



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2012년11월05일  
(11) 등록번호 10-1197802  
(24) 등록일자 2012년10월30일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C09K 11/06 (2006.01) C07C 15/00 (2006.01)  
C07C 209/00 (2006.01) C07C 211/00 (2006.01)  
(21) 출원번호 10-2006-7019117  
(22) 출원일자(국제) 2005년02월17일  
심사청구일자 2010년02월17일  
(85) 번역문제출일자 2006년09월18일  
(65) 공개번호 10-2006-0134991  
(43) 공개일자 2006년12월28일  
(86) 국제출원번호 PCT/US2005/005579  
(87) 국제공개번호 WO 2005/080525  
국제공개일자 2005년09월01일  
(30) 우선권주장  
10/782,357 2004년02월19일 미국(US)  
(56) 선행기술조사문헌  
W02004005406 A2  
전체 청구항 수 : 총 25 항

(73) 특허권자  
이 아이 듀폰 디 네모아 앤드 캄파니  
미합중국 데라웨어주 (우편번호 19898) 월밍톤시  
마켓 스트리트 1007  
(72) 발명자  
헤론, 노만  
미국 19711 데라웨어주 뉴악 애플 로드 408  
요한슨, 게리, 에이.  
미국 19707 데라웨어주 호케신 켄윅 로드 6  
(뒤편에 계속)  
(74) 대리인  
김영, 주성민

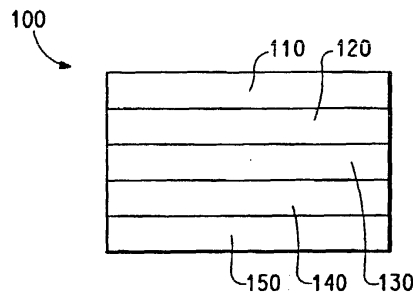
심사관 : 오세주

(54) 발명의 명칭 **방향족 아민 조성물 및 상기 조성물로 제조된 전자디바이스**

(57) 요약

본 발명은 신규 화합물 및 신규 올리고머 및 중합체를 포함하는 조성물, 및 조성물을 함유하는 1개 이상의 층을 포함하는 전자 디바이스에 관한 것이다. 신규 올리고머 및 중합체는 가용화 될 수 있고, 용액으로 사용되어 전자 디바이스를 형성할 수 있다. 상기 화합물은 단량체로 작용할 수 있어서 상기 단량체로부터 공중합체가 형성될 수 있고, 상기 공중합체는 중합 단위로서, 복수의 화합물 단위를 포함한다.

대표도 - 도1



(72) 발명자

**라두, 노라, 사비나**

미국 19350 펜실베이니아주 란덴버그 스톤리 릿지 로드 109

**스미쓰, 에릭, 마우리스**

미국 19707 데라웨어주 호케신 스프링하우스 레인 359

**델로우스키, 아씨**

영국 이엔5 2엔제이 허츠 언나운 바넷 힐사이드 가든스 50

**첸트리, 프레데릭, 피.**

미국 19701 데라웨어주 베어 크리시 코트 4

**로시, 진, 엠.**

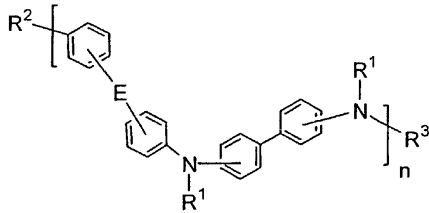
미국 19807 데라웨어주 그린빌 프레지덴셜 드라이브 100씨

**특허청구의 범위**

**청구항 1**

화학식 (I)을 갖는 화합물.

<화학식 I>



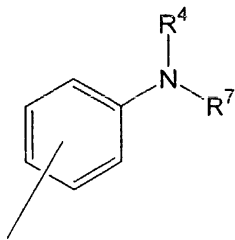
상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고;

R<sup>1</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 1개 이상의 불소 원자로 치환된 플루오로헤테로아릴로부터 선택되고;

R<sup>3</sup>은 H 및 R<sup>1</sup>로부터 선택되고;

R<sup>2</sup>는 H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬, Cl, Br, I 및 화학식 (II)의 아릴아미노 기로부터 선택되며;

<화학식 II>



(상기 식 중, R<sup>4</sup>는 아릴, H, R<sup>1</sup>, 알킬, 및 플루오로알킬로부터 선택되고;

R<sup>7</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 1개 이상의 불소 원자로 치환된 플루오로헤테로아릴로부터 선택됨)

E는 (SiR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 알콕시, 플루오로알킬, 및 플루오로알콕시로부터 선택되고, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가 (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub>이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup> 중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니다.

**청구항 2**

제 1항에 있어서, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>이 함께 비-방향족 고리를 형성하는 화합물.

**청구항 3**

제 1항에 있어서, n이 1보다 큰 화합물.

**청구항 4**

제 2항에 있어서, R<sup>1</sup>이 각 경우에 상이한 화합물.

**청구항 5**

제 1항에 있어서, R<sup>2</sup>가 H인 화합물.

**청구항 6**

제 5항에 있어서, R<sup>3</sup>이 아릴인 화합물.

**청구항 7**

제 1항에 있어서, R<sup>1</sup>이 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택되는 화합물.

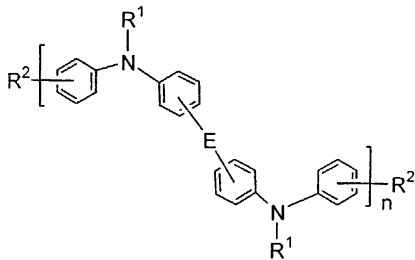
**청구항 8**

제 1항에 있어서, n이 1, R<sup>2</sup>가 H이고, R<sup>3</sup>이 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택되는 화합물.

**청구항 9**

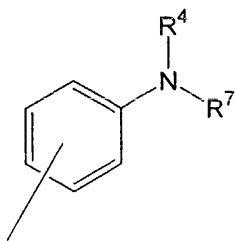
화학식 (III)의 화합물.

<화학식 III>



상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고, R<sup>1</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 플루오로헤테로아릴로부터 선택되며, R<sup>2</sup>는 H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬, Cl, Br, I 및 화학식 (II)의 아릴아미노로부터 선택되며;

<화학식 II>



(상기 식 중, R<sup>4</sup>는 아릴, H, R<sup>1</sup>, 알킬, 및 플루오로알킬로부터 선택되고; R<sup>7</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 1개 이상의 불소 원자로 치환된 플루오로헤테로아릴로부터 선택됨)

E는 (SiR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 알콕시, 플루오로알킬, 및 플루오로알콕시로부터 선택되고, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가 (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub>이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup> 중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니다.

**청구항 10**

제 9항에 있어서, R<sup>1</sup>이 각 경우에 상이한 화합물.

**청구항 11**

제 9항에 있어서, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>이 함께 비-방향족 고리를 형성하는 화합물.

**청구항 12**

제 9항에 있어서, R<sup>2</sup>가 H 또는 아틸인 화합물.

**청구항 13**

제 9항에 있어서, R<sup>1</sup>이 아틸인 화합물.

**청구항 14**

제 9항에 있어서, R<sup>4</sup>가 아틸인 화합물.

**청구항 15**

제 9항에 있어서, R<sup>1</sup>이 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택되는 화합물.

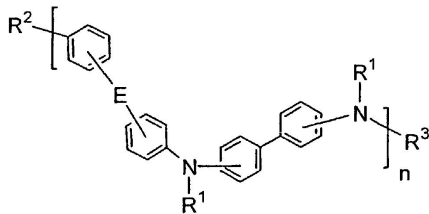
**청구항 16**

제 9항에 있어서, n이 1, R<sup>2</sup>가 H이고, R<sup>1</sup>이 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택되는 화합물.

**청구항 17**

화학식 (I) 또는 화학식 (III)을 갖는 치환된 화합물.

<화학식 I>



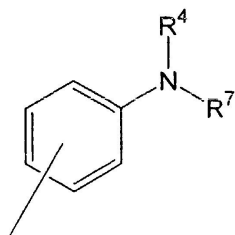
상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고;

R<sup>1</sup>은 아틸, 헤테로아틸, 플루오로아틸, 및 1개 이상의 불소 원자로 치환된 플루오로헤테로아틸로부터 선택되고;

R<sup>3</sup>은 H 및 R<sup>1</sup>로부터 선택되고;

R<sup>2</sup>는 H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬, Cl, Br, I 및 화학식 (II)의 아틸아미노 기로부터 선택되며;

<화학식 II>

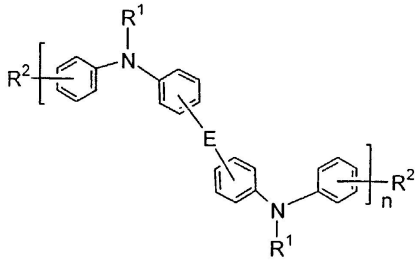


(상기 식 중,  $R^4$ 는 아릴, H,  $R^1$ , 알킬, 및 플루오로알킬로부터 선택되고;

$R^7$ 은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 1개 이상의 불소 원자로 치환된 플루오로헤테로아릴로부터 선택됨)

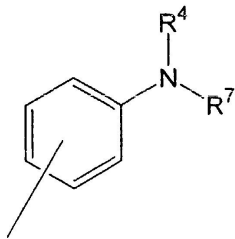
E는  $(SiR^5R^6)_m$  (여기서, m 은 1 내지 20의 정수임),  $(CR^5R^6)_m$  (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고,  $R^5$  및  $R^6$ 은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 알콕시, 플루오로알킬, 및 플루오로알콕시로부터 선택되고,  $R^5$  및  $R^6$ 은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가  $(CR^5R^6)_m$ 이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우,  $R^5$  및  $R^6$  중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니며;

<화학식 III>



상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고,  $R^1$ 은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 플루오로헤테로아릴로부터 선택되며,  $R^2$ 는 H,  $R^1$ , 알킬, 플루오로알킬, Cl, Br, I, 및 화학식 (II)의 아릴아미노로부터 선택되며;

<화학식 II>



(상기 식 중,  $R^4$ 는 아릴, H,  $R^1$ , 알킬, 및 플루오로알킬로부터 선택되고;  $R^7$ 은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 1개 이상의 불소 원자로 치환된 플루오로헤테로아릴로부터 선택됨)

E는  $(SiR^5R^6)_m$  (여기서, m 은 1 내지 20의 정수임),  $(CR^5R^6)_m$  (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고,  $R^5$  및  $R^6$ 은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 알콕시, 플루오로알킬, 및 플루오로알콕시로부터 선택되고,  $R^5$  및  $R^6$ 은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가  $(CR^5R^6)_m$ 이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우,  $R^5$  및  $R^6$  중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니며;

화학식 (I) 또는 화학식 (III)의 화합물 중의 방향족 고리 1개 이상은 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택된 치환체를 갖는다.

**청구항 18**

제 17항에 있어서, 화학식 (I) 또는 화학식 (III)의 화합물에서 2개의 이웃하는 방향족 고리 상의 치환체가 함께 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성하는 화합물.

**청구항 19**

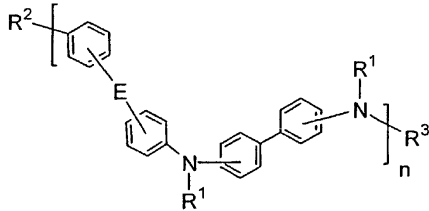
제 17항에 있어서, 1개 이상의 방향족 고리 상의 인접 치환체가 융합 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성하는

화합물.

청구항 20

화학식(I) 또는 화학식 (III)의 화합물로부터 선택된 1종 이상의 화합물을 포함하는 조성물.

<화학식 I>



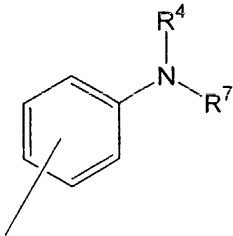
상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고;

R<sup>1</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 1개 이상의 불소 원자로 치환된 플루오로헤테로아릴로부터 선택되고;

R<sup>3</sup>은 H 및 R<sup>1</sup>로부터 선택되고;

R<sup>2</sup>는 H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬, Cl, Br, I 및 화학식 (II)의 아릴아미노 기로부터 선택되며;

<화학식 II>

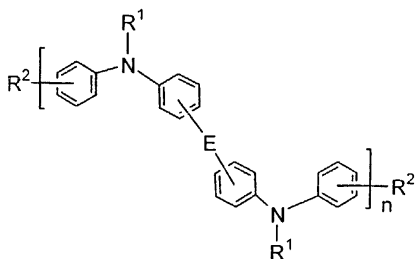


(상기 식 중, R<sup>4</sup>는 아릴, H, R<sup>1</sup>, 알킬, 및 플루오로알킬로부터 선택되고;

R<sup>7</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 1개 이상의 불소 원자로 치환된 플루오로헤테로아릴로부터 선택됨)

E는 (SiR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m 은 1 내지 20의 정수임), (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 알콕시, 플루오로알킬, 및 플루오로알콕시로부터 선택되고, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가 (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub>이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup> 중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니며;

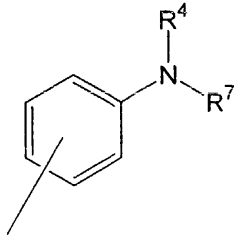
<화학식 III>



상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고, R<sup>1</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 플루오로헤테로아릴로부터 선택

되며, R<sup>2</sup>는 H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬, Cl, Br, I, 및 화학식 (II)의 아릴아미노로부터 선택되며;

<화학식 II>



(상기 식 중, R<sup>4</sup>는 아릴, H, R<sup>1</sup>, 알킬, 및 플루오로알킬로부터 선택되고; R<sup>7</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 1개 이상의 불소 원자로 치환된 플루오로헤테로아릴로부터 선택됨)

E는 (SiR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m 은 1 내지 20의 정수임), (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 알콕시, 플루오로알킬, 및 플루오로알콕시로부터 선택되고, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가 (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub>이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup> 중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니다.

**청구항 21**

제 1항, 제 9항 및 제 17항 중 어느 한 항의 화합물로부터 선택된 1종 이상의 화합물을 포함하는 1개 이상의 층을 포함하는 전자 디바이스.

**청구항 22**

제 21항에 있어서, 층이 전하 수송층인 디바이스.

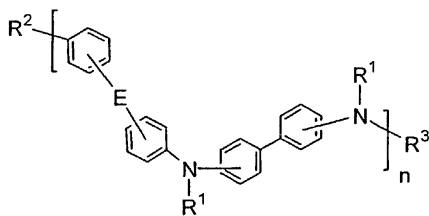
**청구항 23**

제 21항에 있어서, 층이 발광층인 디바이스.

**청구항 24**

(a) 화학식 (I) 또는 (III)을 갖는 2종 이상의 화합물을 제공하는 단계;

<화학식 I>



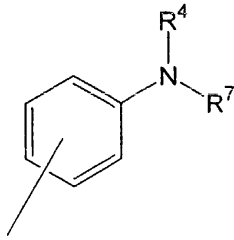
[상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고;

R<sup>1</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 1개 이상의 불소 원자로 치환된 플루오로헤테로아릴로부터 선택되고;

R<sup>3</sup>은 H 및 R<sup>1</sup>로부터 선택되고;

R<sup>2</sup>는 H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬, Cl, Br, I 및 화학식 (II)의 아릴아미노 기로부터 선택되며;

<화학식 II>

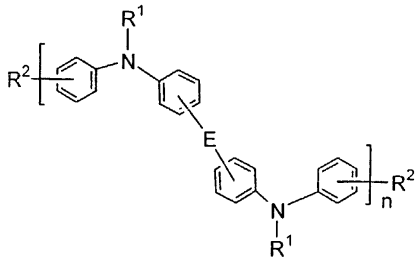


(상기 식 중, R<sup>4</sup>는 아릴, H, R<sup>1</sup>, 알킬, 및 플루오로알킬로부터 선택되고;

R<sup>7</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 1개 이상의 불소 원자로부터 선택됨)

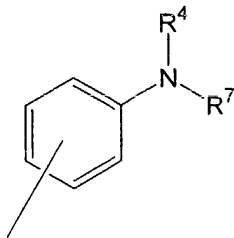
E는 (SiR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m 은 1 내지 20의 정수임), (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 알콕시, 플루오로알킬, 및 플루오로알콕시로부터 선택되고, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가 (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub>이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup> 중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니며;

<화학식 III>



상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고, R<sup>1</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 플루오로헤테로아릴로부터 선택되며, R<sup>2</sup>는 H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬, Cl, Br, I 및 화학식 (II)의 아릴아미노로부터 선택되며;

<화학식 II>



(상기 식 중, R<sup>4</sup>는 아릴, H, R<sup>1</sup>, 알킬, 및 플루오로알킬로부터 선택되고; R<sup>7</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 1개 이상의 불소 원자로부터 선택됨)

E는 (SiR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m 은 1 내지 20의 정수임), (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 알콕시, 플루오로알킬, 및 플루오로알콕시로부터 선택되고, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가 (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub>이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup> 중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아님]

(b) 구리, 니켈, 또는 팔라듐 촉매의 존재하에서 상기 화합물을 22℃ 내지 150℃로 유지시키면서 24 내지 92시간 동안 반응시켜서 제 1 중합체를 형성하는 단계;

(c) 상기 중합체를 말단캡핑 기로 처리하여 캡핑된 중합체를 형성하는 단계; 및

(d) 상기 캡핑된 중합체를 24 내지 48시간 동안 더 반응시켜 중합체를 제조하는 단계

를 포함하는 중합체 제조 방법.

**청구항 25**

제 21항에 있어서, 발광 다이오드, 발광 다이오드 디스플레이, 레이저 다이오드, 광검출기, 광전도성 전지, 포토레지스터, 포토스위치, 포토트랜지스터, 포토튜브, IR 검출기, 광기전력 디바이스, 태양 전지, 트랜지스터 또는 다이오드로부터 선택되는 디바이스.

**명세서**

**기술분야**

[0001] 본 발명은 전자 디바이스의 제조에서 정공 수송 물질로서 유용한 신규 화합물에 관한 것이다. 본 발명은 또한 상기 정공 수송 물질을 포함하는 1개 이상의 활성층을 갖는 전자 디바이스에 관한 것이다.

**배경기술**

[0002] 유기 광활성 전자 디바이스, 예를 들어 OLED 디스플레이를 구성하는 유기 발광 다이오드 ("OLED")에서, 유기 활성층은 OLED 디스플레이에서 2개의 전기 접촉층 사이에 샌드위치된다. OLED에서 유기 광활성층은 전기 접촉층을 통한 전압 인가시 광-투과 전기 접촉층을 통해 발광한다.

[0003] 발광 다이오드에서 활성 성분으로서 유기 전기발광(electroluminescent) 화합물을 사용하는 것은 널리 공지되어 있다. 간단한 유기 분자, 공액 중합체, 및 유기금속 착물이 사용되어 왔다.

[0004] 광활성 물질을 사용하는 디바이스는 흔히 광활성 (예를 들어, 발광)층과 접촉층 (정공-주입 접촉층) 사이에 위치한 1개 이상의 전하 수송층을 포함한다. 디바이스는 2개 이상의 접촉층을 함유할 수 있다. 정공 수송층은 광활성층과 정공-주입 접촉층 사이에 위치될 수 있다. 정공-주입 접촉층은 또한 애노드라 불릴 수 있다. 전자 수송층은 광활성층과 전자-주입층 사이에 위치될 수 있다. 전자-주입 접촉층은 또한 캐소드라 불릴 수 있다.

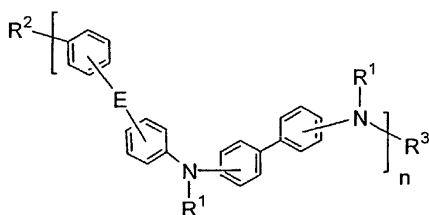
[0005] 전자 디바이스에서 사용하기 위한 전하 수송 물질이 계속 요구되어 왔다.

[0006] <본 발명의 요약>

[0007] 본원에서 개시된 화합물은 전자 디바이스에서 사용하기 위한 전하 수송층을 제조하는데 유용하다. 전하 수송층은 전하 수송 능력이 필요한 임의의 응용분야에서 사용될 수 있다. 임의의 응용분야의 예는 비제한적으로, 유기 발광 다이오드 ("OLED"), 광기전력 전지, 광 센서, 박막 유기 트랜지스터, 광전도체, 및 전기사진 분야를 포함한다.

[0008] 본 발명의 한 면은 화학식 (I)을 갖는 신규 화합물이다.

**화학식 I**



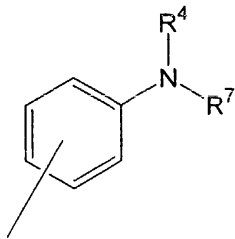
[0009]

[0010] 상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고 R<sup>1</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 1개 이상의 불소 원자, 바람직하게는 7개 이하의 불소 원자로 치환된 플루오로헤테로아릴로부터 선택된다. 상기 화합물은 하나 이상의 기 R<sup>1</sup>을

포함하고,  $R^1$ 은 각 경우에 상이할 수 있다. 예를 들어, 화학식 (I)로 나타낸 화합물은 단량체로서 작용할 수 있어서 상기 화합물로부터 공중합체가 형성될 수 있고, 상기 공중합체는 중합 단위로서, 하나 이상의 단위가 다른 단위에 있는  $R^1$ 과 상이한  $R^1$ 을 함유하는 화학식 (I)을 갖는 복수의 단위를 포함한다. 일부 실시양태에서,  $R^1$ 은 아틸이다.

[0011]  $R^3$ 은 H 및  $R^1$ 로부터 선택된다.  $R^2$ 는 H,  $R^1$ , 알킬, 플루오로알킬, Cl, Br, I 및 화학식 (II)의 아틸아미노 기로부터 선택된다.

**화학식 II**



[0012]

[0013] 상기 식 중,  $R^4$ 는 아틸, H,  $R^1$ , 알킬, 및 플루오로알킬로부터 선택된다.  $R^4$ 는 바람직하게는 아틸이다.  $R^7$ 은 아틸, 헤테로아틸, 플루오로아틸, 및 1개 이상의 불소 원자, 바람직하게는 7개 이하의 불소 원자로 치환된 플루오로헤테로아틸로부터 선택된다.

[0014] 일부 실시양태에서,  $R^2$ 는 H이다. 일부 실시양태에서,  $R^2$ 는  $R^3$ 과 상이하다. 일부 실시양태에서,  $R^2$ 는 H이고  $R^3$ 은 아틸이다.

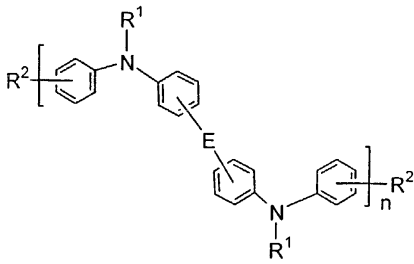
[0015] E는 O, S,  $(SiR^5R^6)_m$  (여기서, m 은 1 내지 20의 정수임),  $(CR^5R^6)_m$  (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, 각 경우에 상이할 수 있으며,  $R^5$  및  $R^6$ 은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 아틸, 알콕시, 아틸옥시, 플루오로알킬, 플루오로아틸, 플루오로알콕시, 및 플루오로아틸옥시로부터 선택될 수 있고,  $R^5$  및  $R^6$ 은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가  $(CR^5R^6)_m$ 이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우,  $R^5$  및  $R^6$  중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니다.

[0016] 일부 실시양태에서, 화학식 (I)의 화합물 중 1개 이상의 방향족 고리는 H, F, 알킬, 아틸, 알콕시, 아틸옥시, 플루오로알킬, 플루오로아틸, 플루오로알콕시, 및 플루오로아틸옥시로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환체를 갖는다. 추가 실시양태에서, 화학식 (I)의 화합물에서 2개의 이웃하는 방향족 고리 상의 치환체는 함께 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다. 이웃하는 방향족 고리는 인접할 또는 이웃할(vicinal) 수 있다. 추가 실시양태에서, 단일 고리 상의 인접한 치환체는 연결되어 융합 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다.

[0017] 일부 실시양태에서,  $R^1$ 은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다. 일부 실시양태에서, n은 1,  $R^2$ 는 H이고,  $R^3$ 은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다.

[0018] 다른 실시양태는 화학식 (III)의 화합물이다.

화학식 III



[0019]

[0020]

상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고, R<sup>1</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 플루오로헤테로아릴로부터 선택된다. R<sup>1</sup>은 바람직하게는 아릴이고 각 경우에 (즉, 공중합체) 상이할 수 있다. R<sup>2</sup>는 H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬, 화학식 (II)의 아릴아미노, Cl, Br, 및 I로부터 선택된다. R<sup>2</sup>는 바람직하게는 H 또는 아틸이다. R<sup>4</sup>는 아릴, H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬로부터 선택된다. R<sup>4</sup>는 바람직하게는 아틸이다.

[0021]

E는 O, S, (SiR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m 은 1 내지 20의 정수임), (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, 각 경우에 상이할 수 있으며, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택되고, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가 (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub>이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup> 중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니다.

[0022]

일부 실시양태에서, 화학식 (III)의 화합물 중 1개 이상의 방향족 고리는 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택된 치환체를 갖는다. 추가 실시양태에서, 화학식 (III)의 화합물에서 2개의 이웃하는 방향족 고리 상의 치환체는 함께 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다. 추가 실시양태에서, 단일 고리 상의 인접 치환체는 연결되어 융합 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다.

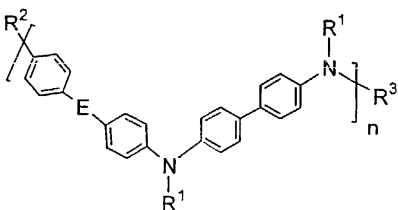
[0023]

일부 실시양태에서, R<sup>1</sup>은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다. 일부 실시양태에서, n은 1, x는 0, R<sup>2</sup>는 화학식 (II)의 아릴아미노 (여기서, R<sup>4</sup>는 아릴, H, R<sup>1</sup>, 알킬, 및 플루오로알킬로부터 선택됨)이다. R<sup>4</sup>는 바람직하게는 아틸이다.

[0024]

다른 실시양태는 화학식 (IV)의 화합물이다.

화학식 IV



[0025]

[0026]

상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고, R<sup>1</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 플루오로헤테로아릴로부터 선택되고, 각 경우에 (즉, 공중합체) 상이할 수 있다. 일부 실시양태에서, R<sup>1</sup>은 아틸이다. R<sup>2</sup>는 H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬, 화학식 (II)의 아릴아미노, Cl, Br, I로부터 선택된다. R<sup>2</sup>는 바람직하게는 H이다. R<sup>3</sup>은 H 및 R<sup>1</sup>로부터 선택된다. R<sup>3</sup>은 바람직하게는 아틸이다. 일부 실시양태에서, R<sup>2</sup>는 R<sup>3</sup>과 상이하다. 일부 실시양태에서, R<sup>2</sup>는 H이고 R<sup>3</sup>은 아틸이다. R<sup>4</sup>는 아릴, H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬로부터 선택된다. R<sup>4</sup>는 바람직하게는 아틸이다.

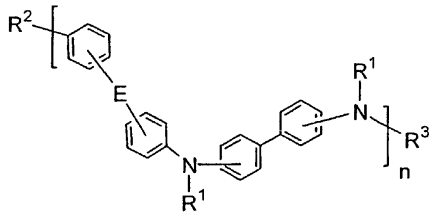
[0027] E는 O, S,  $(SiR^5R^6)_m$  (여기서, m 은 1 내지 20의 정수임),  $(CR^5R^6)_m$  (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, 각 경우에 상이할 수 있으며,  $R^5$  및  $R^6$ 은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택되고,  $R^5$  및  $R^6$ 은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가  $(CR^5R^6)_m$ 이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우,  $R^5$  및  $R^6$  중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니다.

[0028] 일부 실시양태에서, 화학식 (IV) 화합물 중 1개 이상의 방향족 고리는 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택된 치환체를 갖는다. 일부 실시양태에서,  $R^1$ 은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다. 일부 실시양태에서, n은 1,  $R^2$ 는 H이고,  $R^3$ 은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다.

[0029] 본 발명의 다른 면은 1종 이상의 단량체가 공중합되는 다른 단량체와 상이한, 상기에 정의된 화학식 (I) 또는 (III)을 갖는 다관능성 단량체를 공중합하여 제조된 공중합체를 포함하는 조성물이다. 단량체는 예를 들어 Pd 또는 Ni 촉매화 중합 방법을 사용하여 공중합될 수 있다.

[0030] 다른 실시양태는 화학식 (I)을 갖는 화합물을 포함하는 1개 이상의 층을 갖는 전자 디바이스이다.

[0031] <화학식 I>

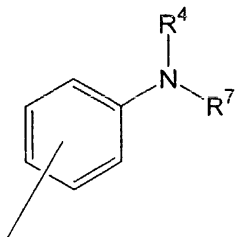


[0032]

[0033] 상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고  $R^1$ 은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 1개 이상의 불소 원자, 바람직하게는 7개 이하의 불소 원자로 치환된 플루오로헤테로아릴로부터 선택된다. 상기 화합물은 하나 이상의 기  $R^1$ 을 포함하고,  $R^1$ 은 각 경우에 상이할 수 있다. 예를 들어, 화학식 (I)로 나타낸 화합물은 단량체로서 작용할 수 있어서 상기 화합물로부터 공중합체가 형성될 수 있고, 상기 공중합체는 중합 단위로서, 하나 이상의 단위가 다른 단위에 있는  $R^1$ 과 상이한  $R^1$ 을 함유하는 화학식 (I)을 갖는 복수의 단위를 포함한다. 일부 실시양태에서,  $R^1$ 은 아릴이다.

[0034]  $R^3$ 은 H 및  $R^1$ 로부터 선택된다.  $R^2$ 는 H,  $R^1$ , 알킬, 플루오로알킬, Cl, Br, I 및 화학식 (II)의 아릴아미노 기로부터 선택된다.

[0035] <화학식 II>



[0036]

[0037] 상기 식 중,  $R^4$ 는 아릴, H,  $R^1$ , 알킬, 및 플루오로알킬로부터 선택된다.  $R^4$ 는 바람직하게는 아릴이다.  $R^7$ 은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 1개 이상의 불소 원자, 바람직하게는 7개 이하의 불소 원자로 치환된 플루오로헤테로아릴로부터 선택된다.

[0038] 일부 실시양태에서,  $R^2$ 는 H이다. 일부 실시양태에서,  $R^2$ 는  $R^3$ 과 상이하다. 일부 실시양태에서,  $R^2$ 는 H이고  $R^3$

은 아틸이다.

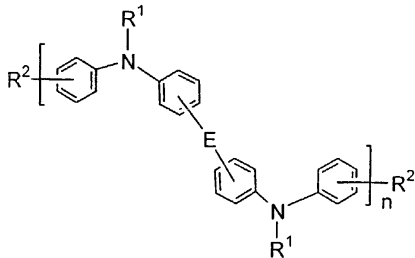
[0039] E는 O, S,  $(SiR^5R^6)_m$  (여기서, m 은 1 내지 20의 정수임),  $(CR^5R^6)_m$  (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, 각 경우에 상이할 수 있으며,  $R^5$  및  $R^6$ 은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 아틸, 알콕시, 아틸옥시, 플루오로알킬, 플루오로아틸, 플루오로알콕시, 및 플루오로아틸옥시로부터 선택될 수 있고,  $R^5$  및  $R^6$ 은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가  $(CR^5R^6)_m$ 이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우,  $R^5$  및  $R^6$  중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니다.

[0040] 일부 실시양태에서, 화학식 (I)의 화합물 중 1개 이상의 방향족 고리는 H, F, 알킬, 아틸, 알콕시, 아틸옥시, 플루오로알킬, 플루오로아틸, 플루오로알콕시, 및 플루오로아틸옥시로부터 선택된 하나 이상의 치환체를 갖는다. 추가 실시양태에서, 화학식 (I)의 화합물에서 2개의 이웃하는 방향족 고리 상의 치환체는 함께 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다. 추가 실시양태에서, 단일 고리 상의 인접 치환체는 연결되어 융합 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다.

[0041] 일부 실시양태에서,  $R^1$ 은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다. 일부 실시양태에서, n은 1,  $R^2$ 는 H이고,  $R^3$ 은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다.

[0042] 본 발명의 다른 면은 화학식 (III)을 갖는 화합물을 포함하는 1개 이상의 층을 갖는 전자 디바이스이다.

[0043] <화학식 III>



[0044]

[0045] 상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고,  $R^1$ 은 아틸, 헥세로아틸, 플루오로아틸, 및 플루오로헥세로아틸로부터 선택된다.  $R^1$ 은 바람직하게는 아틸이고 각 경우에 (즉, 공중합체) 상이할 수 있다.  $R^2$ 는 H,  $R^1$ , 알킬, 플루오로알킬, 화학식 (II)의 아틸아미노, Cl, Br, 및 I로부터 선택된다.  $R^3$ 는 바람직하게는 H 또는 아틸이다.  $R^4$ 는 아틸, H,  $R^1$ , 알킬, 플루오로알킬로부터 선택된다.  $R^4$ 는 바람직하게는 아틸이다.

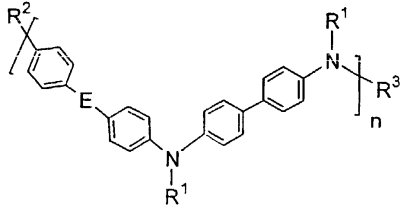
[0046] E는 O, S,  $(SiR^5R^6)_m$  (여기서, m 은 1 내지 20의 정수임),  $(CR^5R^6)_m$  (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, 각 경우에 상이할 수 있으며,  $R^5$  및  $R^6$ 은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 아틸, 알콕시, 아틸옥시, 플루오로알킬, 플루오로아틸, 플루오로알콕시, 및 플루오로아틸옥시로부터 선택되고,  $R^5$  및  $R^6$ 은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가  $(CR^5R^6)_m$ 이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우,  $R^5$  및  $R^6$  중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니다.

[0047] 일부 실시양태에서, 화학식 (III)의 화합물 중 1개 이상의 방향족 고리는 H, F, 알킬, 아틸, 알콕시, 아틸옥시, 플루오로알킬, 플루오로아틸, 플루오로알콕시, 및 플루오로아틸옥시로부터 선택된 치환체를 갖는다. 추가 실시양태에서, 화학식 (III)의 화합물에서 2개의 이웃하는 방향족 고리 상의 치환체는 함께 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다. 추가 실시양태에서, 단일 고리 상의 인접 치환체는 연결되어 융합 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다.

[0048] 일부 실시양태에서,  $R^1$ 은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다. 일부 실시양태에서, n은 1, x는 0,  $R^2$ 는 화학식 (II)의 아틸아미노 (여기서,  $R^4$ 는 아틸, H,  $R^1$ , 알킬, 및 플루오로알킬로부터 선택됨)이다.  $R^4$ 는 바람직하게는 아틸이다.

[0049] 본 발명의 다른 면은 화학식 (IV)를 갖는 화합물을 포함하는 1개 이상의 층을 갖는 전자 디바이스이다.

[0050] <화학식 IV>



[0051]

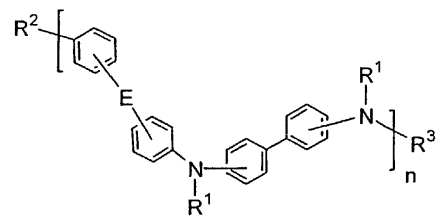
[0052] 상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고, R<sup>1</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 플루오로헤테로아릴로부터 선택되고, 각 경우에 (즉, 공중합체) 상이할 수 있다. 일부 실시양태에서, R<sup>1</sup>은 아릴이다. R<sup>2</sup>는 H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬, 화학식 (II)의 아릴아미노, Cl, Br, I로부터 선택된다. R<sup>2</sup>는 바람직하게는 H이다. R<sup>3</sup>은 H 및 R<sup>1</sup>로부터 선택된다. R<sup>3</sup>은 바람직하게는 아릴이다. R<sup>4</sup>는 아릴, H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬로부터 선택된다. R<sup>4</sup>는 바람직하게는 아릴이다. 일부 실시양태에서, R<sup>2</sup>는 R<sup>3</sup>과 상이하다. 일부 실시양태에서, R<sup>2</sup>는 H이고 R<sup>3</sup>은 아릴이다.

[0053] E는 O, S, (SiR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, 각 경우에 상이할 수 있으며, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택되고, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가 (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub>이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup> 중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니다.

[0054] 일부 실시양태에서, 화학식 (IV) 화합물 중 1개 이상의 방향족 고리는 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택된 치환체를 갖는다. 일부 실시양태에서, R<sup>1</sup>은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다. 일부 실시양태에서, n은 1, R<sup>2</sup>는 H이고, R<sup>3</sup>은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다.

[0055] 본 발명의 추가 면은 화학식 (I)을 갖는 화합물을 포함하는 액체 조성물이다.

[0056] <화학식 I>

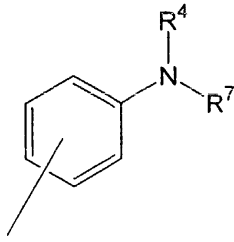


[0057]

[0058] 상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고 R<sup>1</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 1개 이상의 불소 원자, 바람직하게는 7개 이하의 불소 원자로 치환된 플루오로헤테로아릴로부터 선택된다. 상기 화합물은 하나 이상의 기 R<sup>1</sup>을 포함하고, R<sup>1</sup>은 각 경우에 상이할 수 있다. 예를 들어, 화학식 (I)로 나타낸 화합물은 단량체로서 작용할 수 있어서 상기 화합물로부터 공중합체가 형성될 수 있고, 상기 공중합체는 중합 단위로서, 하나 이상의 단위가 다른 단위에 있는 R<sup>1</sup>과는 상이한 R<sup>1</sup>을 함유하는 화학식 (I)을 갖는 복수의 단위를 포함한다. 일부 실시양태에서, R<sup>1</sup>은 아릴이다.

[0059] R<sup>3</sup>은 H 및 R<sup>1</sup>로부터 선택된다. R<sup>2</sup>는 H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬, Cl, Br, I 및 화학식 (II)의 아릴아미노 기로부터 선택된다.

[0060] <화학식 II>



[0061]

[0062] 상기 식 중, R<sup>4</sup>는 아릴, H, R<sup>1</sup>, 알킬, 및 플루오로알킬로부터 선택된다. R<sup>4</sup>는 바람직하게는 아릴이다. R<sup>7</sup>는 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 1개 이상의 불소 원자, 바람직하게는 7개 이하의 불소 원자로 치환된 플루오로헤테로아릴로부터 선택된다.

[0063] 일부 실시양태에서, R<sup>2</sup>는 H이다. 일부 실시양태에서, R<sup>2</sup>는 R<sup>3</sup>과 상이하다. 일부 실시양태에서, R<sup>2</sup>는 H이고 R<sup>3</sup>은 아릴이다.

[0064] E는 0, S, (SiR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m 은 1 내지 20의 정수임), (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, 각 경우에 상이할 수 있으며, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택될 수 있고, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가 (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub>이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup> 중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니다.

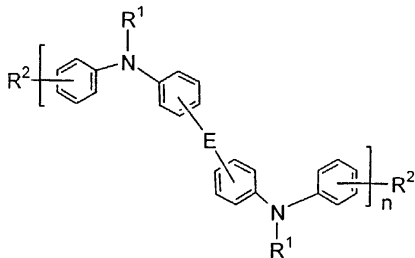
[0065] 액체 조성물은 예를 들어 용액 또는 분산액의 형태일 수 있다.

[0066] 상기 액체의 일부 실시양태에서, 화학식 (I)의 화합물 중 1개 이상의 방향족 고리는 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환체를 갖는다. 추가 실시양태에서, 화학식 (I)의 화합물에서 2개의 이웃하는 방향족 고리 상의 치환체는 함께 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다. 추가 실시양태에서, 단일 고리 상의 인접한 치환체는 연결되어 융합 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다.

[0067] 일부 실시양태에서, R<sup>1</sup>은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다. 일부 실시양태에서, n은 1, R<sup>2</sup>는 H이고, R<sup>3</sup>은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다.

[0068] 한 실시양태는 화학식 (III)의 화합물을 포함하는 액체 조성물이다.

[0069] <화학식 III>



[0070]

[0071] 상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고, R<sup>1</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 플루오로헤테로아릴로부터 선택된다. R<sup>1</sup>은 바람직하게는 아릴이고 각 경우에 (즉, 공중합체) 상이할 수 있다. R<sup>2</sup>는 H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬, 화학식 (II)의 아릴아미노, Cl, Br, 및 I로부터 선택된다. R<sup>2</sup>는 바람직하게는 H 또는 아릴이다. R<sup>4</sup>는 아릴, H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬로부터 선택된다. R<sup>4</sup>는 바람직하게는 아릴이다.

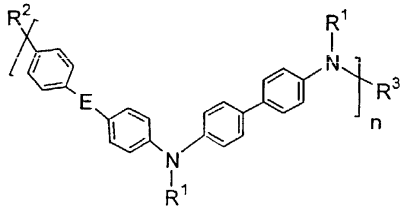
[0072] E는 O, S,  $(SiR^5R^6)_m$  (여기서, m 은 1 내지 20의 정수임),  $(CR^5R^6)_m$  (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, 각 경우에 상이할 수 있으며,  $R^5$  및  $R^6$ 은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택되고,  $R^5$  및  $R^6$ 은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가  $(CR^5R^6)_m$ 이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우,  $R^5$  및  $R^6$  중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니다.

[0073] 상기 액체의 일부 실시양태에서, 화학식 (III)의 화합물 중 1개 이상의 방향족 고리는 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택된 치환체를 갖는다. 추가 실시양태에서, 화학식 (III)의 화합물에서 2개의 이웃하는 방향족 고리 상의 치환체는 함께 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다. 추가 실시양태에서, 단일 고리 상의 인접 치환체는 연결되어 융합 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다.

[0074] 상기 액체의 일부 실시양태에서,  $R^1$ 은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다. 일부 실시양태에서, n은 1, x는 0,  $R^2$ 는 화학식 (II)의 아릴아미노 (여기서,  $R^4$ 는 아릴, H,  $R^1$ , 알킬, 및 플루오로알킬로부터 선택됨)이다.  $R^4$ 는 바람직하게는 아릴이다.

[0075] 본 발명의 다른 면은 화학식 (IV)의 화합물을 포함하는 액체이다.

[0076] <화학식 IV>



[0077]

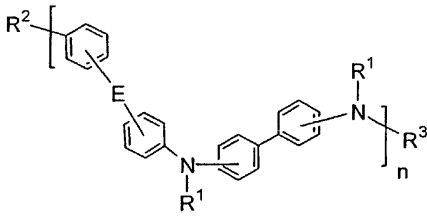
[0078] 상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고,  $R^1$ 은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 플루오로헤테로아릴로부터 선택되고, 각 경우에 (즉, 공중합체) 상이할 수 있다. 일부 실시양태에서,  $R^1$ 은 아릴이다.  $R^2$ 는 H,  $R^1$ , 알킬, 플루오로알킬, 화학식 (II)의 아릴아미노, Cl, Br, I로부터 선택된다.  $R^2$ 는 바람직하게는 H이다.  $R^3$ 은 H 및  $R^1$ 로부터 선택된다.  $R^3$ 은 바람직하게는 아릴이다.  $R^4$ 는 아릴, H,  $R^1$ , 알킬, 플루오로알킬로부터 선택된다.  $R^4$ 는 바람직하게는 아릴이다. 일부 실시양태에서,  $R^2$ 는  $R^3$ 과 상이하다. 일부 실시양태에서,  $R^2$ 는 H이고  $R^3$ 은 아릴이다.

[0079] E는 O, S,  $(SiR^5R^6)_m$  (여기서, m 은 1 내지 20의 정수임),  $(CR^5R^6)_m$  (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, 각 경우에 상이할 수 있으며,  $R^5$  및  $R^6$ 은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택되고,  $R^5$  및  $R^6$ 은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가  $(CR^5R^6)_m$ 이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우,  $R^5$  및  $R^6$  중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니다.

[0080] 상기 액체의 일부 실시양태에서, 화학식 (IV) 화합물 중 1개 이상의 방향족 고리는 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택된 치환체를 갖는다. 일부 실시양태에서,  $R^1$ 은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다. 일부 실시양태에서, n은 1,  $R^2$ 는 H이고,  $R^3$ 은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다.

[0081] 본 발명의 추가 면은 화학식 (I)을 갖는 화합물을 포함하는 전자 디바이스이다.

[0082] <화학식 I>

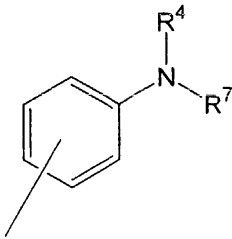


[0083]

[0084] 상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고 R¹은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 1개 이상의 불소 원자, 바람직하게는 7개 이하의 불소 원자로 치환된 플루오로헤테로아릴로부터 선택된다. 상기 화합물은 하나 이상의 기 R¹을 포함하고, R¹은 각 경우에 상이할 수 있다. 예를 들어, 화학식 (I)로 나타낸 화합물은 단량체로서 작용할 수 있어서 상기 화합물로부터 공중합체가 형성될 수 있고, 상기 공중합체는 중합 단위로서, 하나 이상의 단위가 다른 단위에 있는 R¹과 상이한 R¹을 함유하는 화학식 (I)을 갖는 복수의 단위를 포함한다. 일부 실시양태에서, R¹은 아릴이다.

[0085] R³은 H 및 R¹로부터 선택된다. R²는 H, R¹, 알킬, 플루오로알킬, Cl, Br, I 및 화학식 (II)의 아릴아미노 기로부터 선택된다.

[0086] <화학식 II>



[0087]

[0088] 상기 식 중, R¹은 아릴, H, R¹, 알킬, 및 플루오로알킬로부터 선택된다. R⁴는 바람직하게는 아릴이다. R⁷은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 1개 이상의 불소 원자, 바람직하게는 7개 이하의 불소 원자로 치환된플루오로헤테로아릴로부터 선택된다.

[0089] 일부 실시양태에서, R²는 H이다. 일부 실시양태에서, R²는 R³과 상이하다. 일부 실시양태에서, R²는 H이고 R³은 아릴이다.

[0090] E는 O, S, (SiR⁵R⁶)<sub>m</sub> (여기서, m 은 1 내지 20의 정수임), (CR⁵R⁶)<sub>m</sub> (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, 각 경우에 상이할 수 있으며, R⁵ 및 R⁶은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택될 수 있고, R⁵ 및 R⁶은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가 (CR⁵R⁶)<sub>m</sub>이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우, R⁵ 및 R⁶ 중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니다.

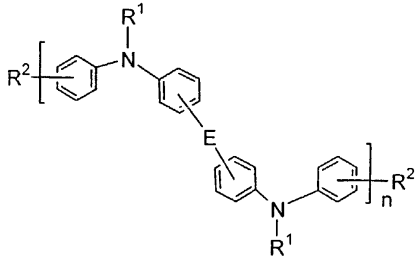
[0091] 상기 디바이스의 일부 실시양태에서, 화학식 (I)의 화합물 중 1개 이상의 방향족 고리는 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환체를 갖는다. 추가 실시양태에서, 화학식 (I)의 화합물에서 2개의 이웃하는 방향족 고리 상의 치환체는 함께 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다. 추가 실시양태에서, 단일 고리 상의 2개의 인접한 치환체는 연결되어 융합 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다.

[0092] 일부 실시양태에서, R¹은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다. 일부 실시양태에서, n은 1, R²는

H이고, R<sup>3</sup>은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다.

[0093] 본 발명의 다른 면은 화학식 (III)의 화합물을 포함하는 전자 디바이스이다.

[0094] <화학식 III>



[0095]

[0096] 상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고, R<sup>1</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 플루오로헤테로아릴로부터 선택된다. R<sup>1</sup>은 바람직하게는 아릴이고 각 경우에 (즉, 공중합체) 상이할 수 있다. R<sup>2</sup>는 H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬, 화학식 (II)의 아릴아미노, Cl, Br, 및 I로부터 선택된다. R<sup>2</sup>는 바람직하게는 H 또는 아틸이다. R<sup>4</sup>는 아릴, H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬로부터 선택된다. R<sup>4</sup>는 바람직하게는 아틸이다.

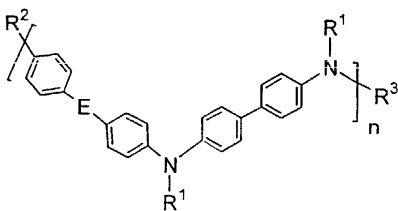
[0097] E는 O, S, (SiR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, 각 경우에 상이할 수 있으며, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택되고, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가 (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub>이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup> 중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니다.

[0098] 상기 디바이스의 일부 실시양태에서, 화학식 (III)의 화합물 중 1개 이상의 방향족 고리는 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택된 치환체를 갖는다. 추가 실시양태에서, 화학식 (III)의 화합물에서 2개의 이웃하는 방향족 고리 상의 치환체는 함께 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다. 추가 실시양태에서, 단일 고리 상의 인접 치환체는 연결되어 융합 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다.

[0099] 상기 디바이스의 일부 실시양태에서, R<sup>1</sup>은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다. 일부 실시양태에서, n은 1, x는 0, R<sup>2</sup>는 화학식 (II)의 아릴아미노 (여기서, R<sup>4</sup>는 아릴, H, R<sup>1</sup>, 알킬, 및 플루오로알킬로부터 선택됨)이다. R<sup>4</sup>는 바람직하게는 아틸이다.

[0100] 본 발명의 다른 면은 화학식 (IV)의 화합물을 포함하는 전자 디바이스이다.

[0101] <화학식 IV>



[0102]

[0103] 상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고, R<sup>1</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 플루오로헤테로아릴로부터 선택되고, 각 경우에 (즉, 공중합체) 상이할 수 있다. 일부 실시양태에서, R<sup>1</sup>은 아틸이다. R<sup>2</sup>는 H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬, 화학식 (II)의 아릴아미노, Cl, Br, I로부터 선택된다. R<sup>2</sup>는 바람직하게는 H이다. R<sup>3</sup>은 H 및 R<sup>1</sup>로부터 선택된다. R<sup>3</sup>은 바람직하게는 아틸이다. R<sup>4</sup>는 아릴, H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬로부터 선택된다. R<sup>4</sup>는 바

람직하게는 아틸이다. 일부 실시양태에서,  $R^2$ 는  $R^3$ 과 상이하다. 일부 실시양태에서,  $R^2$ 는 H이고  $R^3$ 는 아틸이다.

[0104] E는 O, S,  $(SiR^5R^6)_m$  (여기서, m 은 1 내지 20의 정수임),  $(CR^5R^6)_m$  (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, 각 경우에 상이할 수 있으며,  $R^5$  및  $R^6$ 은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 아틸, 알콕시, 아틸옥시, 플루오로알킬, 플루오로아틸, 플루오로알콕시, 및 플루오로아틸옥시로부터 선택되고,  $R^5$  및  $R^6$ 은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가  $(CR^5R^6)_m$ 이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우,  $R^5$  및  $R^6$  중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니다.

[0105] 상기 디바이스의 일부 실시양태에서, 화학식 (IV) 화합물 중 1개 이상의 방향족 고리는 H, F, 알킬, 아틸, 알콕시, 아틸옥시, 플루오로알킬, 플루오로아틸, 플루오로알콕시, 및 플루오로아틸옥시로부터 선택된 치환체를 갖는다. 일부 실시양태에서,  $R^1$ 은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다. 일부 실시양태에서, n은 1,  $R^2$ 는 H이고,  $R^3$ 은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다.

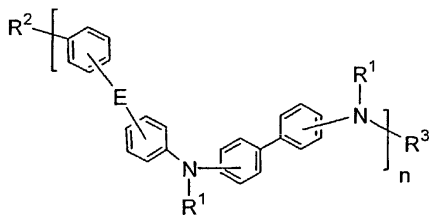
[0106] 본 발명의 다른 면은 전자 디바이스를 제조하는 방법이다. 상기 방법은 상기에 기재된 화학식 (1)을 갖는 화합물을 포함하는 액체를 제공하는 단계; 애노드를 제공하는 단계; 상기 화합물을 포함하는 상기 액체를 상기 애노드와 접촉시키는 단계; 상기 화합물로부터 상기 액체를 제거하여 정공 수송 필름을 제조하는 단계; 이미터 (emitter)를 제공하는 단계; 상기 이미터를 상기 정공 수송 필름에 인접하게 배치하는 단계; 전자 수송체를 제공하고 상기 전자 수송체를 상기 이미터에 인접하게 배치하는 단계; 및 캐소드를 상기 전자 수송체에 인접하게 제공하는 단계를 포함한다. 액체는 예를 들어 용액 또는 분산액일 수 있다.

[0107] 상기의 일반적인 설명 및 하기의 상세한 설명은 예시 및 설명일 뿐이고, 청구항에서 한정된 바와 같이, 본 발명을 제한하고자 함이 아니다.

**발명의 상세한 설명**

[0110] 본 발명은 신규 화합물, 상기 화합물을 제조하는 신규 방법, 상기 화합물을 함유하는 조성물 및 디바이스, 및 상기 화합물을 함유하는 디바이스를 제조하는 방법을 제공한다. 본 발명의 한 면은 화학식 (I)을 갖는 화합물을 포함하는 조성물이다:

[0111] <화학식 I>

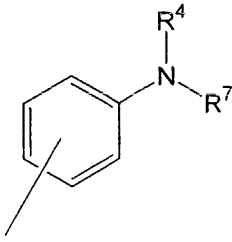


[0112]

[0113] 상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고  $R^1$ 은 아틸, 헤테로아틸, 플루오로아틸, 및 1개 이상의 불소 원자, 바람직하게는 7개 이하의 불소 원자로 치환된 플루오로헤테로아틸로부터 선택된다. 상기 화합물은 하나 이상의 기  $R^1$ 을 포함하고,  $R^1$ 은 각 경우에 상이할 수 있다. 예를 들어, 화학식 (I)로 나타낸 화합물은 단량체로서 작용할 수 있어서 상기 화합물로부터 공중합체가 형성될 수 있고, 상기 공중합체는 중합 단위로서, 하나 이상의 단위가 다른 단위에 있는  $R^1$ 과 상이한  $R^1$ 을 함유하는 화학식 (I)을 갖는 복수의 단위를 포함한다. 일부 실시양태에서,  $R^1$ 은 아틸이다.

[0114]  $R^3$ 은 H 및  $R^1$ 로부터 선택된다.  $R^2$ 는 H,  $R^1$ , 알킬, 플루오로알킬, Cl, Br, I 및 화학식 (II)의 아릴아미노 기로부터 선택된다.

[0115] <화학식 II>



[0116]

[0117] 상기 식 중, R<sup>4</sup>는 아릴, H, R<sup>1</sup>, 알킬, 및 플루오로알킬로부터 선택된다. R<sup>4</sup>는 바람직하게는 아릴이다. R<sup>7</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 1개 이상의 불소 원자, 바람직하게는 7개 이하의 불소 원자로 치환된 플루오로헤테로아릴로부터 선택된다.

[0118] 일부 실시양태에서, R<sup>2</sup>는 H이다. 일부 실시양태에서, R<sup>2</sup>는 R<sup>3</sup>과 상이하다. 일부 실시양태에서, R<sup>2</sup>는 H이고 R<sup>3</sup>은 아릴이다.

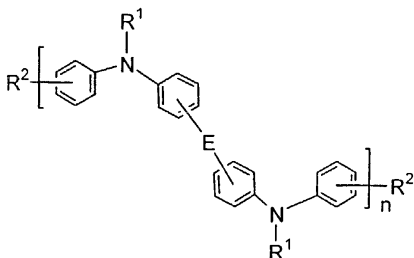
[0119] E는 O, S, (SiR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m 은 1 내지 20의 정수임), (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, 각 경우에 상이할 수 있으며, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택될 수 있고, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가 (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub>이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup> 중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니다.

[0120] 일부 실시양태에서, 화학식 (I)의 화합물 중 1개 이상의 방향족 고리는 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 독립적으로 선택된 하나 이상의 치환체를 갖는다. 추가 실시양태에서, 화학식 (I)의 화합물에서 2개의 이웃하는 방향족 고리 상의 치환체는 함께 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다. 추가 실시양태에서, 단일 고리 상의 인접한 치환체는 연결되어 융합 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다.

[0121] 일부 실시양태에서, R<sup>1</sup>은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다. 일부 실시양태에서, n은 1, R<sup>2</sup>는 H이고, R<sup>3</sup>은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다.

[0122] 한 실시양태는 화학식 (III)의 화합물을 포함하는 조성물이다.

[0123] <화학식 III>



[0124]

[0125] 상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고, R<sup>1</sup>은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 플루오로헤테로아릴로부터 선택된다. R<sup>1</sup>은 바람직하게는 아릴이고 각 경우에 (즉, 공중합체) 상이할 수 있다. R<sup>2</sup>는 H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬, 화학식 (II)의 아릴아미노, Cl, Br, 및 I로부터 선택된다. R<sup>2</sup>는 바람직하게는 H 또는 아릴이다. R<sup>4</sup>는 아릴, H, R<sup>1</sup>, 알킬, 플루오로알킬로부터 선택된다. R<sup>4</sup>는 바람직하게는 아릴이다.

[0126] E는 O, S, (SiR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m 은 1 내지 20의 정수임), (CR<sup>5</sup>R<sup>6</sup>)<sub>m</sub> (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의

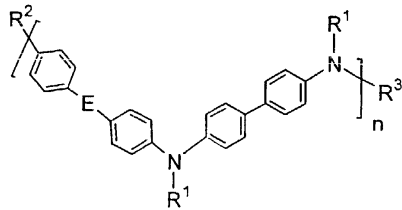
조합으로부터 선택되고, 각 경우에 상이할 수 있으며,  $R^5$  및  $R^6$ 은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택되고,  $R^5$  및  $R^6$ 은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가  $(CR^5R^6)_m$ 이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우,  $R^5$  및  $R^6$  중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니다.

[0127] 일부 실시양태에서, 화학식 (III)의 화합물 중 1개 이상의 방향족 고리는 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택된 치환체를 갖는다. 추가 실시양태에서, 화학식 (III)의 화합물에서 2개의 이웃하는 방향족 고리 상의 치환체는 함께 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다. 추가 실시양태에서, 단일 고리 상의 인접 치환체는 연결되어 융합 방향족 또는 비-방향족 고리를 형성할 수 있다.

[0128] 일부 실시양태에서,  $R^1$ 은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다. 일부 실시양태에서, n은 1, x는 0,  $R^2$ 는 화학식 (II)의 아릴아미노 (여기서,  $R^4$ 는 아릴, H,  $R^1$ , 알킬, 및 플루오로알킬로부터 선택됨)이다.  $R^4$ 는 바람직하게는 아릴이다.

[0129] 다른 실시양태의 다른 면은 화학식 (IV)의 화합물을 포함하는 신규 조성물이다.

[0130] <화학식 IV>



[0131] 상기 식 중, n은 1 이상의 정수이고,  $R^1$ 은 아릴, 헤테로아릴, 플루오로아릴, 및 플루오로헤테로아릴로부터 선택되고, 각 경우에 (즉, 공중합체) 상이할 수 있다. 일부 실시양태에서,  $R^1$ 은 아릴이다.  $R^2$ 는 H,  $R^1$ , 알킬, 플루오로알킬, 화학식 (II)의 아릴아미노, Cl, Br, I로부터 선택된다.  $R^2$ 는 바람직하게는 H이다.  $R^3$ 은 H 및  $R^1$ 로부터 선택된다.  $R^3$ 은 바람직하게는 아릴이다.  $R^4$ 는 아릴, H,  $R^1$ , 알킬, 플루오로알킬로부터 선택된다.  $R^4$ 는 바람직하게는 아릴이다. 일부 실시양태에서,  $R^2$ 는  $R^3$ 과 상이하다. 일부 실시양태에서,  $R^2$ 는 H이고  $R^3$ 은 아릴이다.

[0133] E는 0, S,  $(SiR^5R^6)_m$  (여기서, m 은 1 내지 20의 정수임),  $(CR^5R^6)_m$  (여기서, m은 1 내지 20의 정수임), 및 이의 조합으로부터 선택되고, 각 경우에 상이할 수 있으며,  $R^5$  및  $R^6$ 은 각각 독립적으로 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택되고,  $R^5$  및  $R^6$ 은 함께 비-방향족 고리를 형성할 수 있되, E가  $(CR^5R^6)_m$ 이고 n이 1보다 크고 m이 1인 경우,  $R^5$  및  $R^6$  중 하나 이상은 수소 또는 탄화수소가 아니다.

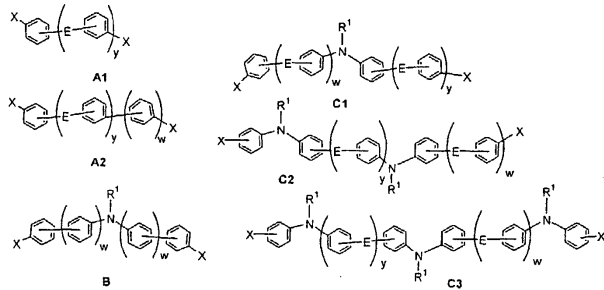
[0134] 일부 실시양태에서, 화학식 (IV) 화합물 중 1개 이상의 방향족 고리는 H, F, 알킬, 아릴, 알콕시, 아릴옥시, 플루오로알킬, 플루오로아릴, 플루오로알콕시, 및 플루오로아릴옥시로부터 선택된 치환체를 갖는다. 일부 실시양태에서,  $R^1$ 은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다. 일부 실시양태에서, n은 1,  $R^2$ 는 H이고,  $R^3$ 은 페닐, 1-나프틸, 및 2-나프틸로부터 선택된다.

[0135] 화학식 (I), (III) 및 (IV)에서 n의 실제적인 상한은 특정 용매 중 화합물의 목적하는 용해도 또는 용매의 종류에 의해 부분적으로 결정된다. n의 값이 증가하면 화합물의 분자량이 증가한다. 분자량의 증가는 일반적으로 특정 용매 중 화합물의 용해도를 감소시킨다고 예상된다. 또한, 한 실시양태에서, 주어진 용매 중 화합물이 실질적으로 불용성이 되는 n의 값은 부분적으로 화합물의 구조에 의존한다. 예를 들어, n이 약  $10^4$  보다 훨씬 더 작으면 복수의 페닐 기를 함유하는 화합물은 유기 용매 중에서 실질적으로 불용성이 될 수 있다. 다른 예로서,

소수의 페닐 기 및/또는 특정 관능기를 갖는 페닐 기를 함유하는 화합물은 n이 약  $10^4$  이상, 심지어  $10^5$  또는  $10^6$  일 경우에도 주어진 용매 중에서 가용성일 수 있다. n의 값 및 용매의 선택은 당업자의 기술범위 내에 있다.

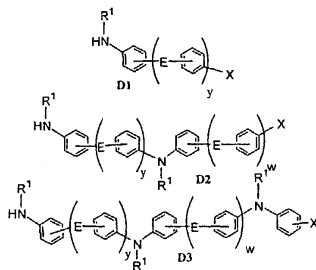
[0136] 또한 복수의 관능성 단량체를 조합하여 제조된 신규 공중합체를 포함하는 조성물이 제공된다. 상기 단량체는 중합되어 신규 공중합체를 형성할 수 있는, 본원에 개시된 화합물의 단위이다. 상기 단량체는 예를 들어 Pd 또는 Ni 촉매화 중합 방법을 사용하여 공중합될 수 있다. 상기 단량체는 하기의 3가지 부류로 분류될 수 있다.

군 1



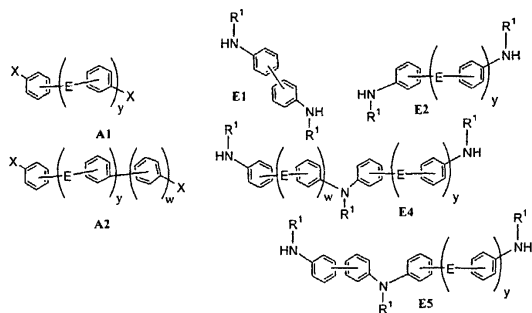
[0137]

군 2



[0138]

군 3



[0139]

[0140] 상기 식 중, y는 1 이상의 정수이고, w는 0 또는 1 이상의 정수이고, X는 Cl, Br, I, 붕산, 붕산 에스테르, 보란 또는 트리플레이트 기이고, X는 각 경우에 탄소-탄소 (군 1의 경우) 및 탄소-질소 (군 2 및 3의 경우) 결합이 형성될 수 있도록 상이할 수 있다.

[0141] 편의를 위해, 예시적인 단량체는 본원에서 군 1, 군 2 또는 군 3으로 분류되고, 군 내에서 예시적인 단량체는 예를 들어 군 1 내에서 하위군 A1, A2, B, C1, C2 및 C3와 같은 하위군으로 분류된다.

[0142] 공중합체는 각 군 1, 군 2, 및/또는 군 3 내의 각 하위군의 1종 이상의 단량체를 사용하여 제조될 수 있되, 단 하위군 A의 단량체만을 함유하는 공중합체 또는 하위군 B의 단량체만을 함유하는 공중합체는 수득될 수 없다. 군 3 내의 단량체로부터 제조된 공중합체는 1종 이상의 A1 또는 A2로 지정된 공단량체 및 하위군 E1, E2, E3, E4 및 E5로부터의 1종 이상의 공단량체를 함유한다. 예시적인 공중합체는 폴리 (A-코-B); 폴리 (A-코-B-코-C); 폴리 (A-코-C); 및 군 C 내의 2종 이상의 단량체를 포함하는 공중합체를 포함하고, 여기서, 예를 들어, "폴리 (A-코-B)"는 중합 단위로서, 군 A 내의 단량체 및 군 B 내의 단량체를 포함하는 공중합체를 나

타낸다. 상기 공중합체 중 단량체, 예를 들어 A 및 B는 동일 몰비 또는 상이한 몰비로 존재할 수 있다. 군 1 내의 단량체로부터 제조된 공중합체는 중합 동안 탄소-탄소 결합의 형성에 의해 제조된다. 군 2 및 군 3 내의 단량체로부터 제조된 공중합체는 중합 동안 탄소-질소 결합의 형성에 의해 제조된다.

[0143] 군 1로부터의 공중합체는 일반적으로 공지된 합성 방법을 사용하여 제조될 수 있다. 한 합성 방법에서, 문헌 [Yamamoto, Progress in Polymer Science, Vol. 17, p 1153 (1992)]에 기재된 바와 같이, 단량체 단위의 디할로 유도체가 화학양론적 양의 0가 니켈 화합물, 예를 들어 비스(1,5-시클로옥타디엔)니켈 (0)과 반응한다. 다른 방법에서, 문헌 [Colon et al., Journal of Polymer Science, Part A, Polymer chemistry, Edition, Vol. 28, p. 367 (1990)]에 기재된 바와 같이, 화학양론적 양의 2가의 니켈 이온을 0가의 니켈로 환원시킬 수 있는 물질의 존재하에서 단량체 단위의 디할로 유도체가 촉매량의 니켈 (II) 화합물과 반응한다. 적합한 물질은 아연, 마그네슘, 칼슘 및 리튬을 포함한다. 제 3 합성 방법에서, 미국 특허 5,962,631, 및 공개된 PCT 출원 WO 00/53565에 기재된 바와 같이, 한 단량체 단위의 디할로 유도체가 0가의 팔라듐 촉매, 예를 들어 테트라키스(트리페닐포스핀)Pd의 존재하에서 봉산, 봉산 에스테르, 및 보란으로부터 선택된 2개의 반응성 기를 갖는 다른 단량체 단위의 유도체와 반응한다.

[0144] 예를 들어, 군 2의 단량체를 함유하는 단일중합체 또는 공중합체는 구리, 니켈 또는 팔라듐 촉매의 존재하에서 반응성 1급 또는 2급 아민 및 반응성 아릴 할라이드를 갖는 단량체를 반응시켜 형성될 수 있다. 군 3의 단량체를 함유하는 단일중합체 또는 공중합체는 구리, 니켈 또는 팔라듐 촉매의 존재하에서 1종 이상의 디할로 단량체 유도체를 1종 이상의 디아미노 (1급 또는 2급) 단량체 단위로 반응시켜 제조될 수 있다. Pd-촉매 아민화 반응의 전형적인 조건은 문헌 [Sadighi, J. P.; Singer, R. A.; Buchwald, S. L. J. Am. Chem. Soc. 1998, 120, 4960; Wolfe, J. P.; Tomori, H.; Sadighi, J. P.; Yin, J.; Buchwald, S. L. J., Org. Chem. 200, 65, 1158; Hartwig, J. F.; Modern Arene Chemistry 2002, 107-168, Astruc, D., Editor, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Germany]에 기재되어 있다. Ni-촉매 아민화 반응의 전형적인 조건은 문헌 [Desmarets, C.; Schneider, R.; Fort, Y. Tetrahedron, 2001, 57, 6054.; Wolfe, J. P.; Buchwald, S. L., J. Am. Chem. Soc. 1997, 119, 4960]에 기재되어 있다. Cu-촉매 아민화 반응의 전형적인 조건은 문헌 [Klapars, A.; Antilla, J. C.; Huang, X.; Buchwald, S. L., J. Am. Chem. Soc. 2001, 123, 7727]에 기재되어 있다.

[0145] 본원에 개시된 화합물의 올리고머 (이량체 포함), 및 중합체는 예를 들어 NPD 및 TPD에 비해서 개선된 열 안정성을 갖는다. 예를 들어, R<sup>1</sup>이 1-나프틸이고 E가 C(CF<sub>3</sub>)<sub>2</sub>인 화학식 IV의 화합물은 바람직하게는 약 240°C의 T<sub>g</sub>를 갖는다. 상기 화합물은 전형적으로는 약 50°C 이상, 바람직하게는 약 100°C 이상의 T<sub>g</sub>를 갖는다.

[0146] 화학식 I 및 IV의 조성물은 당업자에게 공지된 탄소-질소 결합 형성 방법을 통해 제조될 수 있다. 예를 들어, 호모- 또는 헤테로-중합체는 구리, 니켈 또는 팔라듐 촉매 존재하에서 1종 이상의 디할로 단량체 유도체를 동일 몰량의 1종 이상의 디아미노 (1급 또는 2급) 단량체 단위로 반응시켜 제조될 수 있다. 별법으로, 반응성 기로서 아민 및 할라이드를 함유하는 1종 이상의 단량체가 사용될 수 있다. Pd-촉매 아민화 반응의 전형적인 조건은 문헌 [Sadighi, J. P.; Singer, R. A.; Buchwald, S. L. J. Am. Chem. Soc. 1998, 120, 4960.; Wolfe, J. P.; Tomori, H.; Sadighi, J. P.; Yin, J.; Buchwald, S. L. J. Org. Chem. 200, 65, 1158.; Hartwig, J. F. Modern Arene Chemistry 2002, 107-168, Editor: Astruc, D., Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Germany]에 기재되어 있다. Ni-촉매 아민화 반응의 전형적인 조건은 문헌 [Desmarets, C.; Schneider, R.; Fort, Y. Tetrahedron, 2001, 57, 6054.; Wolfe, J. P.; Buchwald, S. L. J. Am. Chem. Soc. 1997, 119, 4960]에 기재되어 있다. Cu-촉매 아민화 반응의 전형적인 조건은 문헌 [Klapars, A.; Antilla, J. C.; Huang, X.; Buchwald, S. L. J. Am. Chem. Soc. 2001, 123, 7727]에 기재되어 있다.

[0147] 예를 들어, 군 3의 디아민 단량체 E1, 예를 들어 N,N'-디페닐벤지딘은 적합한 염기, 예를 들어 NaO<sup>t</sup>Bu, 촉매량 (1 당량 미만)의 적합한 팔라듐 화합물, 예를 들어 트리스(디벤질리덴아세톤) 디팔라듐, 및 적합한 리간드, 예를 들어 P<sup>t</sup>(Bu)<sub>3</sub>의 존재하에서, 동일 몰량의 디할라이드 단량체 A1, 예를 들어 4,4'-브로모페닐이소프로필리덴과 반응한다. 중합은 22°C 내지 150°C에서 24 내지 92 시간 동안 수행된다. 이어서 생성된 중합체는 말단캡핑 (endcapping) 기, 예를 들어 브로모벤젠으로 처리되고 추가 24 내지 48 시간 동안 더 반응하여 화학식 IV (식 중, R<sup>1</sup>은 페닐, E는 C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>이고, R<sup>2</sup> = R<sup>3</sup>은 페닐임)의 중합체를 생성한다.

[0148] 다른 예에서, 군 2의 단량체 D1, 예를 들어 4-(N-페닐아민)-4'-(브로모페닐) 이소프로필리덴은 앞서 기재된 조

건을 사용하여 중합되어 화학식 IV ( $R^1$ 은 페닐, E는  $C(CH_3)_2$  이고  $R^2 = R^3$ 은 페닐임)의 중합체를 생성할 수 있다.

- [0149] 화학식 III의 화합물은 당업자에게 공지된 탄소-탄소 결합 형성 방법을 통해 제조될 수 있다. 한 방법에서, 문헌 [Yamamoto, Progress in Polymer Science, Vol. 17, p 1153 (1992)]에 기재된 바와 같이, 단량체 단위의 디할로 유도체는 화학양론적 양의 0가 니켈 화합물, 예를 들어 비스(1,5-시클로옥타디엔)니켈(0)과 반응한다. 제 2 방법에서, 문헌 [Colon et al., Journal of Polymer Science, Part A, Polymer chemistry Edition, Vol. 28, p. 367 (1990)]에 기재된 바와 같이, 단량체 단위의 디할로 유도체는 화학양론적 양의 2가 니켈 이온을 0가 니켈로 환원시킬 수 있는 물질의 존재하에서 촉매량의 Ni(II) 화합물과 반응한다. 적합한 물질은 아연, 마그네슘, 갈륨 및 리튬을 포함한다. 제 3 합성 방법에서, 미국 특허 5,962, 631, 및 공개 PCT 출원 WO 00/53565에 기재된 바와 같이, 한 단량체 단위의 디할로 유도체는 0가 팔라듐 촉매, 예를 들어 테트라키스(트리페닐포스핀)Pd의 존재하에서, 봉산, 봉산에스테르, 및 보란으로부터 선택된 2개의 반응성 기를 갖는 다른 단량체 단위의 유도체와 반응한다.
- [0150] 예를 들어, 군 1의 단량체 C2의 중합체 조성물, 예를 들어 4,4'-N,N'-[(1-나프틸)(4-클로로페닐)]-(헥사플루오로이소프로필리덴)은 22°C 내지 150°C에서 24 내지 92시간 동안 화학양론적 양의 0가 니켈 화합물, 예를 들어 비스(1,5-시클로옥타디엔)니켈(0)과 반응한다.
- [0151] 한 실시양태에서, OLED 디바이스를 비롯한 전자 디바이스를 제조하는 경우, 화합물은 투명한 애노드, 예를 들어 인듐-도핑 주석 산화물 (ITO) 상에 침착되어 필름을 형성한다. 생성된 필름의 품질은 매끈함 및 결합 밀도에 대한 육안/현미경 검사에 의해 표면상으로 평가될 수 있다. OLED에 관련해서, 육안으로 관찰된 결합이 최소인 것이 바람직하다. 또한, 필름 품질은 예를 들어 광학 엘립소미터(ellipsometer) 또는 기계적 프로필로미터(profilometer)를 사용하여 필름의 몇개의 분리된 영역에 걸쳐 필름 두께를 평가하여 측정될 수 있고, 필름은 필름의 상이한 영역에서 측정된 두께가 실질적으로 동일한 것이 바람직하다.
- [0152] 전자 디바이스를 제조하는 경우, 화합물은 액체 형태, 예를 들어 분산액 또는 용액으로 사용될 수 있다. 전자 디바이스를 제조하는 예시 방법은 상기에 기재된 화학식 (I)을 갖는 화합물을 포함하는 액체를 제공하는 단계; 애노드를 제공하는 단계; 상기 화합물을 포함하는 상기 액체를 상기 애노드와 접촉시키는 단계; 상기 액체를 상기 화합물로부터 제거하여 정공 수송 필름을 제조하는 단계; 이미터를 제공하는 단계; 상기 이미터를 상기 정공 수송 필름에 인접하게 배치하는 단계; 전자 수송체를 제공하고 상기 전자 수송체를 상기 이미터에 인접하게 배치하는 단계; 및 캐소드를 상기 전자 수송체에 인접하게 제공하는 단계를 포함한다.
- [0153] 액체는 바람직하게는 화합물에 대한 용매이다. 특정 화합물 또는 관련된 부류의 화합물에 대해 바람직한 용매는 당업자에 의해 쉽게 결정될 수 있다. 일부 응용분야를 위해, 화합물은 비수성 용매 중에 용해되는 것이 바람직하다. 상기 비수성 용매는 비교적 극성 용매, 예를 들어  $C_1$  내지  $C_{20}$  알콜, 에테르, 및 산 에스테르일 수 있거나 또는 비교적 비극성 용매, 예를 들어  $C_1$  내지  $C_{12}$  알칸 또는 방향족일 수 있다.
- [0154] 본원에 기대된 용액 또는 분산액으로서, 신규 화합물을 포함하는 액체 조성물을 제조하는데 사용되는 다른 적합한 액체는 비제한적으로, 염화 탄화수소 (예를 들어 메틸렌 클로라이드, 클로로포름, 클로로벤젠), 방향족 탄화수소 (예를 들어 트리플루오로톨루엔을 비롯한, 치환 및 비-치환된 톨루엔 및 크실렌), 극성 용매 (예를 들어 테트라히드로푸란 (THF), N-메틸 피롤리돈), 에스테르 (예를 들어 에틸아세테이트), 알콜 (이소프로판올), 케톤 (시클로펜타논) 및 이의 혼합물을 포함한다.
- [0155] 본원에 개시된 화합물은 트리아릴아민 유도체이고, 이량체, 올리고머 또는 중합체, 특히 이량체의 형태일 수 있다. 화합물은 더 작은 분자, 예를 들어 트리아릴아민의 전자적 장점을 중합체 화합물의 용액 가공성, 필름 형성능, 가용성, 및 열안정성과 함께 제공할 수 있다. 특히, 화합물은 용액으로 제공되고 용액 공정에서 사용하여 전자 디바이스를 제조할 수 있다는 것이 발견되었다.
- [0156] 한 실시양태에서, 화합물이 유용한 전자 디바이스는 OLED 디바이스이다. 증착 방법을 사용하여 OLED를 제조하는데 정공 수송 물질로서 통상적으로 사용되는 공지 화합물, 예를 들어 NPД (N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐-벤지딘) 및 TPD (4,4'-비스[N-(3-메틸페닐)-N-페닐아미노]비페닐)에 비해, 본원 화합물은 개선된 열안정성을 갖고 통상적인 용매 중에서 선택적으로 용해될 수 있다. 선택적으로 용해된다는 것은 화합물이 일부 용매에서는 가용성 또는 실질적으로 가용성이고 일부 용매에서는 불용성 또는 실질적으로 불용성이 될 수 있음을 의미한다. 예를 들어, 화합물을 전자 디바이스를 제조하는데 사용할 경우, 화합물이 가용성 또는 실질적으로 가용

성인 용매 중에 화합물을 제공하고, 화합물이 불용성 또는 실질적으로 불용성인 다른 용매를 그 위에 침착시키는 것이 종종 바람직하다. 가용화는 화합물 상의 치환기 변형에 의해 제공되거나 또는 증가될 수 있다.

[0157] 한 실시양태에서, 화합물은 화합물이 실질적으로 가용성인 용매 중에 용해된다. 이어서 용액은 임의의 몇몇 기술, 예를 들어 스핀-침착, 잉크젯 등에 의해 박막으로 형성되고 건조된다. 이어서 용매를 증발시켜 형성된 생성된 필름은 질소 분위기 또는 진공에서 용매의 비점 이상을 포함하는 승온에서 베이킹에 의해 건조된다. 이어서 필름은 방출층 물질 (방출 물질은 화합물이 실질적으로 불용성인 용매 중에 용해됨)을 함유하는 제 2 용액을 예비-형성된 화합물 필름의 상부에 침착시킴으로써 추가로 가공된다. "실질적으로 불용성"이라는 것은 용매 1 ml 중에 화합물이 약 5 mg 미만 용해되는 것을 의미한다. 그러나, 5 mg 초과 또는 미만의 용해도가 사용될 수 있고 일부 응용분야를 위해 바람직할 수 있다. 예를 들어, 10 mg/mL 이하의 적당한 용해도는 본 발명의 HTM 중합체와 방출층 물질 사이에 블러링(blurring)되거나 또는 등급화(graded) 계면을 생성할 수 있다. 상기 블러링은 관련 물질의 성질에 따라 불리하거나 또는 유리한 효과를 줄 수 있다. 계면의 블러링은 계면을 통한 개선된 전하 수송 및 실질적으로 개선된 디바이스 성능 또는 수명을 초래할 수 있다.

[0158] 당업자에게 인식되어 있는 바와 같이, 화합물의 용해도는 부분적으로 화합물 내의 치환기에 의해 결정될 수 있다. 특히, 본원에서 개시된 화합물에서, 화합물 중 기 "E"의 성질은 특정 용매 중 화합물의 용해도 또는 용매 부류를 조절하기 위해 변화될 수 있다. 그러므로, 기 "E"의 성질을 변화시킴으로써, 화합물은 물 또는 임의의 주어진 유기 비-수성 용매 중에서 더 가용성 또는 덜 가용성이도록 개질될 수 있다.

[0159] 또한 바람직하게, 전자 디바이스를 제조하기 위해, 화합물은 전형적으로 투명한 애노드, 예를 들어 ITO (인듐 도핑 주석 산화물)인 전극 상에 방출층 필름을 침착시키는데 사용될 수 있는 용매에서 비교적 낮은 용해도, 예를 들어 약 5 mg/mL 미만, 심지어 약 2 mg/mL 이하의 용해도를 갖는다.

[0160] 본 발명은 또한 정공 수송층으로서, 본원에서 개시된 조성물을 함유하는 1개 이상의 층을 포함하는 전자 디바이스에 관한 것이다. 상기 조성물은 광활성층과 전극 사이에 위치한 별도의 층에 존재할 수 있다. 별법으로, 유기 전자 디바이스의 광활성은 상기 조성물을 함유할 수 있다. 본원에서 개시된 조성물을 함유할 수 있는 전자 디바이스의 예는 도 1에 제시된다. 디바이스 (100)은 애노드 층 (110) 및 캐소드 층 (160)을 갖는다. 정공 수송 물질을 포함하는 층 (120)은 애노드에 인접한다. 전자 수송 및/또는 켄칭 방지 물질을 포함하는 층 (140)은 캐소드에 인접한다. 정공 수송층과 전자 수송 및/또는 켄칭 방지층 사이에 광활성층 (130)이 있다. 예시된 실시양태에서, 디바이스는 캐소드 다음에 임의의 추가 수송층 (150)을 갖는다. 층 (120), (130), (140), 및 (150)은 개별적 또는 집합적으로 활성층을 나타낸다.

[0161] 디바이스 (100)의 적용분야에 따라서, 광활성층 (130)은 인가된 전압 (예를 들어 발광 다이오드 또는 발광 전기 화학 전지에서)에 의해 활성화되는 발광층, 복사 에너지에 반응하여 인가된 바이어스 전압 (예를 들어 광검출기) 존재 또는 부재하에서 신호를 발생하는 물질층일 수 있다. 광검출기의 예는 문헌 [Markus, John, Electronics and Nucleonics Dictionary, 470 and 476 (McGraw-Hill, Inc. 1966)]에 기재되어 있는 광전도성 전지, 포토레지스터, 포토스위치, 포토트랜지스터, 및 포토튜브, 및 광기전력 전지를 포함한다.

[0162] 본원에서 개시된 화합물은 정공 수송층 (120)에서, 및 광활성층 (130)에서 전하 전도 호스트로서 특히 유용하다. 디바이스의 다른 층은 이러한 층에서 유용한 것으로 공지된 임의의 물질로 제조될 수 있다. 애노드 (110)은 양전하 캐리어의 주입에 특히 효율적인 전극이다. 이것은 예를 들어 금속, 혼합 금속, 합금, 금속 산화물 또는 혼합 금속 산화물, 전도성 중합체, 또는 이의 조합물 또는 이의 혼합물로 제조될 수 있다. 적합한 금속은 11족 금속, 4, 5 및 6족 금속 및 8-10 족 전이 금속을 포함한다. 애노드가 광-투과성이면, 12, 13 및 14 족 금속의 혼합-금속 산화물, 예를 들어 인듐-주석-산화물이 일반적으로 사용된다. 애노드 (110)은 또한 유기 물질, 예를 들어, 문헌 ["Flexible light-emitting diodes made from soluble conducting polymer," Nature vol. 357, pp 477-479 (11 June 1992)]에 기재된 폴리아닐린을 포함할 수 있다. 1개 이상의 애노드 및 캐소드는 바람직하게는 적어도 부분적으로 투명하여 발생된 광을 관찰할 수 있다.

[0163] 광활성층 (130)의 예는 형광 및 인광 물질 (유기-금속 착물 및 공액 중합체 포함)을 비롯한 공지된 모든 전기발광 물질을 포함한다. 유기금속 전기발광 화합물이 바람직하다. 가장 바람직한 화합물은 시클로메탈화 이리듐 및 백금 전기 발광 화합물 및 이의 혼합물을 포함한다. 페닐피리딘, 페닐퀴놀린, 또는 페닐피리미딘 리간드와 이리듐의 착물은 페트로프(Petrov) 등의 공개 PCT 출원 WO 02/02714에서 전기발광 화합물로서 개시되어 있다. 다른 유기금속 착물은 예를 들어 공개 출원 US 2001/0019782, EP 1191612, WO 02/15645, 및 EP 1191614에 기재되어 있다. 이리듐의 금속성 착물로 도핑된 폴리비닐 카르바졸(PVK)의 활성층을 갖는 전기발광 디바이스는 공개 PCT 출원 WO 00/70655 및 WO 01/41512에서 부로우스(Burrows) 및 톰슨(Tompson)에 의해 기재되어 있다. 전

하 운반 호스트 물질 및 인광성 백금 착물을 포함하는 전기발광 방출층은 톰슨 등의 미국 특허 6,303,238, 브래들리(Bradley) 등의 문헌 [Synth. Met. (2001), 116 (1-3), 379-383], 및 캠프벨 등의 문헌 [Phys. Rev. B, Vol. 65 085210]에 기재되어 있다. 몇가지 적합한 이리듐 착물의 예가 도 6에서 화학식 IV(a) 내지 IV(e)로서 주어진다. 유사한 테트라테이트 백금 착물도 사용될 수 있다. 상기 전기발광 착물은 단독으로 사용되거나 또는 상기에 기재된 바와 같이 전하-운반 호스트 내에 도핑될 수 있다. 정공 수송층 (120), 전자 수송층 (140/150)에 유용한 것에 추가로, 화합물은 광활성층 (130) 또는 광활성층의 일부에서 방출성 도핑제에 대한 전하 수송 호스트로서 작용할 수도 있다.

[0164] 층 (140) 및/또는 층 (150)에서 사용될 수 있는 전자 수송 물질의 예는 금속 킬레이트화 옥시노이드 화합물, 예를 들어 트리스(8-히드록시퀴놀레이토)알루미늄 (Alq3); 및 아졸 화합물, 예를 들어 2-(4-비페닐일)-5-(4-t-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸 (PBD) 및 3-(4-비페닐일)-4-페닐-5-(4-t-부틸페닐)-1,2,4-트리아졸 (TAZ), 및 이의 혼합물을 포함한다.

[0165] 캐소드 (160)은 전자 또는 음전하 캐리어의 주입에 특히 효과적인 전극이다. 캐소드는 애노드보다 더 낮은 일함수를 갖는 임의의 금속 또는 비금속일 수 있다. 캐소드를 위한 물질은 희토류 원소 및 란탄족, 및 악티늄족을 비롯하여, 1족의 알칼리금속 (예를 들어 Li, Cs), 2족의 알칼리토금속, 12족 금속으로부터 선택될 수 있다. 알루미늄, 인듐, 갈륨, 바륨, 사마륨 및 마그네슘과 같은 물질 뿐만 아니라 이의 조합이 사용될 수 있다. Li-함유 유기금속 화합물, LiF, 및 Li<sub>2</sub>O도 유기 층과 캐소드 층 상이에 침착되어 작동 전압을 낮출 수 있다.

[0166] 유기 전자 디바이스에서 다른 층을 갖는 것은 공지이다. 예를 들어, 양전하 수송 및/또는 층의 밴드-갭 매칭을 촉진하거나, 또는 보호 층으로서 기능을 하기 위해 애노드 (10)과 정공 수송층 (120) 사이에 층 (도시안됨)이 존재할 수 있다. 당업계에 공지된 층이 사용될 수 있다. 추가로, 상기에 기재된 임의의 층은 2개 이상의 층으로 제조될 수 있다. 별법으로, 애노드 층 (110), 정공 수송층 (120), 전자 수송층 (140) 및 (150), 및 캐소드 층 (160)의 일부 또는 전부는 전하 캐리어 수송 효율을 증가시키기 위해 표면 처리될 수 있다. 각 성분 층을 위한 물질의 선택은 바람직하게는 높은 디바이스 효율과 디바이스 작동 수명을 갖는 디바이스를 제공하려는 목적의 균형에 의해 결정된다.

[0167] 본원에서 기재된 신규 화합물 및 조성물을 포함하는 1개 이상의 층 갖는 것으로부터 이익을 얻을 수 있는 다른 유기 전자 디바이스의 예는 (1) 전기 에너지를 복사에너지로 전환하는 디바이스 (예를 들어, 발광 다이오드, 발광 다이오드 디스플레이, 또는 다이오드 레이저), (2) 전자 프로세스를 통해 신호를 검출하는 디바이스 (예를 들어, 광검출기, 광전도성 전지, 포토레지스터, 포토스위치, 포토트랜지스터, 포토튜브), IR 검출기, (3) 복사 에너지를 전기 에너지로 전환하는 디바이스 (예를 들어, 광기전력 디바이스, 태양 전지), 및 (4) 1개 이상의 유기 반도체 층을 포함하는 하나 이상의 전자 성분을 포함하는 디바이스 (예를 들어, 트랜지스터 또는 다이오드)를 포함한다.

[0168] 각 기능성 층은 1개 이상의 층으로 구성될 수 있음을 이해해야 한다.

[0169] 디바이스는 적합한 기판 상에 개별 층을 순차적으로 증착하는 것을 비롯한, 다양한 기술을 사용하여 제조될 수 있다. 기판, 예를 들어 유리 및 중합체 필름이 사용될 수 있다. 통상적인 증착 기술, 예를 들어 열 증발, 화학적 증착 등이 사용될 수 있다. 별법으로, 유기 층은 비제한적으로, 스핀-코팅, 딥-코팅, 롤-투-롤 기술, 잉크-젯 인쇄, 스크린-인쇄, 그라비아 인쇄 등을 비롯한, 임의의 통상적인 코팅 또는 인쇄 기술을 사용하여, 적합한 용매 중 용액 또는 분산액으로 적용될 수 있다. 개별 층의 증착 및 용액 코팅의 조합이 사용될 수 있다. 일반적으로, 상이한 층은 하기 범위의 두께를 갖는다; 애노드 (110), 500-5000 Å, 바람직하게는 1000-2000 Å; 정공 수송층 (120), 50-2000 Å, 바람직하게는 200-1000 Å; 광활성층 (130), 10-2000 Å, 바람직하게는 100-1000 Å; 전자 수송층 (140) 및 (150), 50-2000 Å, 바람직하게는 100-1000 Å; 캐소드 (160), 200-10000 Å, 바람직하게는 300-5000 Å. 디바이스에서 전자-정공 재조합 영역의 위치 및 이로 인한 디바이스의 방출 스펙트럼은 각 층의 상대적인 두께에 의해 영향을 받을 수 있다. 그러므로 전자-수송층의 두께는 전자-정공 재조합 구역이 발광 층 내에 있도록 선택되어야 한다. 바람직한 층 두께의 비율은 사용되는 물질의 적합한 성질에 의존할 것이다.

[0170] 본원에서 사용되는 "전하 수송 조성물"이라는 용어는 전극으로부터 전하를 수용하여 비교적 고효율 및 적은 전하 손실로 물질의 두께를 통한 전하의 이동을 촉진할 수 있는 물질을 의미하는 것이다. 정공 수송 조성물은 애노드로부터 양전하를 수용하여 이것을 수송할 수 있다. 전자 수송 조성물은 캐소드로부터 음전하를 수용하여 이것을 수송할 수 있다.

- [0171] 단독으로 사용되어 본원에서 개시되고 청구되는 특정 화학식의 조성물을 나타내는 "조성물"이라는 용어는 화합물, 단량체, 이량체, 올리고머 및 이의 중합체 뿐만 아니라 용액, 분산액, 액체 및 고체 혼합물을 포함하는 것으로 해석된다.
- [0172] "켄칭 방지 조성물"이라는 용어는 광활성층의 활성 상태에서부터 인접층으로의 에너지의 전달 및 전자의 전달을 방해하거나 지연시키거나 감소시키는 물질을 의미하는 것이다.
- [0173] "광활성"이라는 용어는 전기발광, 발광 및/또는 감광성을 나타내는 임의의 물질을 칭한다.
- [0174] "기"라는 용어는 화합물의 부분, 예를 들어 유기 화합물의 치환체를 의미한다. "헤테로"라는 접두사는 1개 이상의 탄소 원자가 상이한 원자로 대체됨을 나타낸다.
- [0175] "알킬"이라는 용어는 하나의 부착점을 갖는 지방족 탄화수소로부터 유래된, 비치환 또는 치환될 수 있는 기를 의미한다. "헤테로알킬"이라는 용어는 1개 이상의 헤테로원자 및 하나의 부착점을 갖는 지방족 탄화수소로부터 유래된 치환 또는 비치환될 수 있는 기를 의미한다.
- [0176] "알킬렌"이라는 용어는 지방족 탄화수소로부터 유래되고 2개 이상의 부착점을 갖는 기를 의미한다. "헤테로알킬렌"이라는 용어는 1개 이상의 헤테로원자를 갖고 2개 이상의 부착점을 갖는 지방족 탄화수소로부터 유래된 기를 의미한다.
- [0177] "알케닐"이라는 용어는 1개 이상의 탄소-탄소 이중 결합을 갖고 1개의 부착점을 갖는 탄화수소로부터 유래된, 비치환 또는 치환될 수 있는 기를 의미한다.
- [0178] "알킬닐"이라는 용어는 1개 이상의 탄소-탄소 삼중 결합을 갖고 하나의 부착점을 갖는 탄화수소로부터 유래된, 비치환 또는 치환될 수 있는 기를 의미한다. "알케닐렌"이라는 용어는 1개 이상의 탄소-탄소 이중 결합을 갖고 2개 이상의 부착점을 갖는 탄화수소로부터 유래된, 비치환 또는 치환될 수 있는 기를 의미한다. "알킬닐렌"이라는 용어는 1개 이상의 탄소-탄소 삼중 결합을 갖고 2개 이상의 부착점을 갖는 탄화수소로부터 유래된, 비치환 또는 치환될 수 있는 기를 의미한다.
- [0179] "헤테로알케닐", "헤테로알케닐렌", "헤테로알킬닐" 및 "헤테로알킬닐렌"이라는 용어는 1개 이상의 헤테로원자를 갖는 유사 기를 의미한다.
- [0180] "아릴"이라는 용어는 1개의 부착점을 갖는 방향족 탄화수소로부터 유래된, 치환 또는 비치환될 수 있는 기를 의미한다. "헤테로아릴"이라는 용어는 1개 이상의 헤테로원자를 갖고 1개의 부착점을 갖는 방향족 기로부터 유래된, 치환 또는 비치환될 수 있는 기를 의미한다.
- [0181] "아릴알킬렌"이라는 용어는 아릴 치환체를 갖는 알킬 기로부터 유래된, 추가로 치환 또는 비치환될 수 있는 기를 의미한다. "헤테로아릴알킬렌"이라는 용어는 헤테로아릴 치환체를 갖는 알킬 기로부터 유래된, 치환 또는 비치환될 수 있는 기를 의미한다.
- [0182] "아릴렌"이라는 용어는 2개의 부착점을 갖는 방향족 탄화수소로부터 유래된, 치환 또는 비치환될 수 있는 기를 의미한다. "헤테로아릴렌"이라는 용어는 1개 이상의 헤테로원자를 갖고 2개의 부착점을 갖는 방향족 기로부터 유래된, 치환 또는 비치환될 수 있는 기를 의미한다.
- [0183] "아릴렌알킬렌"이라는 용어는 아릴 및 알킬기를 갖고 아릴 기 상에 1개의 부착점 및 알킬 기 상에 1개의 부착점을 갖는 기를 의미한다. "헤테로아릴렌알킬렌"이라는 용어는 아릴 및 알킬 기를 갖고 아릴 기 상에 1개의 부착점 및 알킬 기 상에 1개의 부착점을 갖고, 1개 이상의 헤테로 원자가 존재하는 기를 의미한다.
- [0184] 다른 언급이 없으면, 모든 기는 비치환 또는 치환될 수 있다. "인접하는"이라는 어구가 디바이스에서 층을 나타내는데 사용되는 경우, 1개의 층은 다른 층의 바로 옆에 있다는 것을 필수적으로 의미하지는 않는다. 다른 한편, "인접 R 기"라는 어구는 화학식에서 서로 옆에 있는 R 기를 나타내는데 사용된다 (즉, 결합에 의해 연결된 원자 상에 있는 R 기).
- [0185] "화합물"이라는 용어는 물리적 수단에 의해 분리될 수 없는 원자로 이루어진 분자로 구성된 전기적 비하전 물질을 의미한다.
- [0186] "중합체"라는 용어는 올리고머류를 포함하고 2개 이상의 단량체 단위를 갖는 물질을 포함하는 것을 의도한다. 추가로, IUPAC 번호매김 체계 (주기율표의 측은 왼쪽에서 오른쪽으로 1-18로 번호매김)이 사용된다 (문헌 [CRC Handbook of Chemistry and Physics, 81<sup>st</sup> Edition, 2000]).

[0187] 본원에서 사용되는 "용액 가공"은 액체 매체로부터의 침착을 포함하는 공정을 의미한다. 액체 매체는 용액, 분산액, 유탁액 또는 다른 형태일 수 있다.

[0188] "층" 또는 "필름"이라는 용어는 목적하는 영역을 피복하는 코팅을 나타낸다. 상기 영역은 전체 디스플레이 만큼 넓거나, 또는 단일 서브-픽셀과 같은 특정 기능 영역 만큼 작을 수 있다. 필름은 임의의 통상적인 침착 기술에 의해 형성될 수 있다. 전형적인 액체 침착 기술은 비제한적으로, 연속 침착 기술, 예를 들어 스핀 코팅, 그라비아 코팅, 커튼 코팅, 딥 코팅, 슬롯-다이 코팅, 분무-코팅, 및 연속 노즐 코팅; 불연속 액체 침착 기술, 예를 들어 잉크 젯 인쇄, 그라비아 인쇄, 및 스크린 인쇄를 포함한다.

[0189] 본원에서 사용되는 "포함한다(comprises, includes)", "포함하는(comprising)", "비롯한(including)", "갖는다(has)", "갖는(having)"이라는 용어 또는 이의 다른 변형은 비-배타적 내포를 포괄하는 의도이다. 예를 들어, 상기 리스트의 요소를 포함하는 공정, 방법, 물질 또는 장치는 이들 요소 만으로 제한되지 않고 상기 공정, 방법, 물질, 또는 장치로 명시적으로 열거되지 않거나 고유한 다른 요소를 포함할 수 있다. 또한, 반대로 명시적으로 언급되지 않으면, "또는(or)"은 내포적 또는 배타적 또는을 나타낸다. 예를 들어, 조건 A 또는 B는 하기 중 임의의 하나를 만족한다; A가 참 (또는 존재)이고 B가 거짓 (또는 비존재)임, A가 거짓(또는 비존재)이고 B가 참 (또는 존재)임, 및 A와 B 모두 참 (또는 존재)임.

[0190] 삭제

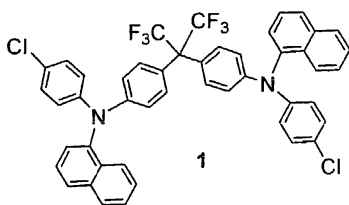
[0191] 달리 정의되지 않으면, 본원에서 사용되는 모든 기술적 및 과학적 용어는 당업자에게 통상적으로 이해되는 유사한 의미를 갖는다. 달리 정의되지 않으면, 도면의 모든 문자 기호는 원소 기호를 갖는 원자를 나타낸다. 본원에 기재된 것과 유사하거나 동일한 방법 및 물질이 본 발명의 실시 또는 시험에 사용될 수 있지만, 적합한 방법 및 물질은 하기에 기재된다.

[0192] 본원에 언급된 모든 출판물, 특허 출원, 특허 및 다른 문헌은 이의 전문이 참고로 도입되어 있다. 갈등의 경우, 정의를 비롯한 본 명세서는 조절될 것이다. 추가로, 물질, 방법, 및 실시예는 단지 예시이고 본 발명의 제한을 의도하지 않는다.

**실시예**

[0193] 하기 실시예는 본 발명의 특정 특징 및 이점을 예시한다. 이것은 본 발명의 예시이지, 이를 제한하고자 함이 아니다. 달리 표시되지 않는 한, 모든 %는 중량%이다.

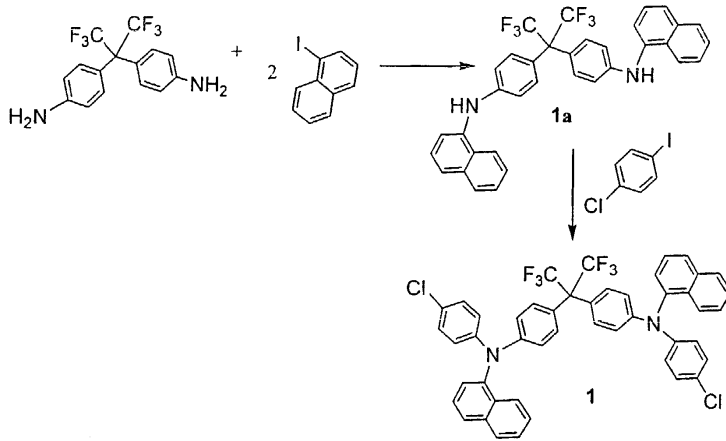
[0194] **실시예 1. 단량체 1로부터 수득되는 중합체**



[0195]

[0196] 단량체 1의 합성

[0197] 화합물 1의 합성 경로를 하기에 나타내었다.



[0198]

[0199] 질소 분위기 하에서 모든 반응을 수행하였고 반응 플라스크는 실내등으로부터 격리시켰다. 4,4'-(헥사플루오로이소프로필리덴)디아닐린 (15.0 g), 1-요오도나프탈렌 (22.9 g) 및 Na<sup>t</sup>Bu (12.95 g)의 톨루엔 (무수, 300 mL) 용액에 트리스(디벤질리덴아세톤) 디팔라듐 (4.12 g) 및 P<sup>t</sup>Bu<sub>3</sub> (2.28 g)의 혼합물을 첨가하였다. 생성된 반응 혼합물을 실온에서 5일 동안 교반하고, 이어서 이것을 셀라이트 플러그를 통해 여과하고 톨루엔 (3x500 mL)으로 세척하였다. 회전 증발기로 휘발성 물질을 제거하고 EtOAc/헥산 (1:5)를 사용한 컬럼 크로마토그래피 (실리카)로 생성물을 정제한 후 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>/헥산으로부터 결정화하여 67% 수율 (17.6 g)로 1a를 수득하였다.

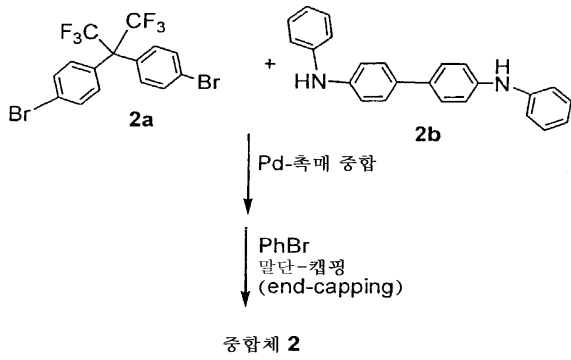
[0200] 이어서 1a (17.6 g)의 톨루엔 (무수, 480 mL) 용액을 1-클로로-4-요오도벤젠 (28.6 g), NaOtBu (8.65 g), 트리스(디벤질리덴아세톤) 디팔라듐 (2.20 g) 및 1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센 (2.66 g)과 혼합하였다. 생성된 혼합물을 48시간 동안 100°C로 가열하고, 이어서 셀라이트 플러그를 통해 여과하고 톨루엔 (4x250 mL)으로 세척하였다. 휘발성 물질을 제거하고 헥산 1 L 이어서 15% CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>/헥산을 사용한 컬럼 크로마토그래피 (실리카)로 생성물을 정제하여 64% (15.4 g) 수율로 백색 분말로서 1을 수득하였다.

[0201] 1의 중합

[0202] 비스(1,5-시클로옥타디엔)-니켈(0) (3.334 g, 12.12 mmol)을 2,2'-비피리딘 (1.893 g, 12.12 mmol) 및 1,5-시클로옥타디엔 (1.311 g, 12.12 mmol)의 N,N-디메틸포름아미드 (무수, 15 mL) 용액에 첨가하였다. 생성된 혼합물을 30분 동안 60°C로 가열하였다. 이어서 오일조 온도를 70°C로 상승시키고 1 (4.846 g, 6.0 mmol)의 톨루엔 (무수, 60 mL) 용액을 교반되는 촉매 혼합물에 신속히 첨가하였다. 상기 혼합물을 70°C에서 92시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각한 후, 격렬하게 교반하면서 진한 HCl 약 30 mL를 함유하는 아세톤/메탄올 (50:50 (부피비)) 혼합물 600 mL 중에 천천히 부었다. 연회색 섬유질 침전물이 형성되었고 이것은 교반 동안 부분적으로 파괴되었다. 혼합물을 1시간 동안 교반하고 여과하여 고체를 단리하였다. 고체를 클로로포름 약 200 mL 중에 용해하고, 격렬하게 교반하면서 진한 염산 약 30 mL를 함유하는 아세톤/메탄올 (50:50) 1200 mL 중에 부었다. 연회색 섬유질 물질이 형성되었고, 이를 1시간 동안 교반하고 여과하여 단리하였다. 고체를 다시 클로로포름 약 200 mL 중에 용해하고, 실리카 겔 60의 베드 (약 3-4 cm)를 통과시켰다. 필터 베드를 클로로포름 약 400 mL로 행구고 합한 클로로포름 용액을 약 150-200 mL로 농축하고, 격렬하게 교반하면서 아세톤/메탄올 (50:50 (부피비)) 1600 mL 중에 부었다. 약간 회백색 섬유질 침전물이 형성되었고, 이를 1시간 동안 교반하였다. 여과하여 고체를 단리하고 진공 하에서 밤새 건조하였다. 고체를 테트라히드로푸란 (250 mL) 중에 용해하고 이어서 격렬하게 교반하면서 에틸아세테이트 1500 mL 중에 부었다. 약간 회백색 섬유질 슬러리로서 중합체가 침전되었다. 혼합물을 1시간 동안 교반한 후 여과하여 침전물을 단리하였다. 상기 고체를 테트라히드로푸란 (220 mL) 중에 재-용해하고, 0.2 μm 시린지 필터 (PTFE 여과막)를 통해 여과하고 격렬하게 교반하면서 메탄올 1200 mL 중에 천천히 부었다. 백색 섬유질 슬러리로서 중합체가 침전되었고, 이를 여과로 단리하였다. 생성된 물질을 진공 하에서 밤새 건조한 후 중합체 3.31 g (75%)를 단리하였다. GPC (THF, 실온): Mn = 92,000; Mw = 219,900; Mw/Mn = 2.39.

[0203] 실시예 2. 중합체 2의 합성

[0204] 중합체 2의 합성 경로를 하기에 나타내었다.

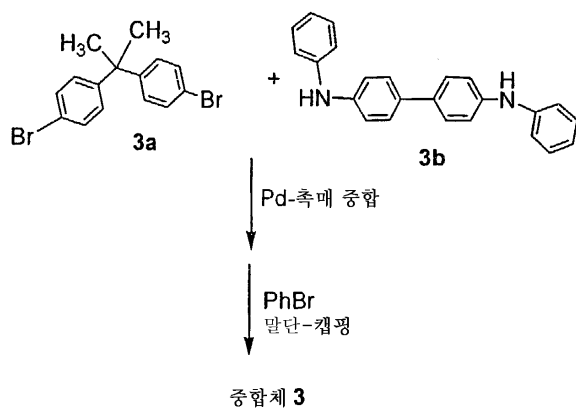


[0205]

[0206] 모든 조작은 질소 분위기 하에서 수행하였다. 200 mL 플라스크에 4,4'-브로모페닐(헥사플루오로이소프로필리덴) (3.64 g, 7.87 mmol), N,N-디페닐벤지딘 (2.67 g, 7.93 mmol), NaO<sup>t</sup>Bu (2.29 g, 23.8 mmol), 톨루엔 (무수, 95 mL), 및 트리스(디벤질리덴아세톤) 디팔라듐 (0.363 g, 0.4mmol) 및 P<sup>t</sup>Bu<sub>3</sub> (0.482 g, 2.4 mmol)의 용액 (10 mL, 톨루엔)을 도입하였다. 생성된 반응 혼합물을 48시간 동안 100 °C로 가열하였다. 브로모벤젠 (2.74 g, 17.4 mmol)을 반응 혼합물에 첨가하고 추가 24시간 동안 교반하였다. 실온으로 냉각한 후, 혼합물을 대기에 노출시키고 50% 톨루엔/DMF로 희석하여 1% 용액(약 1 L)을 생성하고, 이를 1인치의 셀라이트 패드를 통해 여과하였다. 황색 여과액을 약 300 mL의 부피로 감소시키고, 이어서 50% MeOH/아세톤 (약 1800 mL)의 격렬하게 교반되는 용액에 천천히 첨가하였다. 침전물이 형성되었고, 이를 여과로 단리하고 진공 하에서 건조하여 회백색 고체 4.892 g (97%)을 수득하였다. 이것을 CHCl<sub>3</sub> 중에 용해하여 약 8% 용액을 생성하고, 이를 격렬하게 교반되는 6배 (부피)의 헥산에 적가하여 고체를 생성하였다. 여과 및 건조 후, 생성된 고체를 CHCl<sub>3</sub> (1% 용액) 중에 용해하고 6배 (부피)의 끓는 아세토니트릴 중에서 재침전시켰다. 침전물을 여과하고 진공 건조하여 2.274 g의 연황색 분말 물질을 수득하였다. GPC (THF, 실온): Mn = 10,100; Mw = 20,800; Mw/Mn = 2.06.

[0207] 실시예 3. 중합체 3의 합성

[0208] 중합체 3의 합성 경로를 하기에 나타내었다.

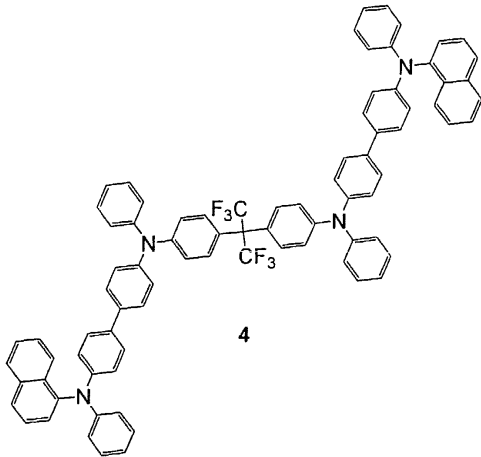


[0209]

[0210] 모든 조작은 질소 분위기 하에서 수행하였다. 200 mL 플라스크에 4,4'-브로모페닐이소프로필리덴 (1.00 g, 2.82 mmol), N,N-디페닐벤지딘 (0.96 g, 2.82 mmol), NaO<sup>t</sup>Bu (0.85 g, 8.5 mmol), 톨루엔 (무수, 30 mL), 및 트리스(디벤질리덴아세톤) 디팔라듐 (0.13 g, 0.14 mmol) 및 P<sup>t</sup>Bu<sub>3</sub> (0.17 g, 0.85 mmol)의 용액 (5 mL, 톨루엔)을 도입하였다. 생성된 반응 혼합물을 48시간 동안 100°C로 가열하였다. 브로모벤젠 (0.98g, 0.62 mmol) 및 트리스(디벤질리덴아세톤) 디팔라듐 (0.032 g) 및 P<sup>t</sup>Bu<sub>3</sub> (0.042 g)을 반응 혼합물에 첨가하고 추가 24시간 동안 교반하였다. 이어서 반응 혼합물을 50% 톨루엔/DMF로 희석하여 1% 용액을 제조하였다. 여과 후 용매를 증발시키고 생성된 고체를 CHCl<sub>3</sub> (1 L) 중에 용해하고 이어서 점성 용액으로 농축하고, 이를 헥산 중에서 침전

시키고 2번 여과하여 모든 입자를 제거하였다. 분말을 밤새 건조하고 이어서 클로로포름 중에 용해하고 끓는 CH<sub>3</sub>CN 중에서 재-침전시켜서 2번 여과하였다. 건조 후, 42% 수율 (0.629g)로 연황색 분말을 단리하였다. Mn = 3370; Mw = 10,200; Mw/Mn = 3.02.

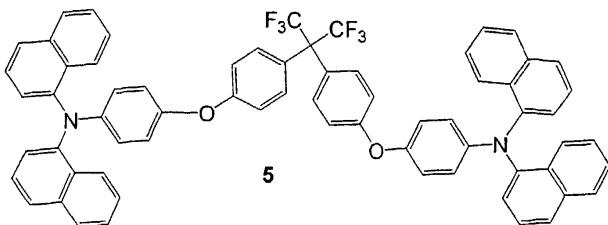
[0211] 실시예 4. 이량체 4의 합성



[0212]

[0213] 모든 조작은 질소 분위기 하에서 수행하였다. 슈렌크(Schlenk) 플라스크에 N,N'-디페닐-N-나프트-1-일-벤지딘 (2.00 g, 4.32 mmol), 4,4'-브로모페닐(헥사플루오로이소프로필리덴) (0.95 g, 2.06 mmol), Na<sup>t</sup>Bu (0.623 g, 23.8 mmol), 톨루엔 (무수, 40 mL), 및 트리스(디벤질리덴아세톤) 디팔라듐 (0.198 g, 0.2 mmol) 및 P<sup>t</sup>Bu<sub>3</sub> (0.262 g, 1.3 mmol)의 용액 (5 mL, 톨루엔)을 도입하였다. 혼합물을 12시간 동안 100°C로 가열하였다. 실온으로 냉각한 후 용액을 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>로 희석하고 셀라이트를 통해 여과하였다. 휘발성 물질을 증발시켜서 최소량의 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 중에 용해된 갈색 고체를 수득하고 MeOH로부터 침전시켰다. 여과 및 건조 후 고체를 크로마토그래피(실리카, 1:2 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>/헥산)로 정제하였다. 결정화 (CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>/MeOH)에 의한 추가 정제로 81% 수율 (2.04g)로 회백색 분말로서 화합물 4를 수득하였다. <sup>1</sup>H NMR(CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 500 MHz): δ 7.97 (d, 2H); 7.92 (d, 2H); 7.82 (d, 2H); 7.49 (m, 8H); 7.40 (m, 8H); 7.30 (t, 4H); 7.24 (m, 8H); 7.15 (m, 8H); 7.06 (m, 8H); 6.97 (t, 2H); <sup>19</sup>F NMR(CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 376.86 MHz): δ -64.66 (s).

[0214] 실시예 5. 이량체 5의 합성



[0215]

[0216] 모든 조작은 질소 분위기 하에서 수행하였다. 둥근 바닥 플라스크에 4'',4''-(헥사플루오로이소프로필리덴)비스(4-페녹시아닐린) (10.08 g, 19.5 mmol), 1-요오도나프탈렌 (14.83 g, 58.4 mmol), Na<sup>t</sup>Bu (5.61 g, 58.4 mmol), 톨루엔 (무수, 300 mL), 및 트리스(디벤질리덴아세톤) 디팔라듐 (1.78 g, 1.95 mmol) 및 P<sup>t</sup>Bu<sub>3</sub> (0.98 g, 4.87 mmol)의 용액 (10 mL, 톨루엔)을 도입하였다. 혼합물을 4일 동안 실온에서 교반하였다. 생성된 혼합물을 물로 세척하고, 유기 층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조하였다. 휘발성 물질을 제거하여 갈색 오일을 수득하였고, 이를 헥산 (1.5 L) 이어서 순수한 EtOAc로 극성을 증가시킨 헥산:EtOAc 혼합물을 사용한 컬럼 크로마토그래피로 정제하였다. 목적하는 화합물 5를 백색 분말 (1.0 g)로서 단리하였다. <sup>1</sup>H NMR(CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 500 MHz): δ 8.03 (d, 1H); 7.85 (d, 1H); 7.67 (d, 1H); 7.43 (t, 1H); 7.30 (m, 3H); 7.17 (d, 1H); 6.88 (d, 1H); 6.83 (d, 1H); 6.72

(d, 1H);  $^{19}\text{F}$  NMR ( $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ , 376.86 MHz):  $\delta$  -64.81 (s).

**도면의 간단한 설명**

[0108] 본 발명은 첨부 도면으로 제한되지 않으면서 예로서 설명된다.

[0109] 도 1 : 본원에서 개시된 신규 화합물을 포함하는 1개 이상의 층을 포함하는 유기 전자 디바이스의 일례를 도시한다.

**도면**

**도면1**

