 애노드는 유리 기판 상에 미리 증착된 약 120 nm의 인듐 주석 옥시드 (ITO)로 이루어졌다. 캐소드는 1 nm의 LiF 이후 100 nm의 Al로 이루어졌다.

[0465] 유기 스택은, ITO 표면으로부터, 순차적으로, 정공 주입/정공 수송층으로서의, MoO<sub>x</sub>로 도핑된 α-NPD (60 nm), 전자 차단 층으로서의 α-NPD (10 nm), 방출층으로서의, 10%의 적색 방출체, 비스(1-페닐이소퀴놀린) (아세틸 아세토네이트)이리듐(III)으로 도핑된 α-NPD (20 nm)로 이루어졌다. 장치 4-1에 대하여 측정된 전자 수송층 (ETL)의 조성, 개시 전압과 발광 효율 (@1000 cd/m<sup>2</sup>) 및 최대 휘도를 하기 표에 나타내었다.

	<b>ETL</b>	<b>C.Eff@1000 cd/m<sup>2</sup></b>	<b>P.Eff@1000 cd/m<sup>2</sup></b>	<b>V@1000 cd/m<sup>2</sup></b>	<b>최대 휘도(cd/m<sup>2</sup>)</b>
<b>4-1</b>	<b>실시예 6 의 화합물 (30 nm)</b>	<b>6.7</b>	<b>2.4</b>	<b>8.6</b>	<b>2700</b>

(NHT5 및 NDP2는 노발레드 아케(Novaled AG, 드레스덴(Dresden))에 의해 제공되었음)

[0466]

적용 실시예 5

[0468] 캐소드가 100 nm의 Al로 이루어지고, α-NPD의 대신에 실시예 2의 화합물을 호스트로서 사용한 것을 제외하고는 장치 4-1과 동일한 방식으로 장치 5-1을 제작하였다. 장치 5-1에 대하여 측정된 전자 수송층 (ETL)의 조성, 개시 전압과 발광 효율 (@1000 cd/m<sup>2</sup>) 및 최대 휘도를 하기 표에 나타내었다.

	<b>ETL</b>	<b>C.Eff@1000 cd/m<sup>2</sup></b>	<b>P.Eff@1000 cd/m<sup>2</sup></b>	<b>V@1000 cd/m<sup>2</sup></b>	<b>최대 휘도(cd/m<sup>2</sup>)</b>
<b>5-1</b>	<b>BalQ (10 nm) / CsCO<sub>3</sub> 으로 도핑된 BCP (60 nm)</b>	<b>2.6</b>	<b>2</b>	<b>4.1</b>	<b>1900</b>

[0469]

적용 실시예 6

[0471] 이리듐(III)비스-(2-메틸디벤조[f,h]퀴녹살린) (아세틸아세토네이트)을 방출체로서 사용하고, α-NPD를 호스트로서 사용한 것을 제외하고는 장치 5-1과 동일한 방식으로 장치 6-1 및 6-2를 제작하였다. 장치 6-1 및 6-2에 대하여 측정된 전자 수송층 (ETL)의 조성, 개시 전압과 발광 효율 (@1000 cd/m<sup>2</sup>) 및 최대 휘도를 하기 표에 나타내었다.

	<b>ETL</b>	<b>C.Eff@1000 cd/m<sup>2</sup></b>	<b>P.Eff@1000 cd/m<sup>2</sup></b>	<b>V@1000 cd/m<sup>2</sup></b>	<b>최대 휘도(cd/m<sup>2</sup>)</b>
6-1	BalQ (10 nm) / CsCO <sub>3</sub> 으로 도핑된 실시예 1 의 화합물 (60 nm)	1.2	0.6	6.3	1800
6-2	BalQ (10 nm) / CsCO <sub>3</sub> 으로 도핑된 실시예 6 의 화합물 (60 nm)	1.2	0.5	6.8	1500

[0472]

적용 실시예 7

[0474]

이리듐(III)비스-(2-메틸디벤조[f,h]퀴녹살린) (아세틸아세토네이트)를 방출체로서 사용한 것을 제외하고는 장치 1-1과 동일한 방식으로 장치 7-1, 7-2 및 7-3을 제작하였다. 장치 7-1, 7-2 및 7-3에 대하여 측정된 전자수송층 (ETL)의 조성, 개시 전압과 발광 효율 (@1000 cd/m<sup>2</sup>) 및 최대 휘도를 하기 표에 나타내었다.

	<b>ETL</b>	<b>C.Eff@1000 cd/m<sup>2</sup></b>	<b>P.Eff@1000 cd/m<sup>2</sup></b>	<b>V@1000 cd/m<sup>2</sup></b>	<b>최대 휘도(cd/m<sup>2</sup>)</b>
7-1	실시예 3 의 화합물 (30 nm)	8	1.8	14	1000
7-2	실시예 7 의 화합물 (30 nm)	4	0.9	14	1000
7-3	BalQ (10nm) / 실시예 3 의 화합물 (30 nm)	6.5	1.4	14	1000

[0475]

실시예 8

[0477]

이리듐(III)비스-(2-메틸디벤조[f,h]퀴녹살린) (아세틸아세토네이트)를 방출체로서 사용한 것을 제외하고는 장치 4-1과 동일한 방식으로 장치 8-1, 8-2 및 8-3을 제작하였다. 장치 8-1, 8-2 및 8-3에 대하여 측정된 전자수송층 (ETL)의 조성, 개시 전압과 발광 효율 (@1000 cd/m<sup>2</sup>) 및 최대 휘도를 하기 표에 나타내었다.

	<b>ETL</b>	<b>C.Eff@1000 cd/m<sup>2</sup></b>	<b>P.Eff@1000 cd/m<sup>2</sup></b>	<b>V@1000 cd/m<sup>2</sup></b>	<b>최대 휘도(cd/m<sup>2</sup>)</b>
8-1	실시예 3 의 화합물 (30 nm)	10.4	3.9	8.3	2000
8-2	실시예 7 의 화합물 (30 nm)	2.8	1	9.1	2900
8-3	BalQ (10nm) / 실시예 3 의 화합물 (30 nm)	4.4	1.5	9.2	3200

[0478]