



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2013-0130757
(43) 공개일자 2013년12월02일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 403/10 (2006.01) C07D 403/14 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2013-7016283
(22) 출원일자(국제) 2011년10월27일
심사청구일자 없음
(85) 번역문제출일자 2013년06월21일
(86) 국제출원번호 PCT/EP2011/005423
(87) 국제공개번호 WO 2012/069121
국제공개일자 2012년05월31일
(30) 우선권주장
10014930.1 2010년11월24일
유럽특허청(EPO)(EP)

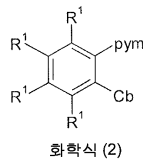
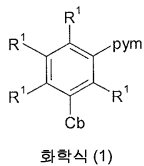
(71) 출원인
메르크 파텐트 게엠베하
독일 64293 다름스타트 프랑크푸르터 스트라세
250
(72) 발명자
파르함 아미르 호싸인
독일 65929 프랑크푸르트 암 마인 프란츠-헨레-슈
트라세 4
폴름 크리스토프
독일 60316 프랑크푸르트 암 마인 메리안슈트라세
23
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인코리아나

전체 청구항 수 : 총 15 항

(54) 발명의 명칭 유기 전계발광 소자용 재료

(57) 요약

본 발명은 전자 소자, 특히 유기 전계발광 소자에서 사용하기에 적합한 화학식 (1) 또는 화학식 (2) 의 화합물의 화합물에 관한 것이다:



(72) 발명자

아네미앙 르미 마누크

대한민국 657-169 서울시 용산구 한남동 657-169
1층 코피어스 2-101

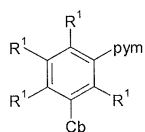
슈프라이치 후베르트

독일 68519 피른하임 브루노-타우트-슈트라쎈 20

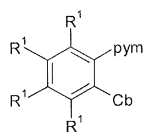
특허청구의 범위

청구항 1

화학식 (1) 또는 화학식 (2) 의 화합물:



화학식 (1)



화학식 (2)

[식 중, 사용된 기호는 하기에 적용함:

pym 는 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수 있는 피리미딘이고;

Cb 는 2 개 이상의 가교를 함유하고, 또한 하나 이상의 C 원자가 N 으로 대체될 수 있고, 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있는 카르바졸 유도체이고;

R, R¹, R² 는 각 경우, 동일 또는 상이하계, H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, N(Ar)₂, N(R³)₂, C(=O)Ar, C(=O)R³, P(=O)(Ar)₂, 1 내지 40 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 또는 3 내지 40 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 2 내지 40 개의 C 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R³ 으로 치환될 수 있고, 하나 이상의 비인접한 CH₂ 기는 R³C=CR³, C≡C, Si(R³)₂, C=O, C=S, C=NR³, P(=O)(R³), SO, SO₂, NR³, O, S 또는 CONR³ 으로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂ 에 의해 대체될 수 있음), 5 내지 80, 바람직하게는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R³ 으로 치환될 수 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼 R³ 으로 치환될 수 있음) 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬기 (이는 하나 이상의 라디칼 R³ 으로 치환될 수 있음) 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 2 개 이상의 인접한 치환기 R² 는 임의로 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 하나 이상의 라디칼 R³ 으로 치환될 수 있음) 를 형성할 수 있고;

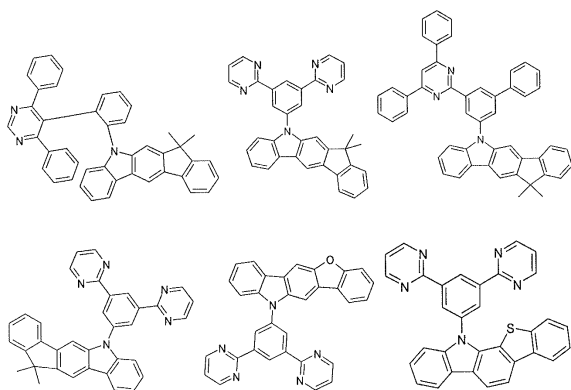
R³ 은 각 경우, 동일 또는 상이하계, H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, N(Ar)₂, N(R⁴)₂, C(=O)Ar, C(=O)R⁴, P(=O)(Ar)₂, 1 내지 40 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 40 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 2 내지 40 개의 C 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R³ 으로 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 비인접한 CH₂ 기는 R⁴C=CR⁴, C≡C, Si(R⁴)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁴, P(=O)(R⁴), SO, SO₂, NR⁴, O, S 또는 CONR⁴ 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂ 로 대체될 수 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R⁴ 로 치환될 수 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼 R⁴ 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 두 개 이상의 인접한 치환기 R³ 은 임의로 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 하나 이상의 라디칼 R⁴ 로 치환될 수 있음) 를 형성할 수 있고;

Ar 은 각 경우, 동일 또는 상이하계, 5-30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 하나 이상의 비-방향족 라디칼 R⁴ 로 치환될 수 있음) 이고; 여기서 동일한 N 원자 또는 P 원자에 결

합되는 2 개의 라디칼 Ar 은 또한 단일 결합 또는 $N(R^4)$, $C(R^4)_2$, O 또는 S 로부터 선택되는 가교에 의해 서로 가교될 수 있고;

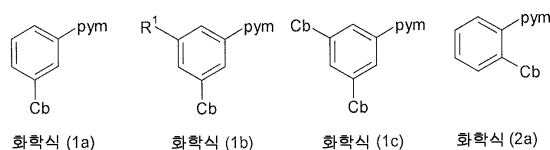
R^4 는 H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 지방족 탄화수소 라디칼, 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I 또는 CN 로 대체될 수 있고, 2 개 이상의 인접한 치환기 R^4 는 서로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성할 수 있고;

하기 화합물이 본 발명에서 배제됨:



청구항 2

제 1 항에 있어서, 화학식 (1) 의 화합물이 화학식 (1a), (1b) 또는 (1c) 의 화합물로부터 선택되고, 화학식 (2) 의 화합물이 화학식 (2a) 의 화합물로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:



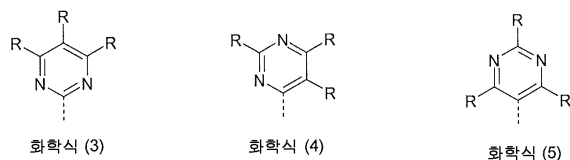
[식 중, 사용된 기호는 제 1 항에 제공된 의미를 가짐].

청구항 3

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서, R^1 이 H 또는 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 또한 하나 이상의 라디칼 R^3 으로 치환될 수 있음) 를 나타내는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 4

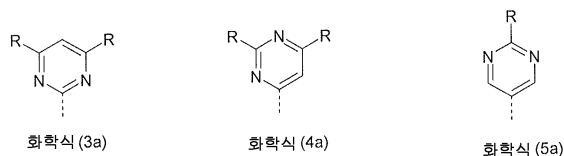
제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 있어서, 기 pym 이 화학식 (3), (4) 또는 (5) 의 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:



[식 중, 사용된 기호는 제 1 항에 제공된 의미를 가지고, 점선은 화학식 (1), (2), (1a) 내지 (1c) 또는 (2a) 에서 페닐기와 결합을 나타냄].

청구항 5

제 4 항에 있어서, 기 pym 이 화학식 (3a), (4a) 및 (5a) 로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:



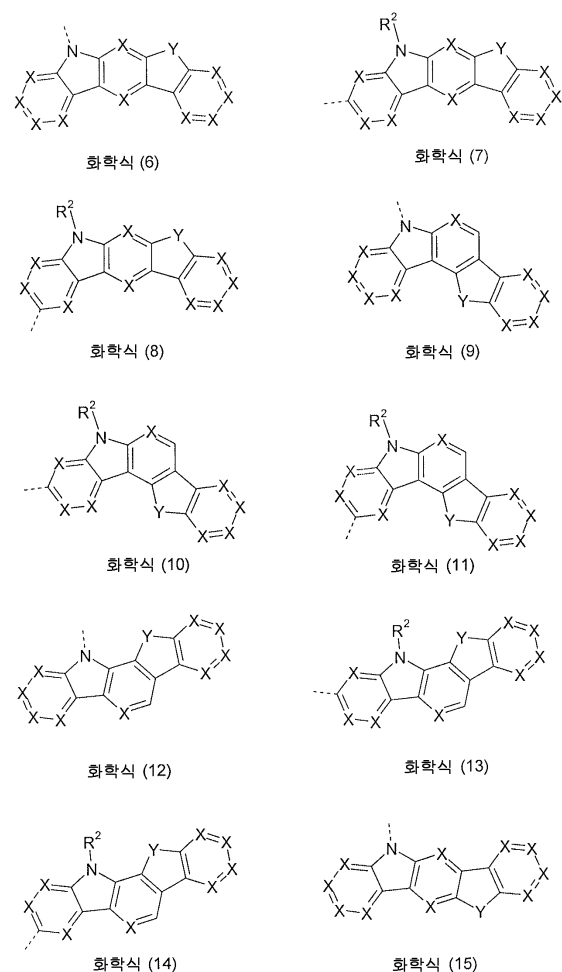
[식 중, 사용된 기호는 제 1 항에 제공된 의미를 가지고, 점선은 화학식 (1), (2), (1a) 내지 (1c) 또는 (2a) 의 피리미딘에서부터 페닐기와의 결합을 나타냄].

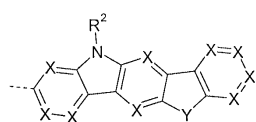
청구항 6

제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 있어서, R 이 각 경우 동일 또는 상이하게 H, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 알킬기 또는 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 하나 이상의 라디칼 R^3 으로 치환될 수 있음) 을 나타내는 것을 특징으로 하는 화합물.

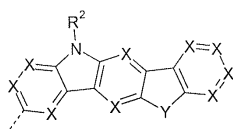
청구항 7

제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 있어서, 기 Cb 가 화학식 (6) 내지 (22) 의 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:

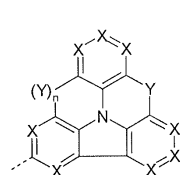




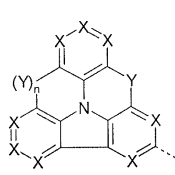
화학식 (16)



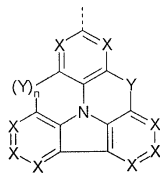
화학식 (17)



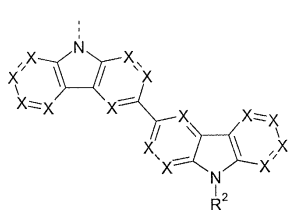
화학식 (18)



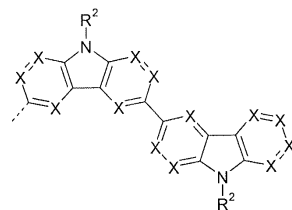
화학식 (19)



화학식 (20)



화학식 (21)



화학식 (22)

[식 중, 사용된 기호는 제 1 항에 제공된 의미를 가지고, 점선은 화학식 (1), (2), (1a) 내지 (1c) 또는 (2a)의 카르바졸 유도체에서부터 페닐기까지의 결합을 나타내고, 추가로

X 는 각 경우, 동일 또는 상이하게, CR^2 또는 N 이고, 여기서 고리 당 최대 2 개의 기호 X 는 N 을 나타내고;

Y 는 각 경우, 동일 또는 상이하게, $C(R^2)_2$, NR^2 , O 또는 S 이고;

n 은 0 또는 1 이고, n 이 0 인 경우 기 Y 가 상기 위치에서 결합되지 않고 그 대신 라디칼 R^2 가 해당하는 탄소 원자에 결합됨].

청구항 8

제 7 항에 있어서, 기호 X 가 각 경우 동일 또는 상이하게 CR^2 , 특히 CH 를 나타내는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 9

제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 있어서, 카르바졸 유도체의 가교에서 질소 원자에 직접 결합된 치환기 R^2 가 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 또한 하나 이상의 라디칼 R^3 으로 치환될 수 있음) 을 나타내는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 10

제 1 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 따른 하나 이상의 화합물 및 하나 이상의 추가 화합물, 특히 형광 또는 인광 도판트를 포함하는 혼합물.

청구항 11

제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 따른 하나 이상의 화합물 또는 혼합물 및 하나 이상의 용매를 포함하는 제형.

청구항 12

하기 반응 단계를 포함하는 제 1 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 따른 화합물의 제조 방법:

- a) 피리미딘에 대한 메타-위치 또는 오르토-위치에서 페닐기에 반응성 이탈기를 함유하는 임의로 치환된 페닐피리미딘 유도체의 합성 단계; 및
- b) 상기 페닐피리미딘 유도체를 카르바졸 유도체와 커플링시키는 단계.

청구항 13

전자 소자, 특히 유기 전계발광 소자에서의 제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 따른 화합물 또는 혼합물의 용도.

청구항 14

특히 유기 전계발광 소자, 유기 집적 회로, 유기 전계-효과 트랜지스터, 유기 박막 트랜지스터, 유기 발광 트랜지스터, 유기 태양 전지, 유기 염료-감응형 태양 전지, 유기 광학적 탐지기, 유기 광-수송체, 유기 전계-캐치 소자, 발광 전기화학 전지, 유기 레이저 다이오드 및 "유기 플라스몬 방사 소자" 로 이루어지는 군으로부터 선택되는, 제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 따른 하나 이상의 화합물 또는 혼합물을 포함하는 전자 소자.

청구항 15

제 14 항에 있어서, 유기 전계발광 소자이고, 제 1 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 따른 화합물이 형광 또는 인광 방사체를 위한 매트릭스 재료로서, 및/또는 정공-차단층에 및/또는 전자-수송층에 존재하는 것을 특징으로 하는 전자 소자.

명세서

기술분야

[0001] 본 발명은 전자 소자, 특히 유기 전계발광 소자에 사용하기 위한 재료에 관한 것이다. 상기 재료는 특히 인광 방사체용 매트릭스 재료로서 적합하다.

배경기술

[0002] 유기 반도체를 기능성 재료로서 이용하는 유기 전계발광 소자 (OLED) 의 구조는, 예를 들어 US 4539507, US 5151629, EP 0676461 및 WO 98/27136 에 기재되어 있다. 본원에서 이용되는 발광성 재료는 형광 대신 인광을 나타내는 유기-금속 착물이 증가하고 있다 (M. A. Baldo *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **1999**, 75, 4-6). 양자역학적 이유로, 인광 방사체로서 유기금속 화합물을 사용하여 에너지 및 전력 효율을 4 배까지 증가시킬 수 있다. 그러나, 일반적으로 특히 예를 들어 작동 전압, 효율 및 수명과 관련하여 OLED 에서, 특히 삼중항 방사 (인광) 을 나타내는 OLED 에서 여전히 개선점이 요구된다. 이는, 특히, 비교적 짧은-파장 범위에서 방사하는 OLED 에 적용된다.

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

[0004] 선행 기술에 따르면, 특히, 트리아진 유도체 (예를 들어 WO 2010/015306 또는 WO 2008/056746 에 따름) 이 인광 방사체용 매트릭스 재료로서 사용된다. 그러나, 이들 매트릭스 재료를 다른 매트릭스 재료의 경우와 같이 사용시, 특히 작동 전압뿐 아니라 소자의 효율 및 수명에 관하여, 개선이 여전히 필요하다.

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

[0006] 놀랍게도, 이하에서 더욱 상세히 기술되는, 피리미딘기가 오르토- 또는 메타-연결된 페닐기를 통해 특정 카르바졸기와 결합된 특정 피리미딘 화합물이 이러한 목적을 달성하고, 유기 전계발광 소자에서, 특히 작동 전압, 수명, 및 효율에 관하여, 현저한 개선을 초래한다는 것을 밝혀내었다. 이는, 특히 본 발명에 따른 화합물을 매트릭스 재료로서 사용시, 또한 상기 화합물을 전자-수송 재료 또는 정공-차단 재료로서 사용시, 특히, 녹색-

및 정밀 구조에 따라 청색-인광 전계발광 소자에 적용된다. 그러므로 본 발명은 이들 재료, 및 이러한 유형의 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자에 관한 것이다.

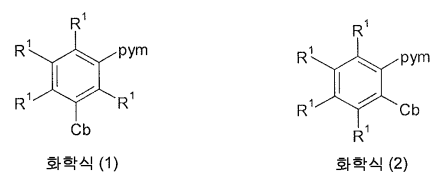
[0007] JP 4474493 B1 에는 메타-위치에서 피리미딘기에 의해 치환된 페닐기를 치환기로서 함유한 카르바졸 유도체가 개시되어 있다. 상기 화합물의 경우, 특히 작동 전압에 관해서 개선될 필요성이 여전히 있다.

[0008] 놀랍게도, 특히 유기 전계발광 소자에서 본 발명에 따른 화합물을 사용함으로써 양호한 전자적 성질, 특히 작동 전압의 향상을 야기한다는 것을 밝혀내었다.

발명의 내용

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0009] 따라서 본 발명은 하기 화학식 (1) 또는 화학식 (2) 의 화합물에 관한 것이다:



[0010]

[식 중, 사용된 기호는 하기에 적용함:

[0011]

pym 는 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수 있는 피리미딘이고;

[0012]

Cb 는 2 개 이상의 가교를 함유하고, 또한 하나 이상의 C 원자가 N 으로 대체될 수 있고, 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있는 카르바졸 유도체이고;

[0013]

[0014] R, R¹, R² 는 각 경우, 동일 또는 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, N(Ar)₂, N(R³)₂, C(=O)Ar, C(=O)R³, P(=O)(Ar)₂, 1 내지 40 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 또는 3 내지 40 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 2 내지 40 개의 C 원자를 갖는 알케닐 또는 알킬닐기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R³ 으로 치환될 수 있고, 하나 이상의 비인접한 CH₂ 기는 R³C=CR³, C≡C, Si(R³)₂, C=O, C=S, C=NR³, P(=O)(R³), SO, SO₂, NR³, O, S 또는 CONR³ 으로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂ 에 의해 대체될 수 있음), 5 내지 80, 바람직하게는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R³ 으로 치환될 수 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼 R³ 으로 치환될 수 있음) 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬기 (이는 하나 이상의 라디칼 R³ 으로 치환될 수 있음) 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 2 개 이상의 인접한 치환기 R² 는 임의의 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 하나 이상의 라디칼 R³ 으로 치환될 수 있음) 를 형성할 수 있고;

[0015]

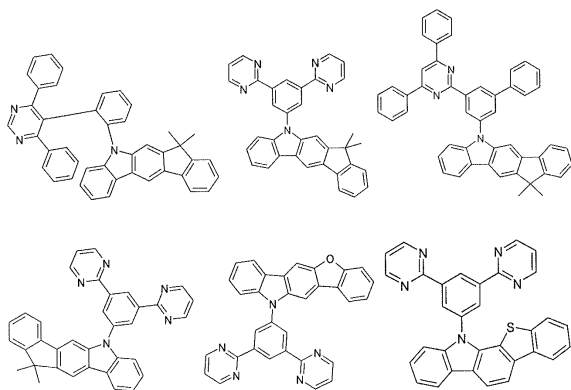
R³ 은 각 경우, 동일 또는 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO₂, N(Ar)₂, N(R⁴)₂, C(=O)Ar, C(=O)R⁴, P(=O)(Ar)₂, 1 내지 40 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 40 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 2 내지 40 개의 C 원자를 갖는 알케닐 또는 알킬닐기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R³ 으로 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 비인접한 CH₂ 기는 R⁴C=CR⁴, C≡C, Si(R⁴)₂, C=O, C=S, C=Se, C=NR⁴, P(=O)(R⁴), SO, SO₂, NR⁴, O, S 또는 CONR⁴ 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO₂ 로 대체될 수 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 각 경우 하나 이상의 라디칼 R⁴ 로 치환될 수 있음), 5 내지 60

개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 두 개 이상의 인접한 치환기 R^3 은 임의로 모노시클릭 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로 방향족 고리계 (이는 하나 이상의 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 를 형성할 수 있고;

[0016] Ar 은 각 경우, 동일 또는 상이하게, 5-30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 계 (이는 하나 이상의 비-방향족 라디칼 R^4 로 치환될 수 있음) 이고; 여기서 동일한 N 원자 또는 P 원자에 결합되는 2 개의 라디칼 Ar 은 또한 단일 결합 또는 $N(R^4)$, $C(R^4)_2$, O 또는 S 로부터 선택되는 가교에 의해 서로 가교될 수 있고;

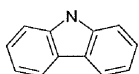
[0017] R^4 는 H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 지방족 탄화수소 라디칼, 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I 또는 CN 로 대체될 수 있고, 2 개 이상의 인접한 치환기 R^4 는 서로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성할 수 있고;

[0018] 하기 화합물이 본 발명에서 배제됨:



[0019]

[0020] 둘 이상의 가교를 함유하고, 하나 이상의 C 원자가 N 으로 대체될 수 있는 카르바졸 유도체는 본 발명의 목적을 위해 하기를 의미한다: 카르바졸은 하기 구조를 갖는다:



[0021]

[0022] 여기서 질소는 페닐기들 간의 단일 결합뿐 아니라 2 개의 페닐기를 가교하기 때문에 카르바졸의 가교로서 간주된다. 본 발명의 의미 내에서 카르바졸 유도체는 둘 이상의 가교를 함유한다. 이는 상이한 방식으로 일어날 수 있다. 따라서, 예를 들어, 상술된 화학식의 2 개 이상의 카르바졸기가 서로 직접 결합되는 것이 가능하다. 그러나, 2 개 이상의 카르바졸기가 카르바졸 또는 다른 카르바졸 유도체가 아닌 추가 기를 통해 서로 결합되는 경우, 본 발명의 의미 내에서의 2 개의 가교를 갖는 카르바졸 유도체로서 간주되지 않는다. 게다가, 카르바졸의 페닐기에의 가교를 함유하는 추가의 방향족 기는 카르바졸의 1 또는 2 개의 페닐기에 결합될 수 있다. 또한, 카르바졸의 1 또는 2 개의 페닐기에의 가교를 함유하는 방향족 기는 카르바졸의 질소에 결합될 수 있다. 카르바졸의 질소 상의 방향족 기가 화학식 (1) 또는 화학식 (2) 에 나타난 페닐기에 결합되는 것이 가능하다. 가교는 산소, 황 또는 각 경우 치환 또는 비치환된 탄소 또는 질소로부터 선택되나 바람직하게는 황은 아니다. 게다가, 질소 원자는 카르바졸의 탄소 원자들 중 하나 이상 대신 존재할 수 있다. 본 발명의 바람직한 구현예에서, 카르바졸의 페닐기에의 가교를 함유하는 추가 방향족 기는 카르바졸의 1 또는 2 개의 페닐기에 결합되거나, 카르바졸의 1 또는 2 개의 페닐기에 가교를 함유하는 추가 방향족 기는 카르바졸의 질소에 결합된다.

[0023] 카르바졸 유도체는 질소 또는 페닐 고리의 탄소 원자를 통해 또는 카르바졸의 질소에 결합된 방향족 기를 통해 직접 화학식 (1) 또는 화학식 (2) 의 페닐기에 결합될 수 있다.

[0024] 본 발명의 의미 내에서, 아릴기는 6 내지 60 개의 C 원자를 함유하고; 본 발명의 의미 내에서, 헤테로아릴기는

2 내지 60 개의 C 원자 및 하나 이상의 헤테로원자를 함유하고, 단 C 원자 및 헤테로원자의 합은 5 이상이다.

헤테로원자는 바람직하게는 N, O 및/또는 S로부터 선택된다. 아릴기 또는 헤테로아릴기는 단순한 방향족 고리, 즉 벤젠 또는 단순한 헤테로방향족 고리, 예를 들어 피리딘, 피리미딘, 티오펜 등, 또는 축합된 (융합된) 아릴 또는 헤테로아릴기, 예를 들어 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 퀴놀린, 이소퀴놀린 등을 의미한다.

단일 결합에 의해 서로 연결된 방향족 고리들, 예컨대, 바이페닐은, 대조적으로, 아릴 또는 헤테로아릴기가 아니라, 방향족 고리계로 언급된다.

[0025]

본 발명의 의미 내에서, 방향족 고리계는 고리계에 6 내지 80 개의 C 원자를 함유한다. 본 발명의 의미 내에서, 헤테로방향족 고리계는 고리계에 2 내지 60 개의 C 원자 및 하나 이상의 헤테로원자를 함유하고, 단 C 원자 및 헤테로원자의 합은 5 이상이다. 헤테로원자는 바람직하게는 N, O 및/또는 S로부터 선택된다. 본 발명의 의미 내에서, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계는 아릴 또는 헤테로아릴기만을 필수적으로 함유하는 것은 아니고, 대신 부가적으로 다수의 아릴 또는 헤테로아릴기가, 예를 들어 sp^3 -혼성된 C, N 또는 O 원자와 같은 비-방향족 단위 (바람직하게는 H 이외의 원자 10 % 미만) 에 의해 연결될 수 있는 계를 의미하는 것으로 의도된다. 따라서, 예를 들어 9,9'-스피로바이폴루오렌, 9,9'-디아릴폴루오렌, 트리아릴아민, 디아릴 에테르, 스틸벤 등과 같은 계가, 또한 2 개 이상의 아릴기가, 예를 들어 짧은 알킬기에 의해 연결되는 계와 같이, 본 발명의 의미내에서 방향족 고리계를 의미하는 것으로 의도된다. 또한, 단일 결합에 의해 서로 연결된 방향족 고리, 예컨대 바이페닐, 터페닐 또는 쿼터페닐은 본 출원의 의미에서 방향족 고리계를 지칭한다.

[0026]

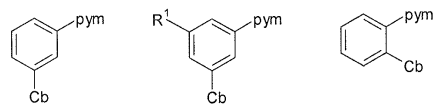
본 발명의 목적을 위해, 전형적으로 1 내지 40 개 또는 또한 1 내지 20 개의 C 원자를 함유할 수 있고, 그 안에서 또한 각각의 H 원자 또는 CH_2 기가 상기 언급된 기로 치환될 수 있는, 지방족 탄화수소 라디칼 또는 알킬기 또는 알케닐 또는 알킬닐기는 바람직하게는 라디칼 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, s-부틸, t-부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, s-펜틸, 시클로펜틸, n-헥실, 시클로헥실, n-헵틸, 시클로헵틸, n-옥틸, 시클로옥틸, 2-에틸헥실, 트리플루오로메틸, 펜타플루오로에틸, 2,2,2-트리플루오로에틸, 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 시클로펜테닐, 헥세닐, 시클로헥세닐, 헵테닐, 시클로헵테닐, 옥테닐, 시클로옥테닐, 에티닐, 프로피닐, 부티닐, 펜티닐, 헥시닐, 헵티닐 및 옥티닐을 의미하는 것으로 여겨진다. 1 내지 40 개의 C 원자를 갖는 알콕시기는 바람직하게는 메톡시, 트리플루오로메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, s-부톡시, t-부톡시, n-펜톡시, s-펜톡시, 2-메틸부톡시, n-헥소키, 시클로헥실옥시, n-헵톡시, 시클로헵틸옥시, n-옥틸옥시, 시클로옥틸옥시, 2-에틸헥실옥시, 펜타플루오로에톡시 및 2,2,2-트리플루오로에톡시를 의미하는 것으로 여겨진다. 1 내지 40 개의 C 원자를 갖는 티오알킬기는, 특히, 메틸티오, 에틸티오, n-프로필티오, i-프로필티오, n-부틸티오, i-부틸티오, s-부틸티오, t-부틸티오, n-펜틸티오, s-펜틸티오, n-헥실티오, 시클로헥실티오, n-헵틸티오, 시클로헵틸티오, n-옥틸티오, 시클로옥틸티오, 2-에틸헥실티오, 트리플루오로메틸티오, 펜타플루오로에틸티오, 2,2,2-트리플루오로에틸티오, 에테닐티오, 프로페닐티오, 부테닐티오, 펜테닐티오, 시클로펜테닐티오, 헥세닐티오, 시클로헥세닐티오, 헵테닐티오, 시클로헵테닐티오, 옥테닐티오, 시클로옥테닐티오, 에티닐티오, 프로피닐티오, 부티닐티오, 펜티닐티오, 헥시닐티오, 헵티닐티오 또는 옥티닐티오를 의미하는 것으로 여겨진다. 일반적으로, 본 발명에 따른 알킬, 알케닐, 알킬닐, 알콕시 또는 티오알킬기는 직쇄, 분지형 또는 고리형일 수 있고, 여기서 하나 이상의 비-인접 CH_2 기는 상기 언급된 기로 대체될 수 있고; 추가로, 하나 이상의 H 원자는 또한 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 , 바람직하게는 F, Cl 또는 CN, 더욱 바람직하게는 F 또는 CN, 특히 바람직하게는 CN 으로 대체될 수 있다.

[0027]

5 - 80 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (각 경우에서 이는 또한 상기에서 언급한 라디칼 R^2 또는 탄화수소 라디칼로 치환될 수 있고, 임의의 바람직한 위치에서 방향족 또는 헤테로방향족기에서 원하는 임의의 위치를 통해 연결될 수 있음) 가, 특히 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센, 페난트렌, 벤조페난트렌, 피렌, 크리센, 페틸렌, 플루오란텐, 나프타센, 펜타센, 벤조피렌, 바이페닐, 바이페닐렌, 터페닐, 트리페닐렌, 쿼터페닐, 플루오렌, 스피로바이폴루오렌, 디히드로페난트렌, 디히드로피렌, 테트라히드로피렌, 시스- 또는 트랜스-인덴노플루오렌, 시스- 또는 트랜스-인덴노카르바졸, 시스- 또는 트랜스-인돌로카르바졸, 트록센, 이소트록센, 스피로트록센, 스피로이소트록센, 푸란, 벤조푸란, 이소벤조푸란, 디벤조푸란, 티오펜, 벤조티오펜, 이소벤조티오펜, 디벤조티오펜, 피롤, 인돌, 이소인돌, 카르바졸, 피리딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 아크리딘, 페난트리딘, 벤조-5,6-퀴놀린, 벤조-6,7-퀴놀린, 벤조-7,8-퀴놀린, 페노티아진, 페녹사진, 피라졸, 인다졸, 이미다졸, 벤즈이미다졸, 나프티미다졸, 페난트리미다졸, 피리디미다졸, 피라진이미다졸, 퀴녹살린이미다졸, 옥사졸, 벤족사졸, 나프톡사졸, 안트톡사졸, 페난트톡사졸, 이소옥사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 헥사아자트리페닐렌, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴녹살린, 1,5-디아자안트

라센, 2,7-디아자피렌, 2,3-디아자피렌, 1,6-디아자피렌, 1,8-디아자피렌, 4,5-디아자피렌, 4,5,9,10-테트라아자페틸렌, 피라진, 페나진, 페녹사진, 페노티아진, 플루오루빈, 나프티리딘, 아자카르바졸, 벤조카르볼린, 페난트롤린, 1,2,3-트리아졸, 1,2,4-트리아졸, 벤조트리아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아졸, 1,2,5-옥사디아졸, 1,3,4-옥사디아졸, 1,2,3-티아디아졸, 1,2,4-티아디아졸, 1,2,5-티아디아졸, 1,3,4-티아디아졸, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 1,2,3-트리아진, 테트라졸, 1,2,4,5-테트라진, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,3,5-테트라진, 푸린, 프테리딘, 인돌리진 및 벤조티아디아졸 또는 이들 계의 조합으로부터 유도된 기를 의미하도록 선택된다.

[0028] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 화학식 (1)의 화합물은 하기 화학식 (1a) 및 (1b)의 화합물로부터 선택되고, 화학식 (2)의 화합물은 하기 화학식 (2a)의 화합물로부터 선택된다:



화학식 (1a)

화학식 (1b)

화학식 (2a)

[0029]

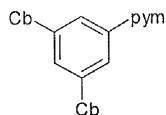
[0030]

[식 중, 사용된 기호는 상기 제공된 의미를 가짐].

[0031]

화학식 (1b)의 화합물에서 R^1 은 바람직하게는 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 또한 하나 이상의 라디칼 R^3 으로 치환될 수 있음)이다. 특히 바람직한 구현예에서, R^1 은 각 경우 동일 또는 상이하게 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 2 개 이상의 방향족 또는 헤테로방향족 6-원 고리기가 서로 직접 축합된, 축합된 아릴기 및 축합된 헤테로아릴기를 함유하지 않고, 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^3 으로 치환될 수 있음)을 나타낸다. 따라서, R^1 이 예를 들어, 나프틸기 또는 고도 축합된 아릴기 및 또한 퀴놀린기, 아크리딘기 등을 함유하지 않는 것이 바람직하다. 대조적으로, R 이 예를 들어, 카르바졸기, 디벤조푸란기, 인돌로- 또는 인데노카르바졸기 등을 함유하는 것이 가능한데, 그 이유는 6-원 방향족 또는 헤테로방향족 고리가 상기 구조에서 서로에 대해 직접 축합되지 않기 때문이다.

[0032] 본 발명의 특히 바람직한 구현예에서, 화학식 (1b)의 화합물은 하기 화학식 (1c)의 화합물로부터 선택된다:



화학식 (1c)

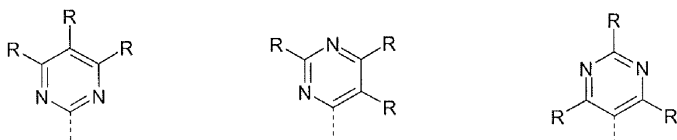
[0033]

[0034]

[식 중, 사용된 기호는 상기 제공된 의미를 가짐].

[0035]

화학식 (1) 및 (2) 또는 (1a) 내지 (1c) 또는 (2a)의 바람직한 구현예에서, 기 'pym'은 하기 화학식 (3), (4) 또는 (5)의 군으로부터 선택된다:



화학식 (3)

화학식 (4)

화학식 (5)

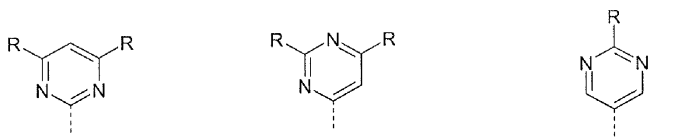
[0036]

[0037]

[식 중, 사용된 기호는 상기 제공된 의미를 가지고, 점선은 화학식 (1) 및 (2) 또는 화학식 (1a) 내지 (1c) 및 (2a)에서 페닐기와 결합을 나타냄].

[0038]

화학식 (3), (4) 및 (5)의 특히 바람직한 구현예는 화학식 (3a), (4a) 및 (5a)의 피리미딘 구조이다:



화학식 (3a)

화학식 (4a)

화학식 (5a)

[0039]

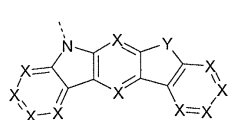
[0040] [식 중, 사용된 기호는 상기 제공된 의미를 가지고, 점선은 화학식 (1) 및 (2) 또는 (1a) 내지 (1c) 또는 (2a) 의 피리미딘에서부터 페닐기까지의 결합을 나타냄].

[0041] 매우 특히 바람직한 것은 화학식 (3a) 및 (4a) 이다.

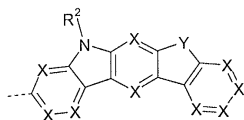
[0042] 화학식 (3), (4), (5), (3a), (4a) 및 (5a) 의 바람직한 구현예에서, R 은 각 경우 동일 또는 상이하게 H, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 알킬 또는 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 또한 하나 이상의 라디칼 R^3 으로 치환될 수 있음) 을 나타낸다. 특히 바람직한 구현예에서, R 은 각 경우 동일 또는 상이하게 H 또는 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 2 개 이상의 방향족 또는 헤테로방향족 6-원 고리기가 서로 직접 축합된, 축합된 아릴기 및 축합된 헤테로아릴기를 함유하지 않고, 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^3 으로 치환될 수 있음) 을 나타낸다. 따라서, R 의 경우 예를 들어, 나프틸기 또는 고도 축합된 아릴기 및 또한 퀴놀린기, 아크리딘기 등을 함유하지 않는 것이 바람직하다. 대조적으로, R 이 예를 들어, 카르바졸기, 디벤조푸란기 등을 함유하지 않는 것이 가능한데, 그 이유는 6-원 방향족 또는 헤테로방향족 고리가 상기 구조에서 서로에 대해 직접 축합되지 않기 때문이다. 화학식 (3a) 및 (4a) 에서 R 은 바람직하게는 수소가 아니다. 본 발명의 매우 특히 바람직한 구현예에서, R 은 페닐, 바이페닐, 터페닐 또는 쿼터페닐과 동일하고, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R^3 으로 치환될 수 있지만, 바람직하게는 비치환된다.

[0043] 상술된 바와 같이, Cb 는 2 개 이상의 가교를 함유하고, 또한 하나 이상의 C 원자는 N 으로 대체될 수 있고, 하나 이상의 라디칼 R^2 로 치환될 수 있는 카르바졸 유도체 (음) 이다.

[0044] 바람직한 기 Cb 는 하기 화학식 (6) 내지 (22) 의 기이다:

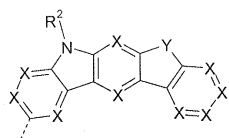


화학식 (6)

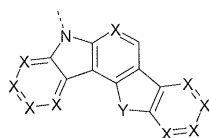


화학식 (7)

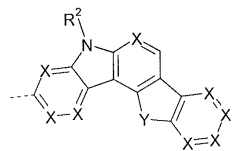
[0045]



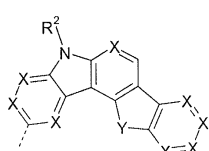
화학식 (8)



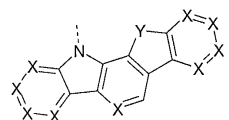
화학식 (9)



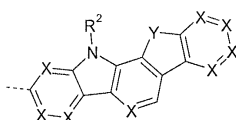
화학식 (10)



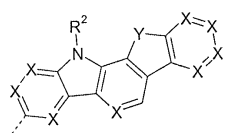
화학식 (11)



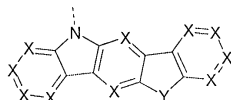
화학식 (12)



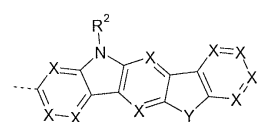
화학식 (13)



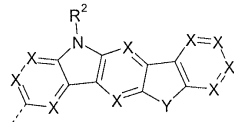
화학식 (14)



화학식 (15)

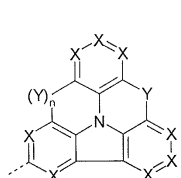


화학식 (16)

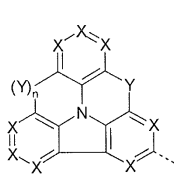


화학식 (17)

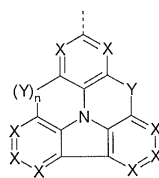
[0046]



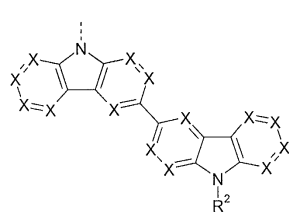
화학식 (18)



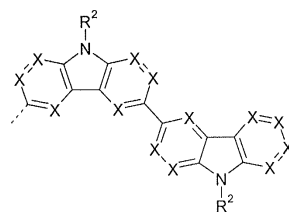
화학식 (19)



화학식 (20)



화학식 (21)



화학식 (22)

[0047]

[0048]

[식 중, 사용된 기호는 제 1 항에 제공된 의미를 가지고, 점선은 화학식 (1), (2), (1a) 내지 (1c) 또는 (2a)의 카르바졸 유도체에서부터 페닐기까지의 결합을 나타내고, 추가로

[0049]

X 는 각 경우, 동일 또는 상이하게, CR^2 또는 N 이고, 여기서 고리 당 최대 2 개의 기호 X 는 N 을 나타내고;

[0050]

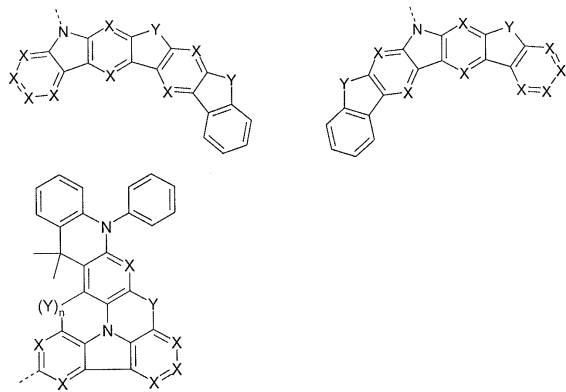
Y 는 각 경우, 동일 또는 상이하게, $C(R^2)_2$, NR^2 , O 또는 S 이고, Y 는 바람직하게는 S 이고;

[0051]

n 은 0 또는 1 이고, n 이 0 인 경우 기 Y 가 상기 위치에서 결합되지 않고 그 대신 라디칼 R^2 가 해당하는 탄소 원자에 결합됨].

[0052] 또한 바람직한 것은 상술된 화학식 (6) 내지 (22) 의 2 개 이상이 단일 결합에 의해 서로 직접 결합된 카르바줄기를 제공하는 것이다.

[0053] 서로 고리계를 형성하는 라디칼의 존재는 축합된 인데노 또는 인돌로 기 또는 다른 축합된 기를 함유하는 구조가 또한 접근할 수 있음을 의미한다는 것이 강조되어야 한다. 이는 상기 나타낸 구조 (6) 내지 (18) 로부터 시작하는 예에 의해 보여진다:



[0054]

[0055] 이는 화학식 (6) 내지 (22) 에 대한 치환기의 고리 형성에 의해 접근가능할 수 있는 예시적인 재현일 뿐이다. 따라서 당업자가 추가 진보적인 단계 없이, 화학식 (6) 내지 (22) 의 카르바줄 구조로부터 시작하는 축합된 고리를 갖는 추가의 구조를 사용하는 것이 가능하다.

[0056] 상술된 화학식 (6) 내지 (22) 의 바람직한 기 Cb 에서, 기호 X 는 각 경우 동일 또는 상이하게 CR^2 , 특히 CH 를 나타낸다.

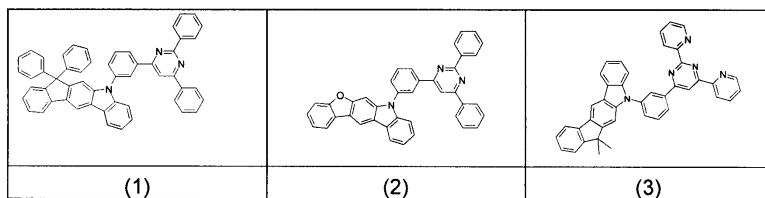
[0057] 상기 군들에서 치환기 R^2 는 카르바줄 유도체의 가교에서 질소 원자에 직접 결합되고, 또한 바람직하게는 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 또한 하나 이상의 라디칼 R^3 으로 치환될 수 있음) 을 나타낸다. 특히 바람직한 구현예에서, 상기 치환기 R^2 는 각 경우 동일 또는 상이하게 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 2 개 이상의 방향족 또는 헤테로방향족 6-원 고리기가 서로 직접 축합된, 축합된 아릴기 및 축합된 헤테로아릴기를 함유하지 않고, 각 경우 하나 이상의 라디칼 R^3 으로 치환될 수 있음) 을 나타낸다.

[0058] 본 발명의 추가 바람직한 구현예에서, 화학식 (6) 내지 (22) 에서 Y 는 각 경우 동일 또는 상이하게 $C(R^2)_2$ 또는 NR^2 를 나타낸다. Y 가 NR^2 를 나타내는 경우, R^2 는 바람직하게는 N 에 직접 결합되는 치환기에 대해 상기 바람직하게 나타낸 바와 동일한 의미를 갖는다. Y 가 $C(R^2)_2$ 를 나타내는 경우, R^2 는 바람직하게는 각 경우 동일 또는 상이하게 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 선형 알킬기 또는 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 또는 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리계 (이는 또한 하나 이상의 라디칼 R^3 으로 치환될 수 있음) 를 나타낸다. 이 경우, R^2 는 매우 특히 바람직하게는 메틸기 또는 페닐기를 나타낸다.

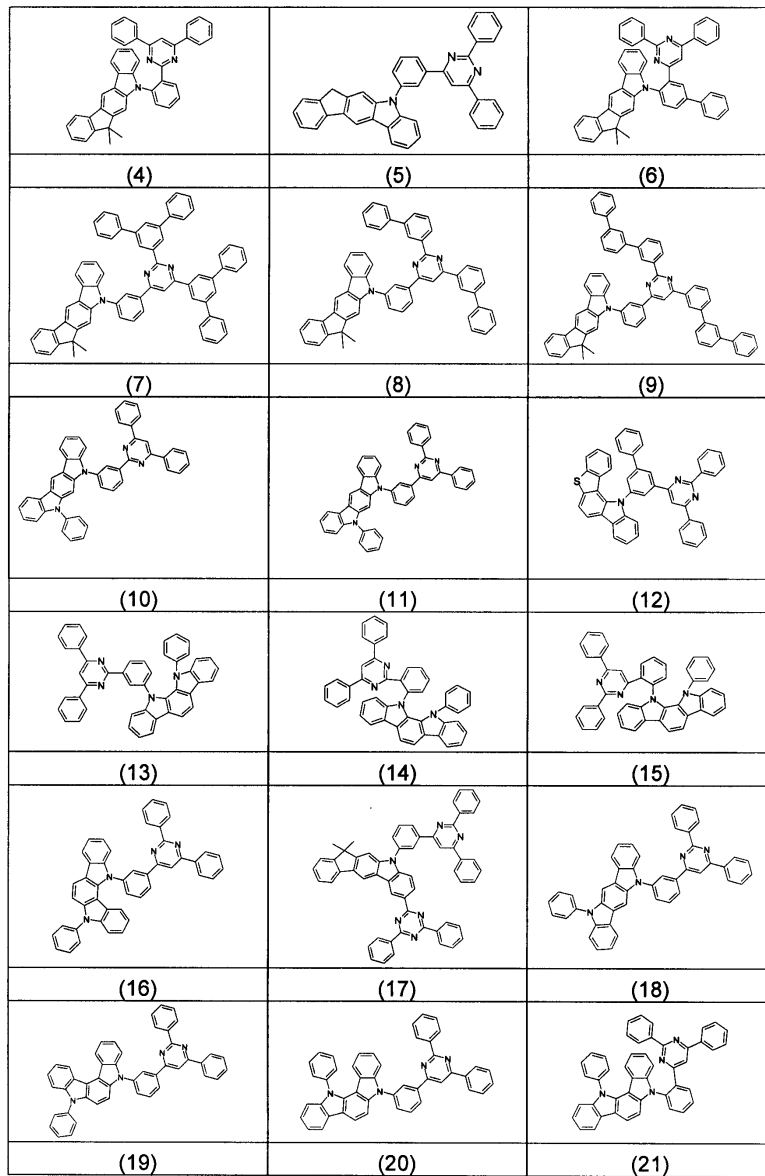
[0059] 본 발명의 추가 바람직한 구현예에서, R, R^1 또는 R^2 에 대해 라디칼의 형태일 수 있는 라디칼 R^3 은 H 와 동일하다.

[0060] 상술된 구현예는 원하는대로 서로 조합될 수 있다. 특히, 상술된 바람직한 구현예를 서로, 즉 화학식 (1a) 내지 (1c) 또는 (2a) 의 화합물과 화학식 (3), (4) 또는 (5) 또는 (3a), (4a) 또는 (5a) 의 피리미딘기 및 화학식 (6) 내지 (22) 의 카르바줄 유도체와 조합하는 것이 바람직하다; 더욱이 화합물은 또한 바람직하게는 상기 바람직한 것으로 언급된 치환기 및 상기 바람직한 것으로 언급된 기 Y 를 함유한다.

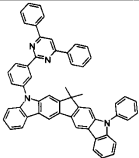
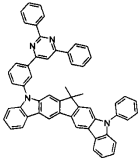
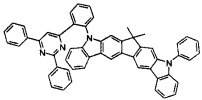
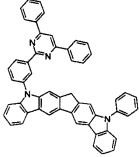
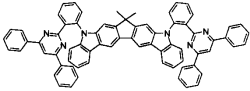
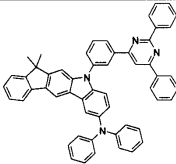
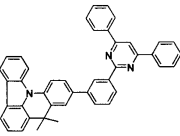
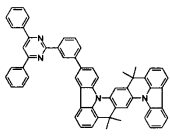
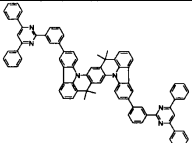
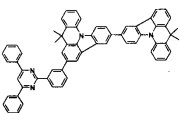
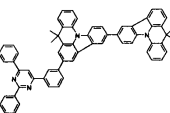
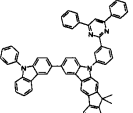
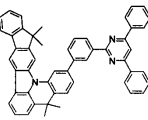
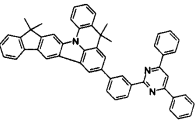
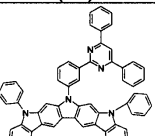
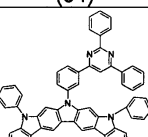
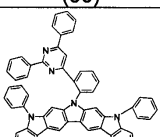
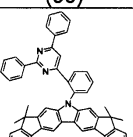
[0061] 상술된 구현예 또는 화합물에 따른 바람직한 화합물의 예는 바람직하게는 유기 전자 소자에 이용될 수 있기 때문에, 하기 화합물이다:



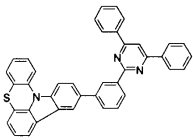
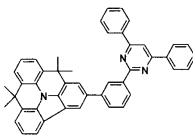
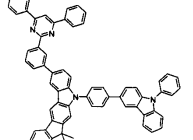
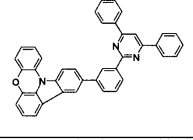
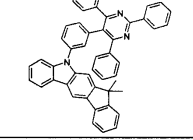
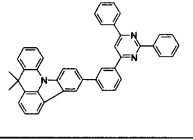
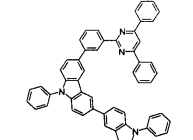
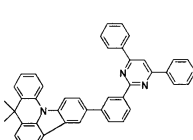
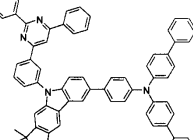
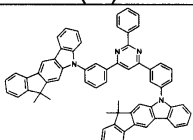
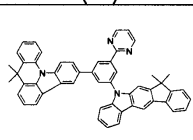
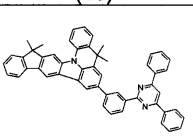
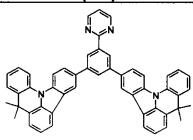
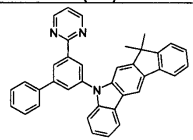
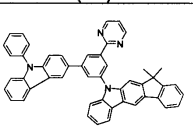
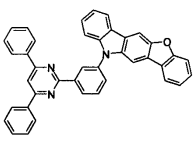
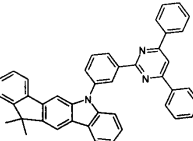
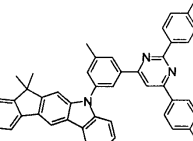
[0062]



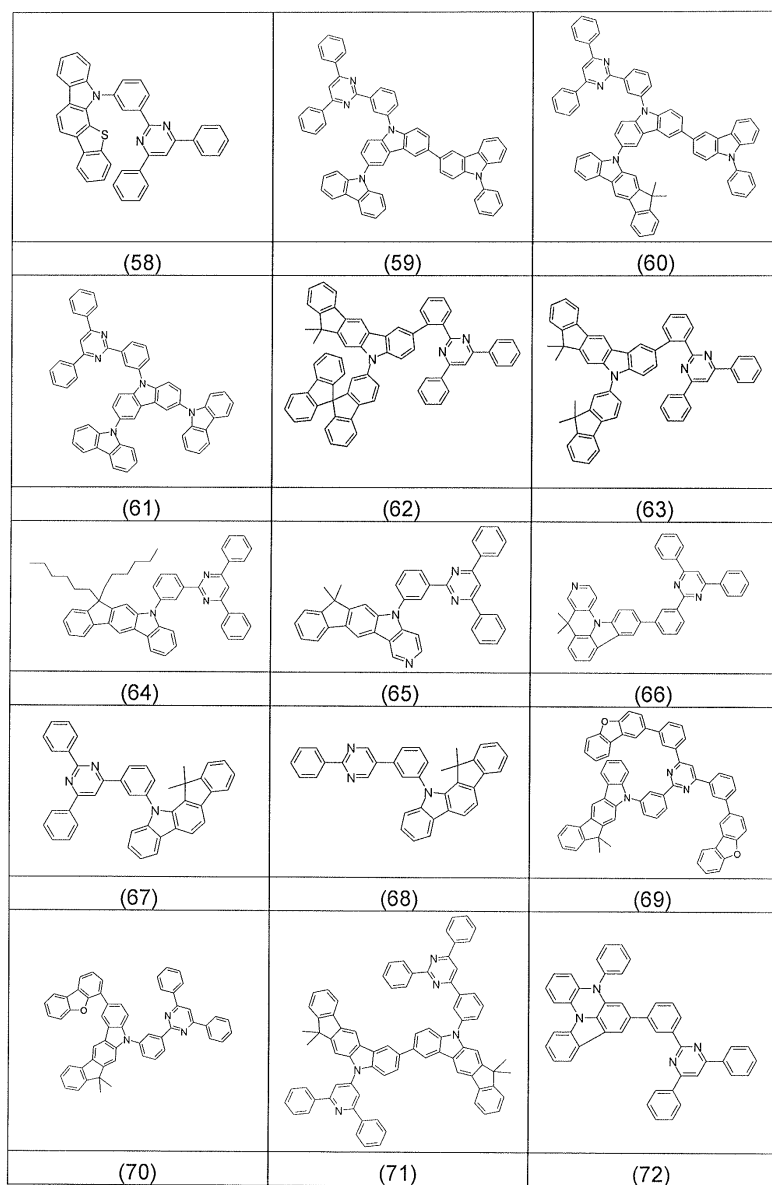
[0063]

		
(22)	(23)	(24)
		
(25)	(26)	(27)
		
(28)	(29)	(30)
		
(31)	(32)	(33)
		
(34)	(35)	(36)
		
(37)	(38)	(39)

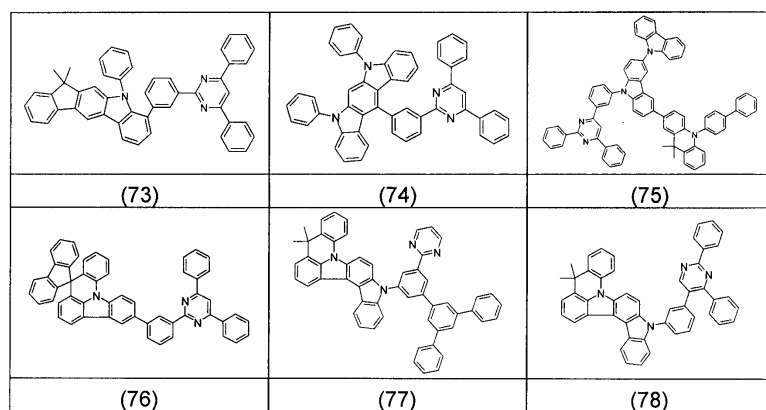
[0064]

		
(40)	(41)	(42)
		
(43)	(44)	(45)
		
(46)	(47)	(48)
		
(49)	(50)	(51)
		
(52)	(53)	(54)
		
(55)	(56)	(57)

[0065]



[0066]



[0067]

[0068]

본 발명에 따른 화합물의 합성은 예를 들어, 화학식 (1)의 화합물의 경우, 브롬이 메타-위치에서 피리미딘과 결합되고, 화학식 (2)의 화합물의 경우, 브롬이 오르토-위치에서 피리미딘과 결합된 임의로 추가 치환된 브로모페닐피리미딘 유도체로부터 시작한다. 브롬 대신에, 다른 반응성 이탈기, 예컨대, 요오드, 염소 또는 트리플레이트가 또한 이용될 수 있다. 그런 다음 상기 화합물이 상응하는 카르바졸 유도체에 커플링된다. 상기 목적을 위해, 특히, 전이-금속-촉진된 커플링 반응이 적합하다. 페닐-피리미딘기가 카르바졸 유도체의 질소에 직접 결합되는 경우, 팔라듐-촉진된 하르트비그-부흐발트 (Hartwig-Buchwald) C-N 커플링이 상기 목

적을 위해 특히 적합하다. 페닐피리미딘기가 카르바졸의 탄소 원자에 결합되는 경우, 예를 들어 스즈키 또는 스틸 (Stille) 에 따른 팔라듐-촉진된 C-C 커플링이 상기 목적을 위해 특히 적합하다. 상기 목적을 위해, 카르바졸 유도체는 또한 상응하는 적합한 이탈기, 특히 염소, 브롬, 요오드, 트리플레이트 또는 보론산 유도체, 특히 보론산 또는 보론산 에스테르를 함유해야 한다. 또한, 상응하는 보론산 유도체, 특히 보론산 또는 보론산 에스테르가 예를 들어, 브로모페닐피리미딘 유도체 대신에 상기 목적을 위한 출발 물질로서 적합하다.

[0069] 따라서 본 발명은 또한 하기 반응 단계를 포함하는 화학식 (1) 또는 (2) 의 화합물의 제조 방법에 관한 것이다:

[0070] a) 피리미딘에 대한 메타-위치 또는 오르토-위치에서 페닐기에 반응성 이탈기, 특히 염소, 브롬, 요오드, 트리플레이트 또는 보론산 유도체, 특히 보론산 또는 보론산 에스테르를 함유하는 임의로 치환된 페닐피리미딘 유도체의 합성 단계; 및

[0071] b) 상기 페닐피리미딘 유도체의 카르바졸 유도체로의 커플링 단계.

[0072] 본 발명은 본 발명에 따른 하나 이상의 화합물 및 하나 이상의 추가 화합물을 포함하는 혼합물에 관한 것이다.

본 발명에 따른 화합물이 매트릭스 재료로서 사용되는 경우, 추가 화합물은 예를 들어, 형광 또는 인광 도판트일 수 있다. 적합한 형광 및 인광 도판트는 유기 전계발광 소자와 조합하여 하기를 나타내고 또한 본 발명에 따른 혼합물에 대해 바람직하다.

[0073] 용액 또는 액체상으로부터, 예를 들어 스핀 코팅 또는 인쇄 공정에 의한 가공의 경우, 본 발명에 따른 화합물 또는 혼합물의 용액 또는 제형이 필요하다. 2 종 이상의 용매의 혼합물을 사용하는 것이 바람직할 수 있다.

적합하고 바람직한 용매는 예를 들어, 톨루엔, 아니솔, o-, m- 또는 p-자일렌, 메틸 벤조에이트, 디메틸아니솔, 메시틸렌, 테트라린, 베라트론, THF, 메틸-THF, THP, 클로로벤젠, 디옥산 또는 이들 용매의 혼합물이다.

[0074] 따라서 본 발명은 또한 본 발명에 따른 하나 이상의 화합물 또는 혼합물 및 하나 이상의 용매, 특히 유기 용매를 포함하는 제형, 특히 용액, 현탁액 또는 미니-에멀전에 관한 것이다. 상기 유형의 용액이 제조될 수 있는 방식은 당업자에게 공지되어 있고, 예를 들어, WO 2002/072714, WO 2003/019694 및 본원에 인용된 문헌에 기술되어 있다.

[0075] 본 발명에 따른 화합물 또는 혼합물은 전자 소자에 사용하기에 적합하다. 여기서 전자 소자는 하나 이상의 유기 화합물을 포함하는 하나 이상의 층을 포함하는 소자를 의미하는 것으로 여겨진다. 그러나 부품은 무기 재료 또는 또한 전적으로 무기 재료로부터 형성된 층을 또한 포함할 수 있다.

[0076] 그러므로 또한 본 발명은 전자 소자, 특히 유기 전계발광 소자에 있어서, 상기 언급된 본 발명에 따른 화합물 또는 혼합물의 용도에 관한 것이다.

[0077] 또한 본 발명은 상기 언급된 본 발명에 따른 화합물 또는 혼합물 중 하나 이상을 포함하는 전자 소자에 관한 것이다. 화합물에 대해 상기 언급된 바람직한 것이 마찬가지로 전자 소자에 적용된다.

[0078] 전자 소자는 바람직하게는 유기 전계발광 소자 (OLED, PLED), 유기 집적 회로 (O-IC), 유기 전계-효과 트랜지스터 (O-FET), 유기 박막 트랜지스터 (O-TFT), 유기 발광 트랜지스터 (O-LET), 유기 태양 전지 (O-SC), 유기 염료-감응형 태양 전지, 유기 광학적 탐지기, 유기 광수용체, 유기 전계-퀸치 (field-quench) 소자 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 "유기 플라스몬 방사 소자" (D. M. Koller 등, *Nature Photonics* 2008, 1-4) 로 이루어지는 군으로부터 선택되나, 바람직하게는 유기 전계발광 소자 (OLED), 특히 바람직하게는 인광 OLED 이다.

[0079] 유기 전계발광 소자는 캐소드, 애노드 및 하나 이상의 방사층을 포함한다. 이들 층 외에, 유기 전계발광 소자는 추가의 층, 예를 들어 각 경우 하나 이상의 정공-주입층, 정공-수송층, 정공-차단층, 전자-수송층, 전자-주입층, 여기자-차단층, 전자-차단층 및/또는 전하-생성층을 또한 포함할 수 있다. 마찬가지로, 예를 들어, 여기자-차단 기능을 갖는, 중간층이 2 개의 방사층 사이에 도입되는 것이 가능하다. 그러나, 이들 층 각각이 반드시 존재할 필요는 없다는 점에 주목해야 한다. 유기 전계발광 소자는 하나의 방사층 또는 복수의 방사층을 포함할 수 있다. 복수의 방사층이 존재하는 경우, 이들은 바람직하게는 전체로서 380 nm 와 750 nm 사이에 복수의 방사 최대치를 가져, 전체적으로 백색 방사를 초래하며, 즉 형광 또는 인광을 발할 수 있는 다양한 방사 화합물이 방사층에 사용된다. 3 개의 방사층을 갖는 시스템이 특히 바람직하며, 여기서 3 개의 층은 청색, 녹색 및 주황색 또는 적색 방사를 발한다 (기본 구조에 관해, 예를 들어, WO 2005/011013 참조). 이들은 형광 및 인광 방사층이 서로 조합된 형광 또는 인광 방사층 또는 혼성 시스템일 수 있다.

- [0080] 상기 지시된 구현예에 따른 본 발명에 따른 화합물은 정밀 구조에 따라 여러 층에 이용될 수 있다. 형광 또는 인광 방사체용, 특히 인광 방사체용 매트릭스 재료로서, 및/또는 정공-차단층에 및/또는 전자-수송층에 화학식 (1), (2)의 화합물 또는 상술된 바람직한 구현예를 포함하는 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 상기 지시된 바람직한 구현예는 유기 전자 소자에 있어서 상기 재료의 용도에 또한 적용된다.
- [0081] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 화학식 (1) 또는 (2)의 화합물 또는 상술된 바람직한 구현예는 방사층에서 형광 또는 인광 화합물용, 특히 인광 화합물용 매트릭스 재료로서 이용된다. 여기서 유기 전계발광 소자는 하나의 방사층 또는 복수의 방사층을 포함할 수 있고, 여기서 하나 이상의 방사층은 매트릭스 재료로서 본 발명에 따른 하나 이상의 화합물을 포함한다.
- [0082] 화학식 (1) 또는 (2)의 화합물 또는 상술된 바람직한 구현예가 방사층에서 방사 화합물용 매트릭스 재료로서 이용되는 경우, 바람직하게는 하나 이상의 인광 재료 (삼중항 방사체)와의 조합으로 이용된다. 본 발명의 의미에서 인광은 비교적 높은 스핀 다중도, 즉 스핀 상태 > 1 의 여기된 상태로부터의, 특히 여기된 삼중항 상태로부터의 발광을 의미하는 것으로 여겨진다. 이러한 적용을 위해, 모든 발광성 전이 금속 착물 및 발광성 란탄계 착물, 특히 모든 이리듐, 백금 및 구리 착물이 인광 화합물로 여겨져야 한다.
- [0083] 화학식 (1) 또는 (2)의 화합물 또는 상술된 바람직한 구현예 및 방사 화합물의 혼합물은 방사체 및 매트릭스 재료를 포함하는 전체 혼합물에 기초하여 99 내지 1 부피%, 바람직하게는 98 내지 10 부피%, 특히 바람직하게는 97 내지 60 부피%, 특히 95 내지 80 부피%의 화학식 (1) 또는 (2)의 화합물 또는 상술된 바람직한 구현예를 포함한다. 따라서, 혼합물은 방사체 및 매트릭스 재료를 포함하는 전체 혼합물에 기초하여 1 내지 99 부피%, 바람직하게는 2 내지 90 부피%, 특히 바람직하게는 3 내지 40 부피%, 특히 5 내지 20 부피%의 방사체를 포함한다.
- [0084] 본 발명의 추가의 바람직한 구현예는 추가의 매트릭스 재료와 조합된 인광 방사체용 매트릭스 재료로서의, 화학식 (1) 또는 (2)의 화합물 또는 상술된 바람직한 구현예의 용도이다. 화학식 (1) 또는 (2)의 화합물 또는 상술된 바람직한 구현예와 조합하여 사용될 수 있는 특히 적합한 매트릭스 재료는 방향족 케톤, 방향족 포스핀 옥시드, 또는 방향족 술폰시드 또는 술폰 (예를 들어, WO 2004/013080, WO 2004/093207, WO 2006/005627 또는 WO 2010/006680에 따름), 트리아릴아민, 카르바졸 유도체, 예를 들어 CBP (N,N-비스카르바졸릴바이페닐) 또는 WO 2005/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527 또는 WO 08/086851에 개시된 카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746에 따른 인돌로카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 2010/136109 또는 WO 2011/000455에 따른 인데노카르바졸 유도체, 예를 들어 EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160에 따른 아자카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 07/137725에 따른 이극성 매트릭스 재료, 예를 들어 WO 2005/111172에 따른 실란, 예를 들어 WO 2006/117052에 따른 아자보롤 또는 보로닉 에스테르, 예를 들어 WO 2010/015306, WO 07/063754 또는 WO 08/056746에 따른 트리아진 유도체, 또는 예를 들어 EP 652273 또는 WO 2009/062578에 따른 아연 착물, 예를 들어 WO 2010/054729에 따른 디아자실롤 또는 테트라아자실롤 유도체, 예를 들어 WO 2010/054730에 따른 디아자포스폴 유도체, 또는 예를 들어 US 2009/0136779, WO 2010/050778, WO 2011/042107, WO 2011/060867 또는 WO 2011/088877에 따른 가교된 카르바졸 유도체이다. 실제 방사체보다 더 짧은 파장에서 방사하는 추가 인광 방사체는 또한 공동-호스트로서 혼합물에 존재할 수 있다. 본 발명에 따른 화합물이 전자-수송 화합물이기 때문에, 추가 매트릭스 성분이 정공-수송 성질을 갖는 것이 바람직하다.
- [0085] 적합한 인광 화합물 (= 삼중항 방사체)은 특히 적합한 여기상태에서 바람직하게는 가시 영역에서 발광하고, 부가적으로 20 초과, 바람직하게는 38 초과 84 미만, 특히 바람직하게는 56 초과 80 미만의 원자 번호를 갖는 하나 이상의 원자, 특히 상기 원자 번호를 갖는 금속을 함유하는 화합물이다. 사용되는 인광 방사체는 바람직하게는 구리, 몰리브덴, 텅스텐, 레늄, 루테튬, 오스뮴, 로듐, 이리듐, 팔라듐, 백금, 은, 금 또는 유로퓸을 함유하는 화합물, 특히 이리듐 또는 백금을 함유하는 화합물이다. 본 발명의 목적을 위해서, 상술된 금속을 함유하는 모든 발광 화합물은 인광 화합물로서 간주된다.
- [0086] 상기에서 기술된 방사체의 예는 출원 WO 00/70655, WO 2001/41512, WO 2002/02714, WO 2002/15645, EP 1191613, EP 1191612, EP 1191614, WO 05/033244, WO 05/019373, US 2005/0258742, WO 2009/146770, WO 2010/015307, WO 2010/031485, WO 2010/054731, WO 2010/054728, WO 2010/086089, WO 2010/099852, WO 2010/102709, WO 2011/032626, WO 2011/066898에 공개되어 있다. 또한, 미공개된 출원 EP 10006208.2 및 DE 102010027317.1에 따른 착물이 적합하다. 일반적으로, 인광 OLED에 대한 선행기술에 따라 사용되고, 유기 전계발광의 분야의 당업자에게 공지된 바와 같은 모든 인광 착물이 적합하고, 당업자는 진보적인 단계 없

이 또다른 인광 작물을 사용할 수 있을 것이다.

- [0087] 본 발명의 추가의 구현예에서, 예를 들어, 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자는 별도의 정공-주입층 및/또는 정공-수송층 및/또는 정공-차단층 및/또는 전자-수송층을 포함하지 않으며, 즉, 방사층이 정공-주입층 또는 애노드에 바로 인접하고/거나, 방사층이 전자-수송층 또는 전자-주입층 또는 캐소드에 바로 인접하고, WO 2005/053051 에 기재된 바와 같다. 또한, 예를 들어, WO 2009/030981 에 기재된 바와 같이, 방사층에서 금속 작물과 동일 또는 유사한 금속 작물을 방사층에 바로 인접하는 정공-수송 또는 정공-주입 재료로서 사용하는 것이 가능하다.
- [0088] 본 발명의 추가의 바람직한 구현예에서, 화학식 (1) 또는 (2) 의 화합물 또는 상술된 바람직한 구현예가 전자-수송 또는 전자-주입층의 전자-수송 재료로서 이용된다. 여기서 방사층은 형광 또는 인광일 수 있다. 상기 화합물이 전자-수송 재료로서 이용되는 경우, 바람직하게는 예를 들어 알칼리 금속 작물, 예컨대, 예를 들어, Liq (리튬 히드록시퀴놀리네이트) 로 도핑될 수 있다.
- [0089] 본 발명의 추가의 바람직한 구현예에서, 화학식 (1) 또는 (2) 의 화합물 또는 상술된 바람직한 구현예가 정공-차단층에 이용된다. 정공-차단층은 특히 인광 전계발광 소자에서 캐소드 쪽의 방사층에 바로 인접하는 층을 의미하는 것으로 여겨진다.
- [0090] 또한 화학식 (1) 또는 (2) 의 화합물 또는 상술된 바람직한 구현예를 정공-차단층 또는 전자-수송층에 및 방사층의 매트릭스로서 사용하는 것이 또한 가능하다.
- [0091] 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자의 추가의 층에서, 선행 기술에 따라 통상적으로 이용되는 모든 재료를 사용하는 것이 가능하다. 그러므로 당업자는, 진보적 단계 없이, 유기 전계발광 소자에 대해 공지된 모든 재료를 본 발명에 따른 화학식 (1) 또는 (2) 의 화합물 및 상술된 바람직한 구현예와 조합하여 이용할 수 있을 것이다.
- [0092] 또한, 하나 이상의 층이 승화 공정을 사용하여 코팅되고, 재료는 10^{-5} mbar 미만, 바람직하게는 10^{-6} mbar 미만의 초기 압력에서 진공 승화 유닛에서 증착되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 그러나, 또한, 초기 압력이 낮거나 높은, 예를 들어 10^{-7} mbar 미만인 것이 가능하다.
- [0093] 마찬가지로 하나 이상의 층이 OVPD (유기 기상 증착) 방법에 의해 또는 캐리어-기체 승화에 의해 코팅되고, 재료는 10^{-5} mbar 내지 1 bar 의 압력에서 적용되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 이러한 방법의 특별한 경우는 OVJP (유기 증기 제트 인쇄) 방법이고, 여기서 재료가 노즐을 통해 직접적으로 적용되어 구조화된다 (예를 들어 M. S. Arnold *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **2008**, *92*, 053301).
- [0094] 또한, 하나 이상의 층이, 예를 들어 스핀 코팅에 의해 용액으로부터 제조되거나, 예를 들어 잉크-젯 인쇄, LITI (광 유도 열 이미징, 열전사 인쇄), 스크린 인쇄, 플렉소그래픽 인쇄, 오프셋 인쇄 또는 노즐 인쇄와 같은 임의의 원하는 인쇄 공정에 의해 제조되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 예를 들어 적절한 치환에 의해 얻어지는 가용성 화합물이 이러한 목적을 위해 필요하다. 이러한 공정은 또한 올리고머, 덴드리머 및 중합체에 특히 적합하다.
- [0095] 예를 들어, 하나 이상의 층이 용액으로부터 도포되고, 하나 이상의 추가의 층이 증착에 의해 도포되는, 혼성 공정이 또한 가능하다. 따라서, 예를 들어, 용액으로부터 방사층을 적용하고 증착에 의해 전자-수송층을 적용하는 도포하는 것이 가능하다.
- [0096] 이들 공정은 일반적으로 당업자에게 공지되어 있고, 당업자에 의해 진보적 단계 없이 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자에 적용될 수 있다.
- [0097] 본 발명에 따른 화합물 및 본 발명에 따른 전계발광 소자는 하기 놀라운 이점들 중 하나 이상에 의해 선행 기술과 구별된다:
- [0098] 1. 본 발명에 따른 화합물은 형광 또는 인광 방사체용 매트릭스 재료로서 이용시 매우 높은 효율 및 긴 수명과 동시에 향상된 작동 전압을 초래한다. 이는, 특히, 상기 화합물이 인광 방사체용 매트릭스 재료로서 이용되는 경우에 적용된다.
- [0099] 2. 본 발명에 따른 화합물은 정밀 구조에 따라 적색- 및 녹색-인광 화합물용 매트릭스로서 뿐만 아니라, 특히, 또한 청색-인광 화합물용 매트릭스로서 적합하다.

[0100] 3. 전자-수송 재료 또는 정공-차단 재료로서 사용시, 본 발명에 따른 화합물은 유기 전계발광 소자의 작동 전압, 효율 및 수명에 관한 매우 양호한 성질을 초래한다.

[0101] 4. 본 발명에 따른 화합물은 높은 유리-전이 온도를 가지므로, 비교적 높은 열 응력이 예상되는 적용에도 적합하다.

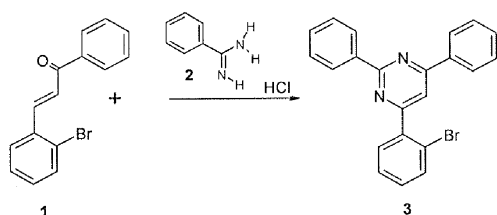
[0102] 이러한 상술된 장점은 다른 전자 특성의 장애와 동반되지 못한다.

[0103] 본 발명을 이하의 실시예에 의해 더 상세히 설명하지만, 이에 의해 제한되는 것은 아니다. 당업자는 설명을 이용하여 공개된 범위에서 발명을 실시하거나, 발명에 따른 추가의 화합물을 발명의 단계 없이 제조하고 이를 전자 소자에 사용하거나, 발명에 따른 공정을 사용할 수 있을 것이다.

[0104] **실시예:**

[0105] 다르게 지시되지 않는 한, 보호성-기체 하에 하기 합성을 실시했다. 본 발명에 따른 화학식 (1) 또는 (2)의 화합물은 당업자에게 일반적으로 공지된 합성 단계에 의해 제조될 수 있다. 사용되는 출발 물질은 예를 들어, 3-(브로모페닐)-1-페닐-2-프로펜-1-온 (*Chemistry & Biodiversity*, **2005**, 2(12), 1656-1664), 및 2,12-디메틸-10-페닐-10,12-디히드로-10-아자인테노[2,1-b]플루오렌 (WO 2010/136109 에 따름), 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-피리미딘, 4-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐피리미딘 및 4-(3,5-디브로모페닐)-4,6-디페닐피리미딘 (WO 2005/085387) 및 2-(3,5-디브로모페닐)-4,6-디페닐피리미딘 (US 2007/0141387) 일 수 있다. 문헌에 공지된 화합물의 경우 괄호 안의 용어는 CAS 번호이다.

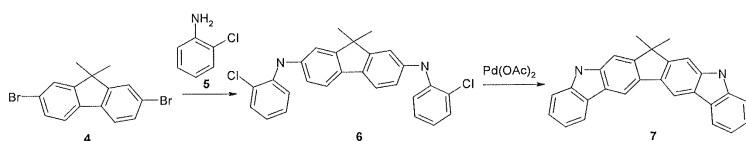
[0106] **실시예 1: 4-(2-브로모페닐)-2,6-디페닐피리미딘 3**



[0107]

[0108] 23 g (409 mmol)의 수산화칼륨을 500 ml의 에탄올에 용해하고, 40 g (255 mmol)의 벤자미드 히드로클로라이드 2 및 129 g (452 mmol)의 (3-(브로모페닐)-1-페닐-2-프로펜-1-온 1을 500 ml의 에탄올에 용해하여, 실온에서 첨가하고, 혼합물을 3 시간 동안 환류 하에 교반하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 침전된 고체를 석션으로 여과하고, 소량의 에탄올로 세척하고 건조시키고, 생성물의 50 %가 무색 결정의 형태인 55 g (129 mmol)이 남았다.

[0109] **실시예 2: 화합물 7**



[0110]

[0111] **단계 a: N,N'-비스-(2-클로로페닐)-9,9-디메틸-9H-플루오렌-2,7-디아민 6**

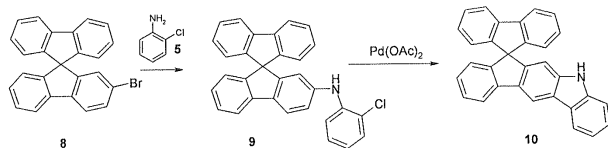
[0112] 40.48 g의 2,7-디브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌 4 (115 mmol), 21.4 g (21.5 ml)의 아닐린 5 (230 mmol), 1.91 g (3.5 mmol)의 1,1-비스(디페닐-포스피노)페로센, 0.64 g의 팔라듐(II) 아세테이트 (2.8 mmol) 및 57.2 g의 나트륨 tert-부톡시드 (598 mmol)을 20 시간 동안 1.3 l의 톨루엔 중에서 보호-기체 분위기 하에 끓도록 가열하였다. 이어서 혼합물을 톨루엔 및 물 사이에 분할하고, 유기상을 물로 3 회 세척하고 Na₂SO₄로 건조시키고 회전 증발기에서 증발시켰다. 남은 잔여물인 N,N'-비스-(2-클로로페닐)-9,9-디메틸-9H-플루오렌-2,7-디아민 6을 톨루엔/에틸 아세테이트로부터 재결정화하였다. 수율은 32.5 g (73 mmol, 63.5 %)이었다.

[0113] **단계 b: 화합물 7**

[0114] 300 ml의 디옥산을 28.9 g의 N,N'-비스-(2-클로로페닐)-9,9-디메틸-9H-플루오렌-2,7-디아민 6 (65 mmol), 0.73 g의 팔라듐(II) 아세테이트 (3.25 mmol) 및 37.5 g의 나트륨 tert-부톡시드 (390 mmol), 3.9 ml의, 톨

루엔 (3.9 mmol) 중의 $P(t-Bu)_3$ 의 1 M 용액에 첨가하고, 혼합물을 105℃ 에서 질소 하에 48 시간 동안 교반하였다. 그리고 나서 100 ml 의 디클로로메탄 및 0.1 M Na_2CO_3 용액을 첨가하였다. 혼합물을 물 및 디클로로메탄 사이에서 분할하고, 수상을 디클로로메탄으로 3 회 추출하고, 조합된 유기상을 Na_2SO_4 에 대해 건조시켜 회전 증발기에서 증발시켰다. 잔여물을 톨루엔/헵탄으로부터 재결정화하였다. 수율은 7.9 g (21.32 mmol, 57.3 %) 이었다.

[0115] **실시예 3: 10,12-디히드로-10-아자인덴노[2,1-b]-12,12-스피로플루오렌 10**



[0116]

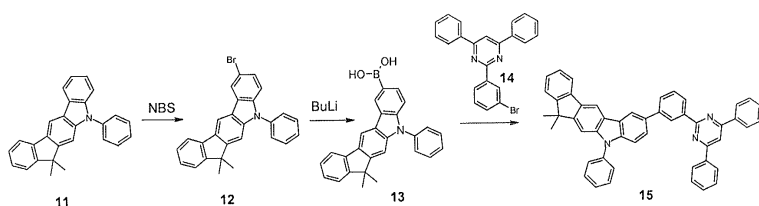
[0117] **단계 a: 9,9'-스피로바이[9H-플루오렌]-2-아민-N-(2-클로로페닐) 9**

[0118] 50 g 의 2-브로모-9,9'-스피로바이플루오렌 **8** (126 mmol), 14 ml 의 아닐린 **5** (154 mmol), 1.1 g (2 mmol) 의, 디클로로메탄을 갖는 1,1-비스-(디페닐포스피노)페로센팔라듐(II) 디클로라이드 착물, 0.4 g 의 팔라듐(II) 아세테이트 (1.78 mmol) 및 31 g 의 나트륨 tert-부톡시드 (323 mmol) 를 보호-기체 분위기 하에 1 ℓ 의 톨루엔에서 18 시간 동안 끓도록 가열하였다. 혼합물을 이어서 톨루엔 및 물 사이에 분할시키고, 유기상을 물로 3 회 세척하고 Na_2SO_4 로 건조시키고 회전 증발기에서 증발시켰다. 남아있는 잔여물을 헵탄/에틸 아세테이트로부터 재결정화하였다. 수율은 50 g (114 mmol, 93 %) 이었다.

[0119] **단계 b: 10,12-디히드로-10-아자인덴노[2,1-b]-12,12-스피로플루오렌 10**

[0120] 300 ml 의 피발산을 30 g 의 화합물 **9** (73.6 mmol), 1.6 g 의 팔라듐(II)아세테이트 (7.4 mmol) 및 1.6 g 의 탄산칼륨 (11.4 mmol) 에 첨가하고, 혼합물을 9 시간 동안 120℃ 에서 공기 중에 교반하였다. 이시간 이후, 1.6 g 의 팔라듐(II) 아세테이트 (7.4 mmol) 을 첨가하고, 혼합물을 120℃ 에서 추가 9 시간 동안 교반하였다. 그리고 나서 200 ml 의 디클로로메탄 및 0.1 M Na_2CO_3 용액을 첨가하였다. 혼합물을 물 및 디클로로메탄 사이에 분할시키고, 수상을 디클로로메탄을 사용하여 3 회 추출하고, 조합된 유기상을 Na_2SO_4 로 건조시키고 회전 증발기에서 증발시켰다. 잔여물을 톨루엔/헵탄으로부터 재결정화하였다. 수율은 11.9 g (29.4 mmol, 40 %) 이었다.

[0121] **실시예 4: 7-[3-(4,6-디페닐피리미딘-2-일)페닐]-12,12-디메틸-10-페닐-10,12-디히드로-10-아자인덴노[2,1-b]플루오렌 15**



[0122]

[0123] **단계 a: 7-브로모-12,12-디메틸-10-페닐-10,12-디히드로-10-아자-인덴노[2,1-b]플루오렌 12**

[0124] 14.4 g (40.18 mmol) 의 10-페닐-4-일-12,12-디메틸-10,12-디히드로-10-아자인덴노[2,1-b]플루오렌 **11** 을 450 ml 의 아세트니트릴에 현탁시키고, 7.15 g (40.18 mmol) 의 N-브로모숙신이미드를 일부씩 -20℃ 에서 반응 온도가 -20℃ 를 초과하지 않는 정도로 첨가하였다. 혼합물을 추가 18 시간 동안 교반하였고, 그 동안 온도가 실온이 되게 하였다. 이어서 반응 혼합물 회전 증발기에서 증발시키고, 디클로로메탄에서 용해하고 물로 세척하였다. 건조, 증발 및 이어서 톨루엔으로부터 순도 99.3 % 로 재결정화하여 9.6 g (55 %) 의 생성물을 백색 고체로서 산출하였다.

[0125] **단계 b: 7-보로노12,12-디메틸-10-페닐-10,12-디히드로-10-아자-인덴노[2,1-b]플루오렌 13**

[0126] 22.3 g (51 mmol) 의 7-브로모-12,12-디메틸-10-페닐-10,12-디히드로-10-아자인덴노[2,1-b]플루오렌 **12** 을 600 ml 의 건조 THF 에 용해시키고 -78℃ 로 냉각시켰다. 이 온도에서, 26.2 ml (65.7 mmol / 헥산 중 2.5 M) 의 n-BuLi 을 약 5 분에 걸쳐 첨가하고, 이어서 혼합물을 -78℃ 에서 추가 2.5 시간 동안 교반하였다. 이

온도에서, 7.3 ml (65.7 mmol)의 트리메틸 보레이트를 가능한 신속히 첨가하고, 반응이 서서히 실온이 되게 하였다 (약 18 시간). 반응 용액을 물로 세척하고, 침전된 고체 및 유기상을 톨루엔과의 공비혼합물을 사용하여 건조시켰다. 미정제 생성물을 톨루엔 / 메틸렌 클로라이드와 함께 약 40℃에서 교반함으로써 세척하고, 석션으로 여과하여, 16 g (82 %)의 생성물을 백색 고체로서 산출하였다.

단계 c): 7-[3-(4,6-디페닐피리미딘-2-일)-페닐]-12,12-디메틸-10-페닐-10,12-디히드로-10-아자인테노[2,1-b]플루오렌 15

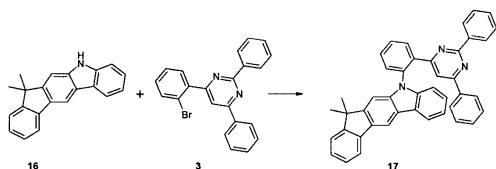
16 g (43.3 mmol)의 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐피리미딘 **14** 및 19.3 g (48 mmol)의 7-보로노-12,12-디메틸-10-페닐-10,12-디히드로-10-아자인테노[2,1-b]플루오렌 **13**을 80 ml의 톨루엔에 용해시키고 탈기시켰다. 281 ml의 탈기된 2M K₂CO₃ 및 2.5 g (2.2 mmol)의 Pd(OAc)₂를 첨가하였다. 반응 혼합물을 이어어서 48 시간 동안 80℃에서 보호-기체 분위기 하에 교반하였다. 추가적인 톨루엔을 냉각된 용액에 첨가하고, 이를 물로 여러 번 세척하고 건조 및 증발시켰다. 생성물을 컬럼 크로마토그래피로 실리카겔 상에서 톨루엔/헵탄 (1:2)을 사용하여 정제하였다. 순도는 99.9 % 였다. 수율: 22 g (31 mmol), 이론값의 77 %.

하기 화합물을 유사하게 수득하였다:

실시예	출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
4a				68%
4b				72%

[864377-28-6]

실시예 5: 10-[2-(2,6-디페닐피리미딘-4-일)-페닐]-12,12-디메틸-10,12-디히드로-10-아자인테노[2,1-b]플루오렌 17



22 g (79.8 mmol)의 2,12-디메틸-10-페닐-10,12-디히드로-10-아자인테노-[2,1-b]플루오렌 **16**, 34 g (87 mmol)의 4-(2-브로모페닐)-2,6-디페닐-피리미딘 **3** 및 15.9 ml (15.9 mmol)의 1 mol/l 트리-tert-부틸포스핀, 1.79 g (7.9 mmol)의 팔라듐 아세테이트를 보호기체 하에 120 ml의 p-자일렌에 현탁시켰다. 반응 혼합물을 환류 하에 16 시간 동안 가열하였다. 냉각 후, 유기상을 분리하고, 200 ml의 물로 3 회 세척하고, 이어서 증발건조시켰다. 잔여물을 고온 톨루엔으로 추출하고, 톨루엔으로부터 재결정화하고 마지막으로 높은 진공에서 승화시키고, 순도는 99.9 % 였다. 수율: 38 g (64 mmol), 이론의 80 %.

[0134] 하기 화합물을 유사하게 수득하였다:

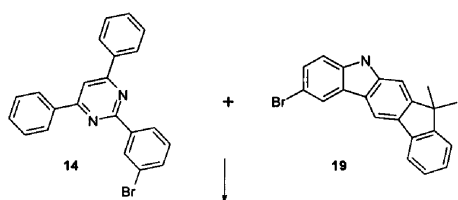
실시예	출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
5a		 [864377-22-0]		87%
5b		 [864377-28-6]		82%
5c		 [607740-08-9]		73%

[0135]

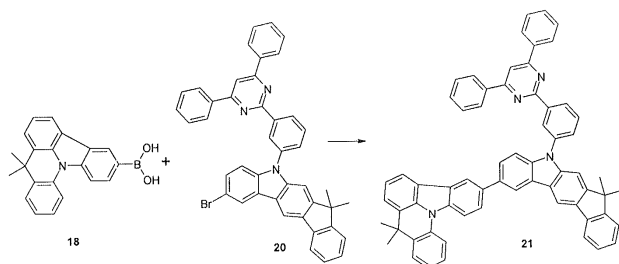
5d		 [942132-67-4]		71%
5e				56%
5f				79%
5g				83%
5h	 [1024598-06-8]			55%

[0136]

[0137] 실시예 6: 화합물 21



[0138]



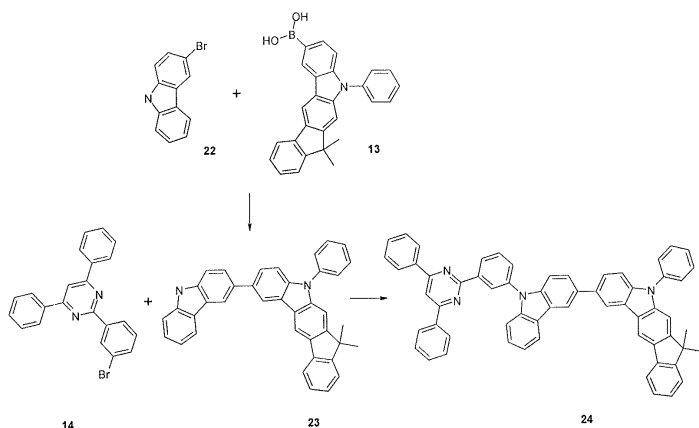
단계 a: 7-브로모-10-[3-(4,6-디페닐피리미딘-2-일)-페닐]-12,12-디메틸-10,12-디히드로-10-아자인테노[2,1-b]플루오렌 20

19.55 g (53.97 mmol)의 7-브로모-12,12-디메틸-10,12-디히드로-10-아자-인테노-[2,1-b]플루오렌 19, 22.99 g (59.37 mmol)의 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐피리미딘 14 및 15.84 g (164.81 mmol)의 NaOtBu를 820 ml의 p-자일렌에 현탁시켰다. 245.0 mg (1.09 mmol)의 Pd(OAc)₂ 및 3.3 ml의 1M 트리-tert-부틸포스핀 용액을 상기 현탁액에 첨가하였다. 반응 혼합물을 환류 하에 19 시간 동안 가열하였다. 냉각 후, 유기상을 분리하고, 100 ml의 물로 3 회 세척하고 이어서 증발건조시켰다. 잔여물을 고온 톨루엔으로 추출하고, 톨루엔으로부터 재결정화시켰다. 수율은 21.65 g (65 %)이다.

단계 b: 화합물 21

21.65 g (32.38 mmol)의 7-브로모-10-[3-(4,6-디페닐피리미딘-2-일)-페닐]-12,12-디메틸-10,12-디히드로-10-아자인테노[2,1-b]플루오렌 20, 11.65 g (36.62 mmol)의 화합물 18 및 3.82 g의 탄산나트륨을 1200 ml의 디옥산, 1200 ml의 톨루엔 및 500 ml의 물에 현탁시켰다. 1.92 g (1.66 mmol)의 Pd(PPh₃)₄를 상기 현탁액에 첨가하였다. 반응 혼합물을 환류 하에 5 시간 동안 가열하였다. 냉각 후, 침전된 고체를 석션으로 여과하고, 물 및 에탄올로 세척하고 건조시켰다. 잔여물을 고온 톨루엔으로 추출하고 톨루엔으로부터 재결정화시켰다. 수율은 14.1 g (50 %)이었다.

실시예 7: 화합물 24



단계 a: 7-(9H-카르바졸-3-일)-12,12-디메틸-10-페닐-10,12-디히드로-10-아자인테노[2,1-b]플루오렌 23

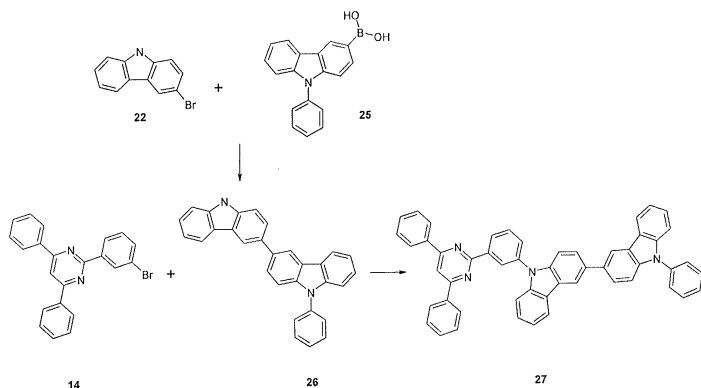
14.07 g (57.18 mmol)의 3-브로모-9H-카르바졸 22, 25.37 g (62.90 mmol)의 화합물 13 및 6.75 g의 탄산나트륨을 1800 ml의 디옥산, 1800 ml의 톨루엔 및 750 ml의 물에 현탁시켰다. 3.38 g (2.93 mmol)의 Pd(PPh₃)₄는 상기 현탁액에 첨가하였다. 반응 혼합물을 환류 하에 5 시간 동안 가열하였다. 냉각 후, 침전된 고체를 석션으로 여과하고, 물 및 에탄올로 세척하고 건조시켰다. 잔여물을 고온 톨루엔으로 추출하고 톨루엔으로부터 재결정화시켰다. 수율은 19.5 g (65 %)이었다.

단계 b: 7-(9-[3-(4,6-디페닐피리미딘-2-일)-페닐]-9H-카르바졸-3-일)-12,12-디메틸-10-페닐-10,12-디히드로-10-아자인테노[2,1-b]-플루오렌 24

19.50 g (37.17 mmol)의 7-(9H-카르바졸-3-일)-12,12-디메틸-10-페닐-10,12-디히드로-10-아자인테노[2,1-b]플루오렌 23, 15.83 g (40.88 mmol)의 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐피리미딘 14 및 10.91 g (113.50 mmol)의

NaOtBu 을 600 ml 의 p-자일렌에 현탁시켰다. 168.73 mg (0.75 mmol) 의 Pd(OAc)₂ 및 2.3 ml 의 1M 트리-tert-부틸포스핀 용액을 상기 현탁액에 첨가하였다. 반응 혼합물을 환류 하에 19 시간 동안 가열하였다. 냉각 후, 유기상을 분리시키고, 100 ml 의 물로 3 회 세척하고 이어서 증발건조시켰다. 잔여물을 고온 톨루엔으로 추출하고 톨루엔으로부터 재결정화하고 마지막으로 높은 진공에서 승화시켰다. 수율은 15.44 g (50 %) 였다.

[0150] 실시예 8: 화합물 27



[0151]

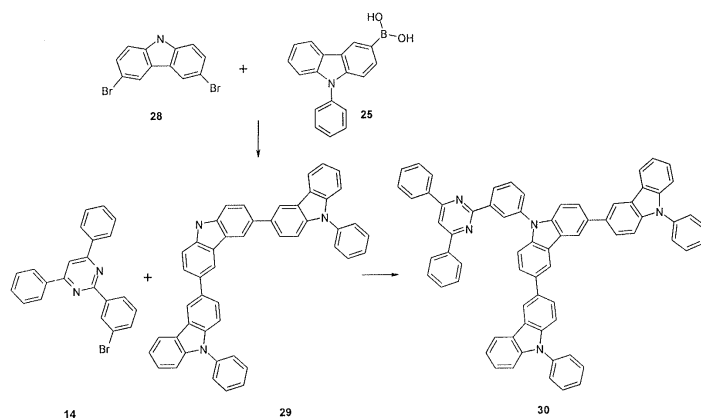
[0152] 단계 a: 9-페닐-9H,9'H-[3,3']바이카르바졸릴 26

[0153] 24.10 g (97.92 mmol) 의 3-브로모-9H-카르바졸 22, 30.93 g (107.71 mmol) 의 화합물 25 및 11.56 g 의 탄산 나트륨을 2500 ml 의 디옥산, 2500 ml 의 톨루엔 및 1000 ml 의 물에 현탁시켰다. 5.79 g (5.01 mmol) 의 Pd(PPh₃)₄ 를 상기 현탁액에 첨가하였다. 반응 혼합물을 환류 하에 5 시간 동안 가열하였다. 냉각 후, 침전된 고체를 석션으로 여과하고, 물 및 에탄올로 세척하고 건조시켰다. 잔여물을 고온 톨루엔으로 추출하고 톨루엔으로부터 재결정화시켰다. 수율은 22.0 g (55 %) 였다.

[0154] 단계 b: 9-[3-(4,6-디페닐피리미딘-2-일)-페닐]-9'-페닐-9H,9'H-[3,3']-바이카르바졸릴 27

[0155] 22.00 g (53.86 mmol) 의 9-페닐-9H,9'H-[3,3']바이카르바졸릴 26, 22.93 g (59.24 mmol) 의 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐피리미딘 14 및 15.81 g (164.47 mmol) 의 NaOtBu 을 820 ml 의 p-자일렌에 현탁시켰다. 244.79 mg (1.09 mmol) 의 Pd(OAc)₂ 및 3.3 ml 의 1M 트리-tert-부틸포스핀 용액을 상기 현탁액에 첨가하였다. 반응 혼합물을 환류 하에 19 시간 동안 가열하였다. 냉각 후, 유기상을 분리시키고, 100 ml 의 물로 3 회 세척하고 이어서 증발건조시켰다. 잔여물을 고온 톨루엔으로 추출하고, 톨루엔으로부터 재결정화시키고 마지막으로 높은 진공에서 승화시켰다. 수율은 23.10 g (60 %) 였다.

[0156] 실시예 9: 화합물 30



[0157]

[0158] 단계 a: 9,9''-디페닐-9H,9'H,9''H-[3,3';6',3'']터카르바졸 29

[0159] 22.51 g (69.25 mmol) 의 3,6-디브로모-9H-카르바졸 28, 43.75 g (152.36 mmol) 의 화합물 25 및 8.17 g 의 탄산나트륨을 2000 ml 의 디옥산, 2000 ml 의 톨루엔 및 900 ml 의 물에 현탁시켰다. 4.10 g (3.55 mmol) 의

Pd(PPh₃)₄ 를 상기 현탁액에 첨가하였다. 반응 혼합물을 환류 하에 5 시간 동안 가열하였다. 냉각 후, 침전된 고체를 석션으로 여과하고, 물 및 에탄올로 세척하고 건조시켰다. 잔여물을 고온 톨루엔으로 추출하고 톨루엔으로부터 재결정화시켰다. 수율은 28.8 g (64 %) 이었다.

[0160] 단계 b: 9'-[3-(4,6-디페닐피리미딘-2-일)-페닐]-9,9'-디페닐-9H,9'H,9'H-[3,3';6',3'']터카르바졸 30

28.8 g (44.32 mmol) 의 9,9'-디페닐-9H,9'H,9'H-[3,3';6',3'']터카르바졸 **29**, 18.88 g (48.76 mmol) 의 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐피리미딘 **14** 및 13.01 g (135.35 mmol) 의 NaOtBu 을 820 ml 의 p-자일렌에 현탁시켰다. 201.21 mg (0.90 mmol) 의 Pd(OAc)₂ 및 2.7 ml 의 1M 트리-tert-부틸포스핀 용액을 상기 현탁액에 첨가하였다. 반응 혼합물을 환류 하에 19 시간 동안 가열하였다. 냉각 후, 유기상을 분리시키고, 100 ml 의 물로 3 회 세척한 다음 증발건조시켰다. 잔여물을 고온 톨루엔으로 추출하고, 톨루엔으로부터 재결정화시키고 마지막으로 높은 진공에서 승화시켰다. 수율은 23.3 g (55 %) 이었다.

[0162] 실시예 10: OLED 의 제조

WO 2004/058911 에 따른 일반적 방법을 본원에 기재된 상황 (층 두께 변이, 재료) 에 맞게 조정하여 이용함으로써 비교 재료 또는 본 발명에 따른 재료를 포함하는 OLED 를 제조한다.

다양한 OLED 에 대한 데이터가 하기 실시예 V1-E17 에 제시되어 있다 (참조, 표 1 및 2). 구조화된 ITO (인듐 주석 산화물) 로 150 nm 두께로 코팅된 유리판을 가공 개선을 위해 PEDOT [폴리-(3,4-에틸렌디옥시-2,5-티오펜) 로 코팅되고, 물로부터 스핀-코팅됨; [H. C. Starck, Goslar, Germany 에서 구입] 로 20 nm 로 코팅한다. 이러한 코팅된 유리판은 OLED 가 적용되는 기판을 형성한다. OLED 는 원칙적으로 하기 층 구조를 갖는다: 기판 / 정공-수송층 (HTL) / 중간층 (IL) / 전자-차단층 (EBL) / 방사층 (EML) / 임의의 정공-차단층 (HBL) / 전자-수송층 (ETL) 및 마지막으로 캐소드. 캐소드는 100 nm 두께의 알루미늄 캐소드로 형성된다. OLED 의 정밀 구조가 표 1 에 제시되어 있다. OLED 의 제조에 사용한 재료가 표 3 에 제시되어 있다.

모든 재료를 진공 챔버 내에서 열 증착에 의해 도포한다. 여기서 방사층은 항상 하나 이상의 매트릭스 재료 (호스트 재료), 및 동시-증발에 의해 매트릭스 재료(들)과 특정 부피비로 혼합되는 방사 도펀트 (방사체) 로 이루어진다. 여기서 IC1:TEG1 (90%:10%) 와 같은 표현은 재료 IC1 이 층에 부피비 90% 로 존재하고, TEG1 가 부피비 10% 로 존재함을 의미한다. 유사하게, 전자-수송층도 2 종의 재료의 혼합물로 이루어질 수 있다.

OLED 는 표준 방법에 의해 특징지어진다. 이 목적을 위해, 발광 밀도에 따라 전계발광 스펙트럼, 전류 효율 (cd/A 로 측정됨), 전력 효율 (lm/W 으로 측정됨) 및 외부 양자 효율 (EQE, 센트 (cent) 당으로 측정됨) 을 전류/전압/발광 밀도 특성 선 (IUL 특성 선) 으로부터 계산하였고, 람베르트 (Lambert) 방사 측정을 추정하고, 수명이 결정된다. 전계발광 스펙트럼은 발광 밀도 1000 cd/m² 에서 측정되고 이로부터 CIE 1931 x 및 y 색 좌표가 계산된다. 표 2 에서 표현 U1000 은 1000 cd/m² 의 발광 밀도에 필요한 전압을 나타낸다. CE1000 및 PE1000 은 1000 cd/m² 에서 얻은 전류 및 전력 효율을 나타낸다. 마지막으로 EQE1000 은 1000 cd/m² 의 작동 발광 밀도에서의 외부 양자 효율이다. 수명 LT 는 정전류에서 작동시 발광밀도가 초기 발광 밀도 L0 에서부터 특정 비율 L1 까지 떨어진 후 시간을 의미한다. 표 2 에서 L0 = 4000 cd/m² 및 L1 = 80 % 의 명시는 컬럼 LT 에 나타난 수명이 상응하는 OLED 의 초기 발광 밀도가 4000 cd/m² 에서부터 3200 cd/m² 로 떨어진 후 시간에 상응하는 것을 의미한다. 수명의 값은 당업자에게 공지된 전환식의 도움으로 다른 초기 발광 밀도에 대한 수치로 전환될 수 있다. 초기 발광 밀도 1000 cd/m² 에 대한 수명은 이러한 경우 보통 인용된 값이다.

여러 OLED 의 대한 데이터는 표 2 에 요약하였다. 실시예 V1-112 는 비교예이고, 실시예 E1 은 본 발명에 따른 재료를 포함하는 OLED 의 데이터를 보여준다.

본 발명에 따른 화합물의 이점을 설명하기 위해 일부 실시예를 이하에서 더욱 상세히 설명한다. 그러나, 이것이 단지 표 2 에 제시된 데이터의 선택을 나타낸다는 점에 유의해야 한다. 표에서 보듯이, 더욱 상세히 설명되지 않은 본 발명에 따른 화합물을 사용하더라도 선행 기술보다 나은 개선이 달성되며, 어떤 경우는 모든 파라미터의 개선이, 어떤 경우는 오직 효율 또는 전압 또는 수명의 개선이 관찰된다. 그러나, 상이한 적용은 상이한 파라미터에 대한 최적화를 필요로하므로, 상기 파라미터 중 하나의 개선이라도 현저한 진보를 나타낸다.

[0169] 인광 OLED 에서 매트릭스 재료로서의 본 발명에 따른 화합물의 용도

본 발명에 따른 화합물의 장점은 화합물 H4-H6 에 관해서 IC1-IC3 및 IC5 와 비교하여 설명될 수 있다. 비

교 재료는 메타-연결된 페닐기 (IC2) 를 통해 또는 직접 (IC1) 질소에 결합된 트리아진을 함유하거나, 파라-연결된 페닐기 (IC5) 를 통해 또는 직접 (IC3) 질소에 결합된 피리미딘을 함유한 인데노카르바졸 유도체이다.

상기 비교 재료를 이미 포함한 OLED 는 양호한 값을 갖는다: 최소 전압 3.4 V, 외부 양자 효율 15.9 % 이하, 최대 전력 효율 50 lm/W 및 최대 수명 440 h 이 수득된다 (V4, V3). 이러한 값들은 더욱이 본 발명에 따른 비교할만한 화합물 H4-H6 을 사용하여 향상될 수 있고, 전압 3.2 V, 16.3% EQE, 57 lm/W 및 수명 490 h (E2) 이 수득된다. 본 발명에 따른 화합물 H4-H6 모두는 비교 재료에 비해 향상된 전압을 나타낸다.

[0171] 비교 화합물 IC6-IC9 와 본 발명에 따른 재료 H12 (IC6 및 IC7 과 비교, 실시예 V5, V6, E4, E5), H1-H3 (IC8 과 비교, 실시예 V7, E6-E8), 및 H10, H11 (IC9 와 비교, 실시예 V8, E9, E10) 와의 비교시 유사한 사진이 생긴다.

[0172] 언급된 실시예는 유의한 장점이 하기를 함유한 카르바졸 유도체에 비해 오르토- 또는 메타-연결된 페닐기를 통해 피리미딘에의 카르바졸 유도체의 연결에서 생긴다는 것을 나타낸다:

[0173] · 질소에 직접 결합된 피리미딘 또는 트리아진,

[0174] · 메타-연결된 페닐기를 통해 결합된 트리아진,

[0175] · 파라-연결된 페닐기를 통해 결합된 피리미딘.

[0176] 게다가, 비교 화합물 PyCbz1-PyCbz3 과 본 발명에 따른 재료 H6 (PyCbz1 와 비교, 실시예 V9, E3), H7, H8 (PyCbz2 와 비교, 실시예 V10, E11, E12) 및 H15 (PyCbz3 과 비교, 실시예 V11, E16) 와의 비교는 둘 이상의 가교를 갖는 카르바졸 유도체를 함유하는 본 발명에 따른 화합물이 순수한 카르바졸을 포함하는 유사한 재료에 비해 유의한 장점을 제공하는 것을 보여준다.

[0177] 더 나아가 본 발명에 따른 재료 (H9, H13, H15, H16) 또한 비교 재료에 비해 유의한 개선을 제공한다. 특히, 58 lm/W 의 전력 효율은 화합물 H13 을 사용함으로써 수득되고, 이는 동일한 소자 구조 (V1) 에서 가장 비교가 되는 재료의 경우 보다 10 % 초과한다. 수명에 관해서, 30 % 초과와 향상은 동일한 재료 (실시예 V1, E14) 를 사용하여 수득된다. 이례적으로 낮은 전압 3.0 V 는 화합물 H9 (실시예 E13) 를 사용하여 수득된다.

[0178] 인광 OLED 에서 매트릭스 재료로서 사용시, 본 발명에 따른 재료는 따라서 종래에 비해 모든 파라미터에서, 특히 전력 효율 및 수명에 대해 유의하게 개선시킨다. 본 발명에 따른 재료의 사용에 따른 전력 효율의 상당한 개선은 특히, 작동 전압의 유의한 개선의 결과로 볼 수 있다.

[0179] [표 1] OLED 의 구조

예	HTL 두께	IL 두께	EBL 두께	EML 두께	HBL 두께	ETL 두께
V1	SpA1 70nm	HATCN 5nm	BPA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	IC1 10nm	ST1:LiQ (50%:50%) 30 nm
V2	SpA1 70nm	HATCN 5nm	BPA1 90nm	IC2:TEG1 (90%:10%) 30nm	IC1 10nm	ST1:LiQ (50%:50%) 30 nm
V3	SpA1 70nm	HATCN 5nm	BPA1 90nm	IC3:TEG1 (90%:10%) 30nm	IC1 10nm	ST1:LiQ (50%:50%) 30 nm
V4	SpA1 70nm	HATCN 5nm	BPA1 90nm	IC5:TEG1 (90%:10%) 30nm	IC1 10nm	ST1:LiQ (50%:50%) 30 nm
V5	SpA1 70nm	HATCN 5nm	BPA1 90nm	IC6:TEG1 (85%:15%) 30nm	IC1 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm
V6	SpA1 70nm	HATCN 5nm	BPA1 90nm	IC7:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm
V7	SPA1 70nm	HATCN 5nm	BPA1 90nm	IC8:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 40nm
V8	SPA1 70nm	HATCN 5nm	BPA1 90nm	IC9:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 40nm
V9	SpA1	HATCN	BPA1	PyCbz1:TEG1	IC1	ST1:LiQ (50%:50%)

[0180]

	70nm	5nm	90nm	(90%:10%) 30nm	10nm	30 nm
V10	SpA1	HATCN	BPA1	PyCbz2:TEG1	IC1	ST1:LiQ (50%:50%)
	70nm	5nm	90nm	(90%:10%) 30nm	10nm	30 nm
V11	SpA1	HATCN	BPA1	PyCbz3:TEG1	IC1	ST1:LiQ (50%:50%)
	70nm	5nm	90nm	(90%:10%)30nm	10nm	30 nm
E1	SpA1	HATCN	BPA1	H4:TEG1 (90%:10%)	IC1	ST1:LiQ (50%:50%)
	70nm	5nm	90nm	30nm	10nm	30 nm
E2	SpA1	HATCN	BPA1	H5:TEG1 (90%:10%)	IC1	ST1:LiQ (50%:50%)
	70nm	5nm	90nm	30nm	10nm	30 nm
E3	SpA1	HATCN	BPA1	H6:TEG1 (90%:10%)	IC1	ST1:LiQ (50%:50%)
	70nm	5nm	90nm	30nm	10nm	30 nm
E4	SpA1	HATCN	BPA1	H12:TEG1 (85%:15%)	IC1	ST2:LiQ (50%:50%)
	70nm	5nm	90nm	30nm	10nm	30nm
E5	SpA1	HATCN	BPA1	H12:TEG1 (90%:10%)	---	ST2:LiQ (50%:50%)
	70nm	5nm	90nm	30nm		40nm
E6	SPA1	HATCN	BPA1	H1:TEG1 (90%:10%)	---	ETM1:LiQ (50%:50%)
	70nm	5nm	90nm	30nm		40nm
E7	SPA1	HATCN	BPA1	H2:TEG1 (90%:10%)	---	ETM1:LiQ (50%:50%)
	70nm	5nm	90nm	30nm		40nm
E8	SPA1	HATCN	BPA1	H3:TEG1 (90%:10%)	---	ETM1:LiQ (50%:50%)
	70nm	5nm	90nm	30nm		40nm
E9	SPA1	HATCN	BPA1	H10:TEG1 (90%:10%)	---	ETM1:LiQ (50%:50%)
	70nm	5nm	90nm	30nm		40nm
E10	SPA1	HATCN	BPA1	H11:TEG1 (90%:10%)	---	ETM1:LiQ (50%:50%)
	70nm	5nm	90nm	30nm		40nm
E11	SpA1	HATCN	BPA1	H7:TEG1 (90%:10%)	IC1	ST1:LiQ (50%:50%)
	70nm	5nm	90nm	30nm	10nm	30 nm
E12	SpA1	HATCN	BPA1	H8:TEG1 (90%:10%)	IC1	ST1:LiQ (50%:50%)
	70nm	5nm	90nm	30nm	10nm	30 nm
E13	SpA1	HATCN	BPA1	H9:TEG1 (90%:10%)	IC1	ST1:LiQ (50%:50%)
	70nm	5nm	90nm	30nm	10nm	30 nm
E14	SpA1	HATCN	BPA1	H13:TEG1 (90%:10%)	IC1	ST1:LiQ (50%:50%)
	70nm	5nm	90nm	30nm	10nm	30 nm
E15	SpA1	HATCN	BPA1	H14:TEG1 (90%:10%)	IC1	ST1:LiQ (50%:50%)
	70nm	5nm	90nm	30nm	10nm	30 nm
E16	SpA1	HATCN	BPA1	H15:TEG1 (90%:10%)	IC1	ST1:LiQ (50%:50%)
	70nm	5nm	90nm	30nm	10nm	30 nm
E17	SpA1	HATCN	BPA1	H16:TEG1 (90%:10%)	IC1	ST1:LiQ (50%:50%)
	70nm	5nm	90nm	30nm	10nm	30 nm

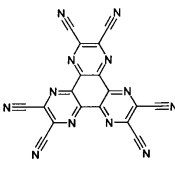
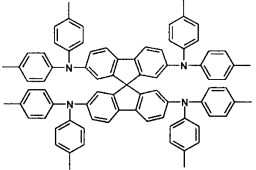
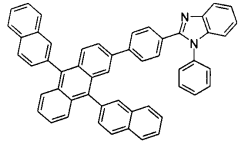
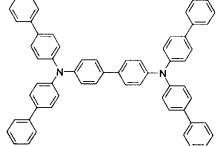
[0181]

[0182] [표 2]

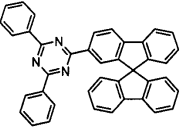
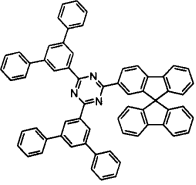

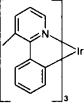
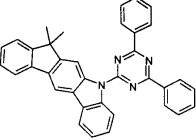
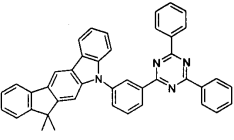
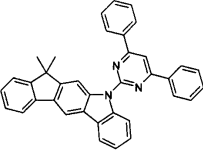
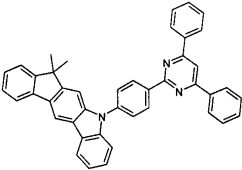
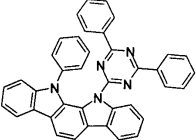
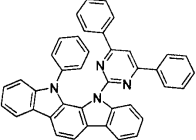
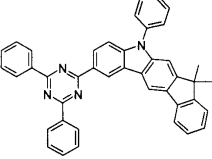
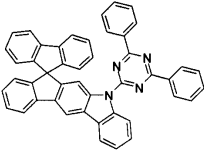
예	U1000 (V)	CE1000 (cd/A)	PE1000 (lm/W)	EQE 1000	CIE x/y at 1000 cd/m ²	L0 (cd/m ²)	L1 %	LT (h)
V1	3.5	55	50	15.2%	0.36/0.60	4000	80	440
V2	3.6	54	48	14.9%	0.37/0.60	4000	80	350
V3	3.8	57	49	15.9%	0.37/0.61	4000	80	430
V4	3.4	52	48	14.3%	0.36/0.60	4000	80	350
V5	3.3	51	49	14.3%	0.36/0.60	4000	80	380
V6	3.3	50	49	14.1%	0.36/0.60	4000	80	390
V7	3.5	58	52	16.2%	0.36/0.36	4000	80	330
V8	3.8	47	39	13.0%	0.36/0.60	4000	80	340
V9	3.6	49	43	13.6%	0.36/0.60	4000	80	290
V10	3.7	56	47	15.4%	0.37/0.60	4000	80	360
V11	3.5	48	43	13.3%	0.36/0.60	4000	80	340
E1	3.3	54	52	14.9%	0.37/0.60	4000	80	460
E2	3.2	59	57	16.3%	0.37/0.60	4000	80	490
E3	3.3	56	53	15.4%	0.36/0.60	4000	80	420
E4	3.1	55	55	15.2%	0.36/0.60	4000	80	440
E5	3.1	52	53	14.5%	0.36/0.60	4000	80	420
E6	3.2	58	56	16.0%	0.36/0.61	4000	80	460
E7	3.2	54	53	14.9%	0.37/0.60	4000	80	380
E8	3.3	55	52	15.2%	0.36/0.60	4000	80	410
E9	3.4	53	47	14.8%	0.36/0.60	4000	80	420
E10	3.5	52	46	14.3%	0.36/0.60	4000	80	390
E11	3.3	53	50	14.8%	0.36/0.60	4000	80	470
E12	3.2	55	54	15.2%	0.36/0.60	4000	80	490
E13	3.0	46	49	12.8%	0.36/0.61	4000	80	420
E14	3.2	60	58	16.5%	0.37/0.61	4000	80	580
E15	3.4	56	52	15.5%	0.36/0.61	4000	80	530
E16	3.2	53	53	14.8%	0.37/0.60	4000	80	490
E17	3.3	50	49	13.9%	0.36/0.61	4000	80	370

[0183]

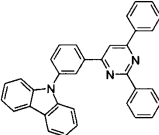
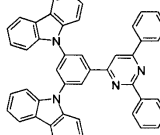
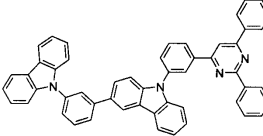
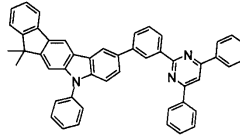
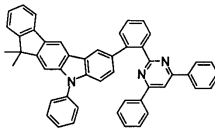
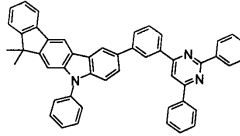
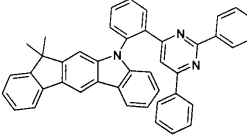
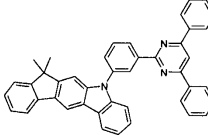
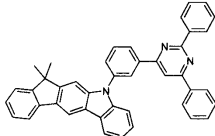
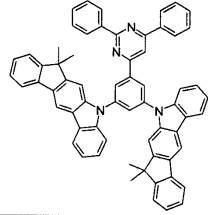
[0184] [표 3] OLED 용 재료의 구조식

	
HATCN	SpA1
	
ETM1	BPA1

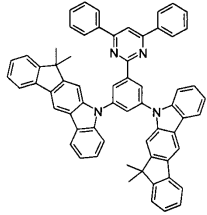
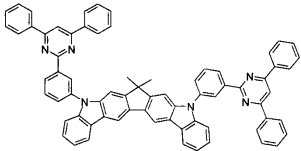
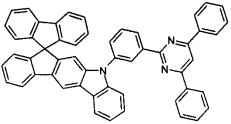
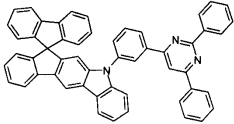
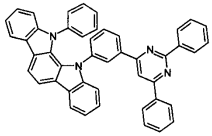
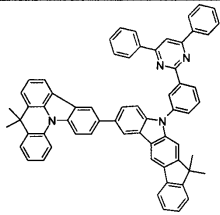
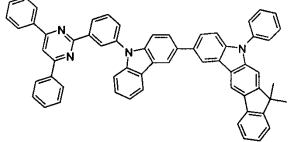
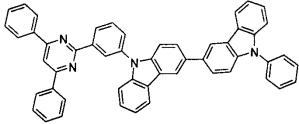
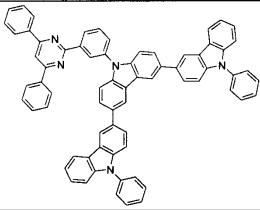
[0185]

	
ST1	ST2
	
LiQ	TEG1
	
IC1 (비교 물질)	IC2 (비교 물질)
	
IC3 (비교 물질)	IC5 (비교 물질)
	
IC6 (비교 물질)	IC7 (비교 물질)
	
IC8 (비교 물질)	IC9 (비교 물질)

[0186]

	
PyCbz1 (비교 물질)	PyCbz2 (비교 물질)
	
PyCbz3 (비교 물질)	H1(본 발명에 따름)
	
H2 (본 발명에 따름)	H3 (본 발명에 따름)
	
H4 (본 발명에 따름)	H5 (본 발명에 따름)
	
H6 (본 발명에 따름)	H7 (본 발명에 따름)

[0187]

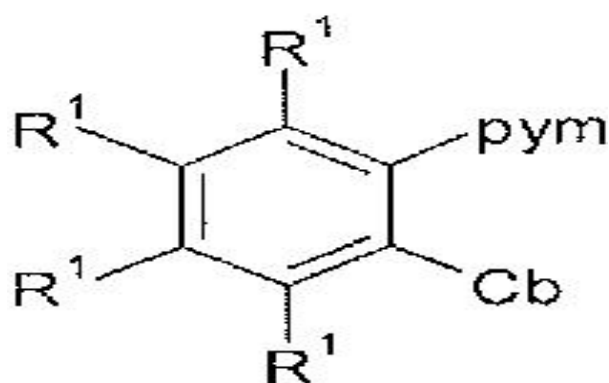
	
H8 (본 발명에 따름)	H9 (본 발명에 따름)
	
H10 (본 발명에 따름)	H11 (본 발명에 따름)
	
H12 (본 발명에 따름)	H13 (본 발명에 따름)
	
H14 (본 발명에 따름)	H15 (본 발명에 따름)
	
H16 (본 발명에 따름)	

[0188]

专利名称(译)	用于有机电致发光器件的材料		
公开(公告)号	KR1020130130757A	公开(公告)日	2013-12-02
申请号	KR1020137016283	申请日	2011-10-27
申请(专利权)人(译)	默克比肩10吨geem BEHA		
当前申请(专利权)人(译)	默克比肩10吨geem BEHA		
[标]发明人	PARHAM AMIR HOSSAIN 파르함아미르호싸인 PFLUMM CHRISTOF 플룸크리슈토프 ANEMIAN REMI MANOUK 아네미앙르미마누크 SPREITZER HUBERT 슈프라이처후베르트		
发明人	파르함아미르호싸인 플룸크리슈토프 아네미앙르미마누크 슈프라이처후베르트		
IPC分类号	C09K11/06 C07D C09K H01L C07D403/14 H01L51/50 C07D403/10		
CPC分类号	C07D495/02 C09K2211/1029 C09K2211/1092 C07D491/02 C07D403/14 C09K2211/1037 C07D487/02 C09K2211/1033 C09B57/00 C09K2211/1007 H05B33/14 C09K11/06 C07D403/10 H01L51/0072 C09K2211/1059 C09K2211/1044 H01L51/5016 Y02E10/549 H01L51/5072 H01L51/5096		
代理人(译)	韩国专利公司		
优先权	2010014930 2010-11-24 EP		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及化学式 (1) 化合物的化合物，其适用于电子元件，特别是有机电致发光器件或化学式 (2) : 图像存在 (专业参考) 。



화학식 (2)