



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 공개특허공보(A)**

(11) 공개번호 10-2016-0097298  
 (43) 공개일자 2016년08월17일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C09K 11/06* (2006.01) *C07C 211/61* (2006.01)  
*H01L 51/00* (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)

(52) CPC특허분류  
*C09K 11/06* (2013.01)  
*C07C 211/61* (2013.01)

(21) 출원번호 10-2016-7018395  
 (22) 출원일자(국제) 2014년11월18일  
 심사청구일자 없음  
 (85) 번역문제출일자 2015년07월08일  
 (86) 국제출원번호 PCT/EP2014/003072  
 (87) 국제공개번호 WO 2015/086108  
 국제공개일자 2015년06월18일

(30) 우선권주장  
 13005800.1 2013년12월12일  
 유럽특허청(EPO)(EP)

(71) 출원인  
**메르크 파텐트 게엠베하**  
 독일 64293 다름스타트 프랑크푸르터 스트라세 250

(72) 발명자  
**슈퇴셀 필립**  
 독일 60487 프랑크푸르트 암 마인 조핀슈트라세 30  
**마르티노바 이리나**  
 독일 64347 그리샤임 풍슈테터 슈트라세 7아  
 (뒷면에 계속)

(74) 대리인  
**특허법인코리아나**

전체 청구항 수 : 총 13 항

(54) 발명의 명칭 **전자 소자용 물질**

**(57) 요약**

본 발명은 전자 소자, 특히 유기 전계발광 소자에 사용하기에 적합한 화학식 (1) 의 화합물에 관한 것이다.

(52) CPC특허분류

*H01L 51/0059* (2013.01)  
*H01L 51/0061* (2013.01)  
*H01L 51/0072* (2013.01)  
*H01L 51/506* (2013.01)  
*H01L 51/5064* (2013.01)  
*C07C 2103/97* (2013.01)  
*C09K 2211/1007* (2013.01)  
*C09K 2211/1011* (2013.01)  
*C09K 2211/1029* (2013.01)

(72) 발명자

**몬테네그로 엘비라**

독일 69469 바인하임 호라츠백 5

**뮌헨카-페르나우드 테레사**

독일 64283 다름슈타트 하인리히슈트라쎄 119

**포게스 프랑크**

독일 67098 바트 뒤르크하임 바이트플라츠 2

**크뢰버 요나스 팔렌틴**

독일 60311 프랑크푸르트 암 마인 파르가쎄 4

**슈티버 프랑크**

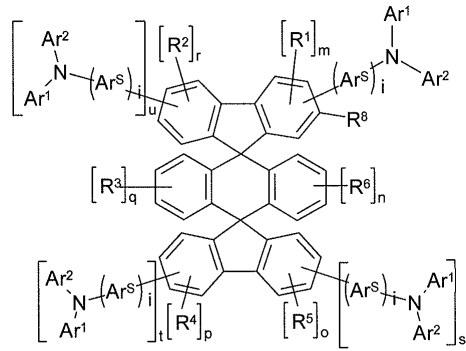
독일 64683 아인하우젠 리드로더 백 8

명세서

청구범위

청구항 1

화학식 (1) 의 화합물:



화학식 (1)

[식 중, 존재하는 기호 및 지수에는 하기가 적용됨:

Ar<sup>S</sup>는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 6 내지 60 개의 C 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 또한 하나 이상의 라디칼 R<sup>7</sup> 로 치환될 수 있음) 이고; 여기서 Ar<sup>S</sup> 는 기 E 에 의해 Ar<sup>1</sup> 및/또는 Ar<sup>2</sup> 에 연결될 수 있고;

Ar<sup>1</sup>, Ar<sup>2</sup>는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 또한 하나 이상의 라디칼 R<sup>7</sup> 로 치환될 수 있음) 이고; 여기서 Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup> 는 서로 연결될 수 있고/있거나, Ar<sup>1</sup> 은 기 E 에 의해 Ar<sup>S</sup> 에 연결될 수 있고/있거나, Ar<sup>2</sup> 는 기 E 에 의해 Ar<sup>S</sup> 에 연결될 수 있고;

E 는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, C(R<sup>7</sup>)<sub>2</sub>, O, S 및 NR<sup>7</sup> 로 이루어진 군으로부터 선택되고;

R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup>, R<sup>6</sup>은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CN, Si(R<sup>9</sup>)<sub>3</sub>, 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 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼 R<sup>9</sup> 로 치환될 수 있고, 여기서 각각의 경우 하나 이상의 비(非)인접 CH<sub>2</sub> 기는 Si(R<sup>9</sup>)<sub>2</sub>, C=NR<sup>9</sup>, P(=O)(R<sup>9</sup>), SO, SO<sub>2</sub>, NR<sup>9</sup>, O, S 또는 CONR<sup>9</sup> 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br 또는 I 로 대체될 수 있음), 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R<sup>9</sup> 로 치환될 수 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼 R<sup>9</sup> 로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬기 또는 헤테로아르알킬기 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R<sup>9</sup> 로 치환될 수 있음) 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기 R<sup>1</sup> 또는 둘 이상의 인접한 치환기 R<sup>2</sup> 또는 둘 이상의 인접한 치환기 R<sup>3</sup> 또는 둘 이상의 인접한 치환기 R<sup>4</sup> 또는 둘 이상의 인접한 치환기 R<sup>5</sup> 또는 둘 이상의 인접한 치환기 R<sup>6</sup> 은 임의로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 또는 방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼 R<sup>9</sup> 로 치환될 수 있음) 을 형성할 수 있고;

R<sup>7</sup>은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CN, Si(R<sup>9</sup>)<sub>3</sub>, N(R<sup>9</sup>)<sub>2</sub>, 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 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있고, 여기서 각각의 경우 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는  $Si(R^9)_2$ ,  $C=NR^9$ ,  $P(=O)(R^9)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^9$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $CONR^9$  로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는  $D$ ,  $F$ ,  $Cl$ ,  $Br$  또는  $I$  로 대체될 수 있음), 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬기 또는 헤테로아르알킬기 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기  $R^7$  은 임의로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 또는 방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 을 형성할 수 있고;

$R^8$  은,  $H$ ,  $D$ ,  $F$ ,  $Cl$ ,  $Br$ ,  $I$ ,  $CN$ ,  $Si(R^9)_3$ , 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 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있고, 여기서 각각의 경우 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는  $Si(R^9)_2$ ,  $C=NR^9$ ,  $P(=O)(R^9)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^9$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $CONR^9$  로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는  $D$ ,  $F$ ,  $Cl$ ,  $Br$  또는  $I$  로 대체될 수 있음), 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬기 또는 헤테로아르알킬기 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 치환기  $R^8$  및 인접한 치환기  $R^1$  은 임의로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 또는 방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 을 형성할 수 있고;

$R^9$  는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게,  $H$ ,  $D$ ,  $F$ ,  $Cl$ ,  $Br$ ,  $I$ ,  $Si(R^{10})_3$ , 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 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼  $R^{10}$  으로 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는  $Si(R^{10})_2$ ,  $C=NR^{10}$ ,  $P(=O)(R^{10})$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^{10}$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $CONR^{10}$  로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는  $D$ ,  $F$ ,  $Cl$ ,  $Br$  또는  $I$  로 대체될 수 있음), 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^{10}$  으로 치환될 수 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^{10}$  으로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬기 또는 헤테로아르알킬기 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^{10}$  으로 치환될 수 있음) 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기  $R^9$  는 임의로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^{10}$  으로 치환될 수 있음) 을 형성할 수 있고;

$R^{10}$  은,  $H$ ,  $D$ ,  $F$ , 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 지방족 탄화수소 라디칼, 6 내지 30 개의 C 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (여기서 하나 이상의 H 원자는  $D$  또는  $F$  로 대체될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기  $R^{10}$  은 서로 함께 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 고리 시스템을 형성할 수 있고;

$i$  는, 각각의 경우, 0, 1 또는 2 이고;

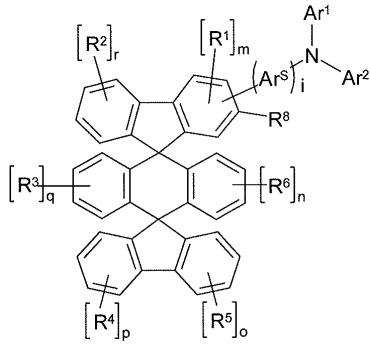
$m$  은 0, 1 또는 2 이고;

$n$ ,  $o$ ,  $p$ ,  $q$ ,  $r$  은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 0, 1, 2, 3 또는 4 이고;

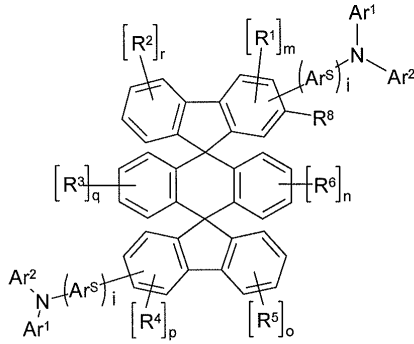
s, t, u 는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 0, 1 또는 2 이고;  
 여기서,  $s+t \leq 4$ ,  $p+t \leq 4$  및  $r+u \leq 4$  이고;  
 나아가,  $u+t+s \leq 2$  임].

**청구항 2**

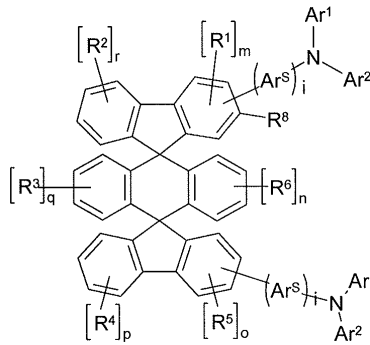
제 1 항에 있어서, 화학식 (2), (3), (4) 또는 (5) 의 화합물인 화합물:



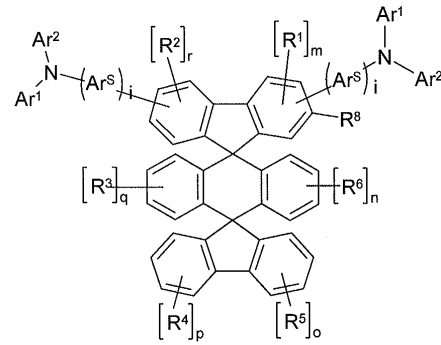
화학식 (2)



화학식 (3)



화학식 (4)

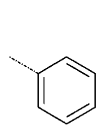


화학식 (5)

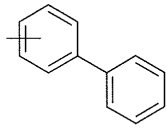
[식 중, 기호 및 지수는 제 1 항에 제시된 의미를 가짐].

**청구항 3**

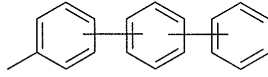
제 1 항 또는 제 2 항에 있어서, 기  $Ar^1$  및  $Ar^2$  가, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-33) 의 기로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:



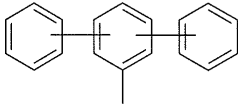
화학식 (Ar-1)



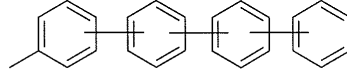
화학식 (Ar-2)



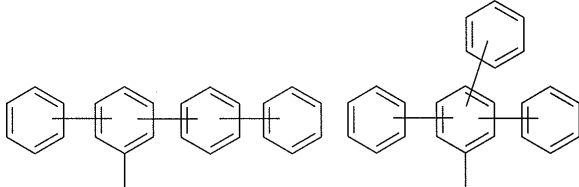
화학식 (Ar-3)



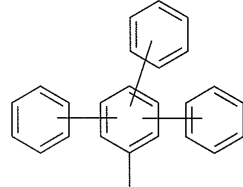
화학식 (Ar-4)



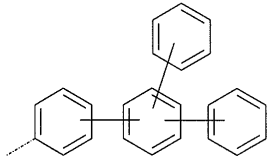
화학식 (Ar-5)



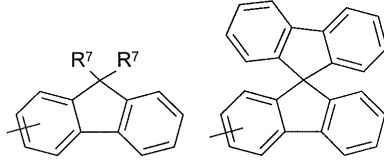
화학식 (Ar-6)



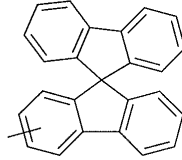
화학식 (Ar-7)



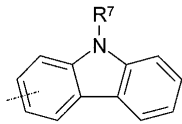
화학식 (Ar-8)



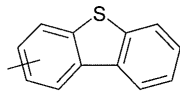
화학식 (Ar-9)



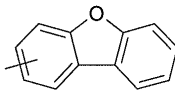
화학식 (Ar-10)



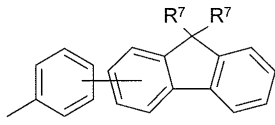
화학식 (Ar-11)



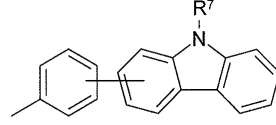
화학식 (Ar-12)



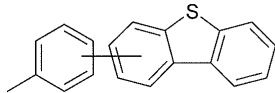
화학식 (Ar-13)



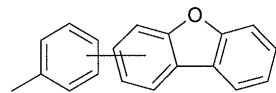
화학식 (Ar-14)



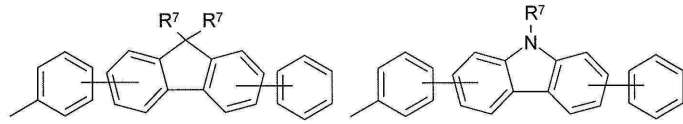
화학식 (Ar-15)



화학식 (Ar-16)

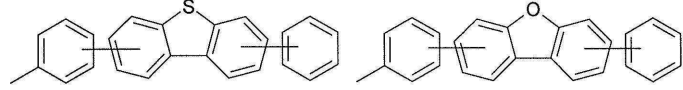


화학식 (Ar-17)



화학식 (Ar-18)

화학식 (Ar-19)



화학식 (Ar-20)

화학식 (Ar-21)



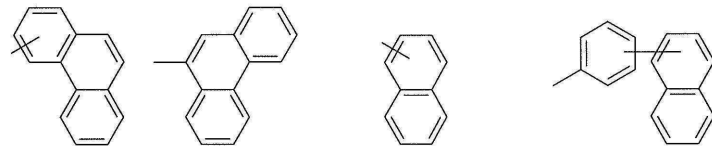
화학식 (Ar-22)

화학식 (Ar-23)



화학식 (Ar-24)

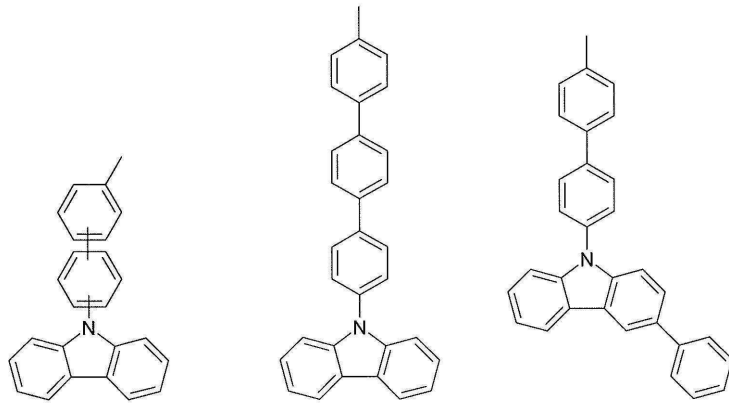
화학식 (Ar-25)



화학식 (Ar-26) 화학식 (Ar-27)

화학식 (Ar-28)

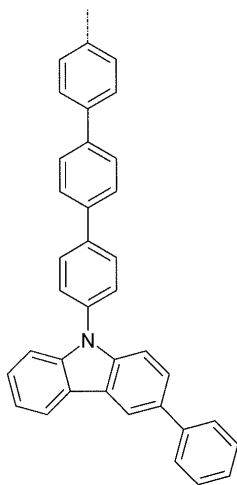
화학식 (Ar-29)



화학식 (Ar-30)

화학식 (Ar-31)

화학식 (Ar-32)



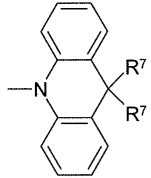
화학식 (Ar-33)

[식 중, 사용된 기호는 제 1 항에 제시된 의미를 갖고, 대시 기호의 결합 (dashed bond) 은 질소에의 상기 기의

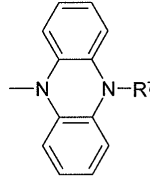
결합 위치를 나타내고, 상기 기들은 자유 위치에서 R<sup>7</sup> 로 치환될 수 있음].

청구항 4

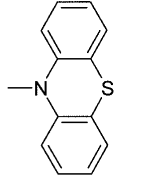
제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 있어서, 기 -NAr<sup>1</sup>Ar<sup>2</sup> 가 하기 화학식 (Ar1-1) 내지 (Ar1-19) 중 하나의 구조를 갖거나,



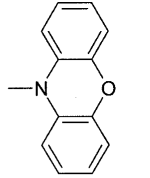
화학식 (Ar1-1)



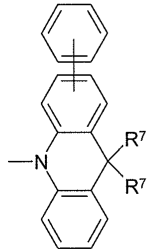
화학식 (Ar1-2)



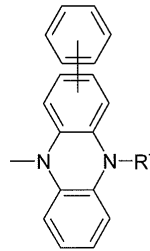
화학식 (Ar1-3)



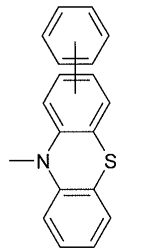
화학식 (Ar1-4)



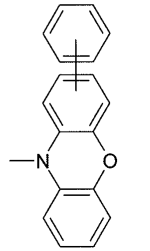
화학식 (Ar1-5)



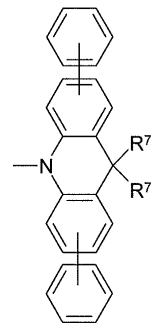
화학식 (Ar1-6)



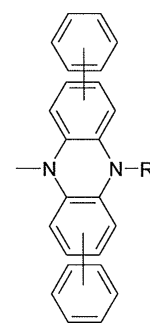
화학식 (Ar1-7)



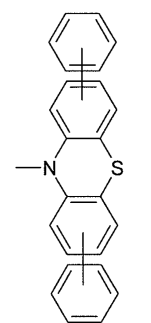
화학식 (Ar1-8)



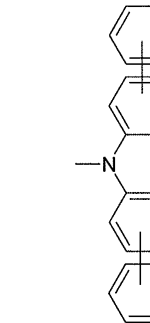
화학식 (Ar1-9)



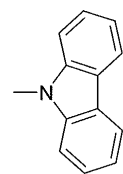
화학식 (Ar1-10)



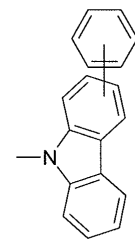
화학식 (Ar1-11)



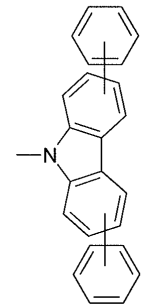
화학식 (Ar1-12)



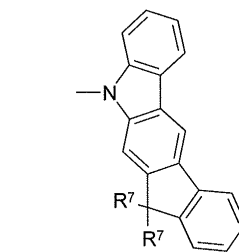
화학식 (Ar1-13)



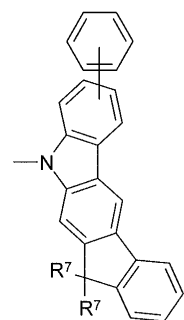
화학식 (Ar1-14)



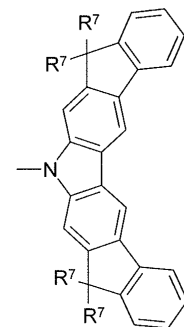
화학식 (Ar1-15)



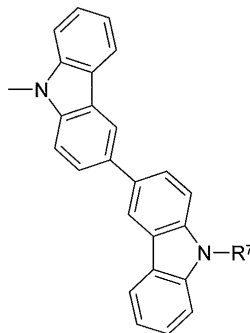
화학식 (Ar1-16)



화학식 (Ar1-17)



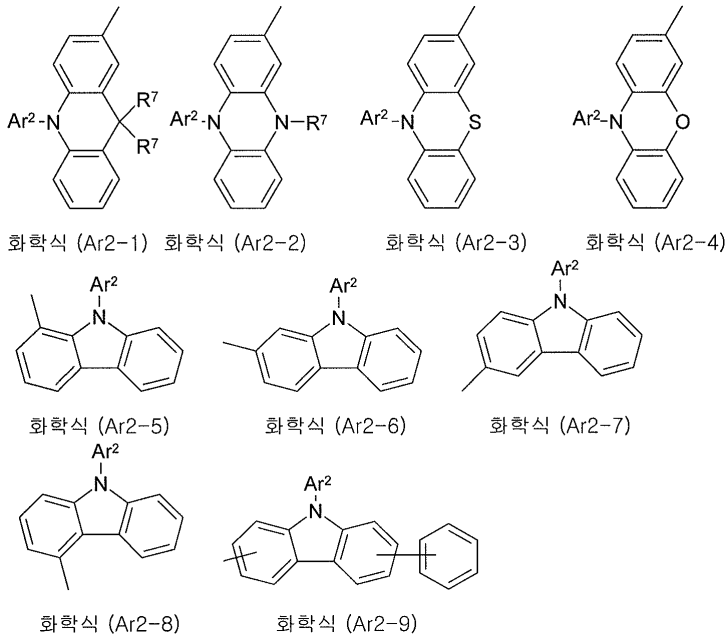
화학식 (Ar1-18)



화학식 (Ar1-19)

[식 중, 사용된 기호는 제 1 항에 제시된 의미를 갖고, 대시 기호의 결합은 기본 구조 또는  $Ar^S$  에의 결합 위치를 나타내고, 상기 기호는 자유 위치에서  $R^7$  로 치환될 수 있음], 또는

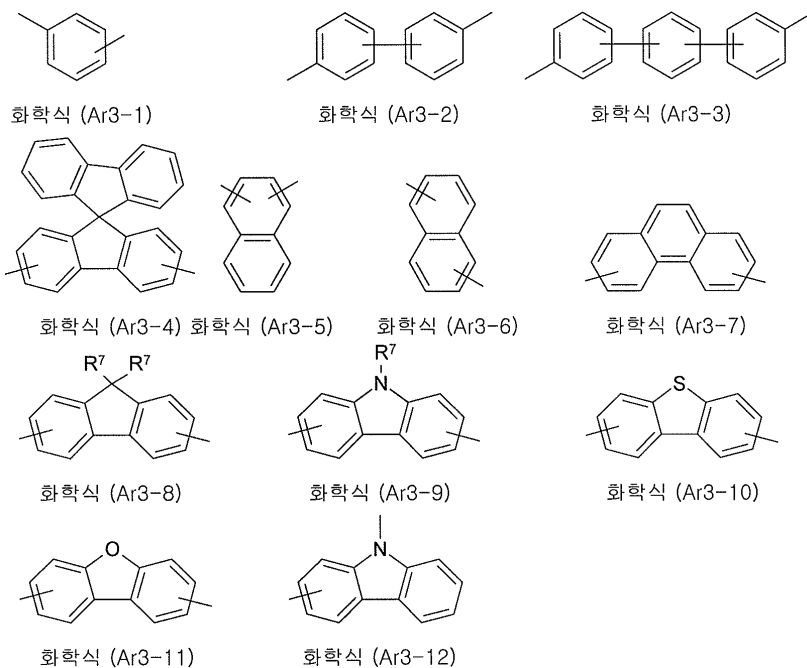
기  $-Ar^S-NAr^1Ar^2$  가 하기 화학식 (Ar2-1) 내지 (Ar2-9) 중 하나의 구조를 갖는 것을 특징으로 하는 화합물:



[식 중, 사용된 기호는 제 1 항에 제시된 의미를 갖고, 대시 기호의 결합은 기본 구조 또는 옆  $Ar^S$  단위와의 결합을 나타내고, 상기 기호는 자유 위치에서  $R^7$  로 치환될 수 있음].

**청구항 5**

제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 있어서, 기  $Ar^S$  가 하기 화학식 (Ar3-1) 내지 (Ar3-12) 중 하나의 기를 나타내는 것을 특징으로 하는 화합물:



[식 중, 사용된 기호는 제 1 항에 제시된 의미를 갖고, 2 개의 대시 기호의 결합은 인접한 기들에의 결합을 나

타내고, 상기 기들은 자유 위치에서  $R^7$  로 치환될 수 있음].

**청구항 6**

제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 있어서,  $R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8$  이, 동일하거나 상이하고, 각각의 경우, H, D, F,  $Si(R^9)_3$ , CN, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기 또는 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시기 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는 O 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 로 대체될 수 있음), 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기  $R^1$  내지  $R^7$  은 임의로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 을 형성할 수 있는 것을 특징으로 하는 화합물.

**청구항 7**

제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 있어서, 하기와 같은 화합물:

$Ar^S$  는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 여기서,  $i=1$  또는 2 인 경우,  $Ar^S$  는 화학식 (Ar3-1) 내지 (Ar3-12) 의 기로부터 선택되고,  $Ar^S$  는 기 E 에 의해  $Ar^1$  에 연결될 수 있고;

$Ar^1, Ar^2$  는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-33) 의 기로부터 선택되는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이거나;

또는  $-NAr^1Ar^2$  는 화학식 (Ar1-1) 내지 (Ar1-19) 중 하나의 기를 나타내거나;

또는  $Ar^S-NAr^1Ar^2$  는 화학식 (Ar2-1) 내지 (Ar2-9) 중 하나의 기를 나타내고;

E 는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게,  $C(R^7)_2, O, S$  및  $NR^7$  로 이루어진 군으로부터 선택되고;

$R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^8$  은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F,  $Si(R^9)_3$ , CN, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기 또는 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시기 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는 O 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 로 대체될 수 있음), 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기  $R^1$  내지  $R^6$ , 또는  $R^1$  및  $R^8$  은, 임의로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 을 형성할 수 있고;

$R^7$  은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F,  $Si(R^9)_3$ , CN, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기 또는 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시기 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는 O 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 로 대체될 수 있음), 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기  $R^7$  은 임의로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 을 형성할 수 있거나;

또는 화학식 (Ar1-1), (Ar1-5), (Ar1-9), (Ar1-16), (Ar1-17), (Ar1-5a), (Ar1-5b), (Ar1-9a), (Ar1-9b),

(Ar1-17a), (Ar1-17b), (Ar2-1), (Ar3-8), (Ar3-8a) 및 (Ar3-8b) 에서 탄소 브릿지에 결합된  $R^7$  은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 또는 6 내지 30 개의 C 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (이들은 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택되고; 여기서 2 개의 기  $R^7$  은 또한 서로 함께 지방족 또는 방향족일 수 있는 고리 시스템을 형성할 수 있거나;

또는 화학식 (Ar1-2), (Ar1-6), (Ar1-10), (Ar1-19), (Ar1-6a), (Ar1-6b), (Ar1-10a), (Ar1-10b), (Ar2-2), (Ar3-9) 및 (Ar3-9a) 에서 질소 브릿지에 결합된  $R^7$  은, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 또는 6 내지 30 개의 C 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (이들은 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택되고;

$R^9$  는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 또는 6 내지 30 개의 C 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼  $R^{10}$  으로 치환될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기  $R^9$  는 서로 함께 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 고리 시스템을 형성할 수 있고;

$R^{10}$  은, H, D, F, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 지방족 탄화수소 라디칼, 6 내지 30 개의 C 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (여기서 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 로 대체될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기  $R^{10}$  은 서로 함께 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 고리 시스템을 형성할 수 있고;

i 는, 각각의 경우, 0, 1 또는 2 이고;

m 은, 0 또는 1 이고;

o, p, r 은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 0, 1 또는 2 이고;

n, q 는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 0, 1 또는 2 이고;

s, t, u 는 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 0 또는 1 이고;

여기서  $u+t+s \leq 2$  임.

### 청구항 8

제 1 항 내지 제 7 항 중 어느 한 항에 따른 화합물의 제조 방법으로서, 1-, 3- 또는 4-위치에서 반응성 이탈기로 치환된 디스피로[플루오렌-9,9'-안트라센-10',9"-플루오렌] 유도체를,

- a) 1차 아민에 커플링시키고, 이어서 반응성 이탈기로 치환된 추가의 방향족기에 커플링시키거나, 또는
- b) 2차 아민에 커플링시키거나, 또는
- c) 트리아릴아민 유도체에 커플링시키는 방법.

### 청구항 9

제 1 항 내지 제 7 항 중 어느 한 항에 따른 하나 이상의 화합물 및 하나 이상의 용매를 포함하는 제형.

### 청구항 10

전자 소자, 특히 전자 전계발광 소자에서의, 제 1 항 내지 제 7 항 중 어느 한 항에 따른 화합물 또는 제 9 항에 따른 제형의 용도.

### 청구항 11

제 1 항 내지 제 7 항 중 어느 한 항에 따른 하나 이상의 화합물 또는 제 9 항에 따른 하나 이상의 제형을 포함하는 전자 소자.

**청구항 12**

제 11 항에 있어서, 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 광검출기, 유기 광수용체, 유기 전계-켄치 소자 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-laser) 및 유기 전계발광 소자 (OLED) 로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 전자 소자.

**청구항 13**

제 12 항에 있어서, 제 1 항 내지 제 7 항 중 어느 한 항에 따른 화합물 또는 제 9 항에 따른 하나 이상의 제형이, 정공-수송 또는 정공-주입층에서 정공-수송 물질로서, 또는 전자-차단층으로서, 또는 여기자-차단층으로서, 또는 형광 발광층용 발광체로서, 또는 발광층에서 매트릭스 물질로서 이용되는 것을 특징으로 하는, 유기 전계 발광 소자 (OLED) 로부터 선택되는 전자 소자.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 발명은 전자 소자, 특히 유기 전계발광 소자에 사용되는 물질, 및 이러한 물질을 포함하는 전자 소자에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0002] 전자 소자에 사용되는 기능성 화합물의 개발은 현재 주요 연구 대상이다. 여기서 목적은, 특히, 예를 들어 전력 효율, 수명 또는 발광된 광의 색좌표와 같은 하나 이상의 관련 측면에서 전자 소자의 개선된 특성이 달성될 수 있는 화합물을 개발하는 것이다.

[0003] 본 발명에 있어서, 용어 전자 소자는, 특히, 유기 집적 회로 (OIC), 유기 전계-효과 트랜지스터 (OFET), 유기 박막 트랜지스터 (OTFT), 유기 발광 트랜지스터 (OLET), 유기 태양 전지 (OSC), 유기 광검출기, 유기 광수용체, 유기 전계 켄치 소자 (OFQD), 유기 발광 전기화학 전지 (OLEC), 유기 레이저 다이오드 (O-laser) 및 유기 전계 발광 소자 (OLED) 를 의미하는 것으로 의도된다.

[0004] OLED 로서 지칭되는 마지막에 언급된 전자 소자에 사용되는 화합물을 제공하는 것에 특히 관심이 있다. 유기 반도체가 기능성 물질로서 이용되는 OLED 의 일반 구조 및 이의 기능 원리는 당업자에 공지되어 있고, 특히, US 4539507, US 5151629, EP 0676461 및 WO 1998/27136 에 기재되어 있다. 여기에 이용되는 발광 물질로는 형광 대신 인광을 나타내는 유기금속 착물이 점점 더 증가하고 있다 ([M. A. Baldo et al., Appl. Phys. Lett. 1999, 75, 4-6]).

[0005] 선행 기술에 따라, 정공-수송층 또는 정공-주입층에 사용되는 정공-수송 물질은, 특히, 둘 이상의 트리아릴아미노기 또는 하나 이상의 트리아릴아미노기 및 하나 이상의 카르바졸기를 함유하는 트리아릴아민 유도체이다. 이러한 화합물은 흔히 디아릴아미노-치환 트리페닐아민 (TPA 형), 디아릴아미노-치환 바이페닐 유도체 (TAD 형) 또는 이러한 기본 화합물들의 조합물에서 유래된다. 나아가, 예를 들어, 2 또는 4 개의 디아릴아미노기로 치환된 스피로바이플루오렌 유도체가 사용된다 (예를 들어 EP 676461 또는 US 7,714,145 에 따름). 이러한 화합물의 경우, 형광 및 인광 OLED 두 경우 모두에서, 특히 유기 전계발광 소자에서의 사용에 대한 효율, 수명 및 작동 전압의 측면에서 및 승화에 대한 열 안정성의 측면에서 지속적으로 개선이 요구되고 있다.

[0006] 본 발명의 목적은 형광 또는 인광 OLED, 특히 인광 OLED 에서, 예를 들어 정공-수송 또는 여기자-차단층에서 정공-수송 물질로서 또는 발광층에서 매트릭스 물질로서 사용하기에 적합한 화합물을 제공하는 것이다.

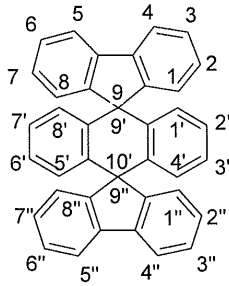
[0007] 놀랍게도, 하기에 보다 상세하게 기재되는 특정 화합물이 이러한 목적을 달성하고, 유기 전계 소자에서, 특히 수명, 효율 및 작동 전압의 측면에서 유의한 개선을 유도한다는 것을 발견하였다. 이는, 인광 및 형광 전계 발광 소자에서, 특히 본 발명에 따른 화합물을 정공-수송 물질 또는 매트릭스 물질로서 사용하는 경우 그러하다. 상기 물질은 일반적으로 높은 열 안정성을 갖기 때문에, 분해되지 않으면서 잔류물 없이 승화될 수 있다. 따라서, 본 발명은 이러한 물질 및 이러한 유형의 특정 화합물을 함유하는 전자 소자에 관한 것이다.

[0008] 특히 명세서 WO 02/088274 A1 은, 특히, 안트라센 단위 상에서 치환된 디스피로[플루오렌-9,9'-안트라센-

10',9"-플루오렌] 유도체의 합성을 나타낸다.

[0009] 명확성을 위하여, 디스피로[플루오렌-9,9'-안트라센-10',9"-플루오렌] 골격의 번호매기기는 하기와 같이 도시된다:

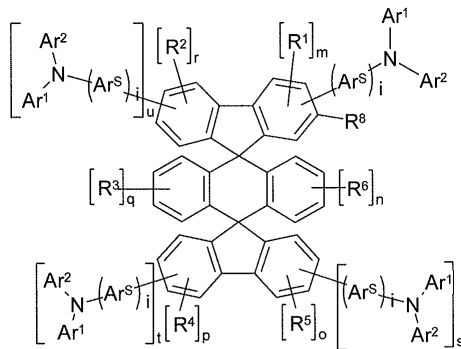
[0010]



**발명의 내용**

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0011] 따라서, 본 발명은 화학식 (1)의 화합물에 관한 것이다:



화학식 (1)

[0012]

[식 중, 존재하는 기호 및 지수에는 하기가 적용됨:

[0013]

[0014]  $Ar^S$ 는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 6 내지 60 개의 C 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 또한 하나 이상의 라디칼  $R^7$  로 치환될 수 있음) 이고; 여기서  $Ar^S$  는 기 E 에 의해  $Ar^1$  및/또는  $Ar^2$  에 연결될 수 있고;

[0015]

$Ar^1, Ar^2$ 는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 또한 하나 이상의 라디칼  $R^7$  로 치환될 수 있음) 이고; 여기서  $Ar^1$  및  $Ar^2$  는 서로 연결될 수 있고/있거나,  $Ar^1$  은 기 E 에 의해  $Ar^S$  에 연결될 수 있고/있거나,  $Ar^2$  는 기 E 에 의해  $Ar^S$  에 연결될 수 있고;

[0016]

E 는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게,  $C(R^7)_2, O, S$  및  $NR^7$  로 이루어진 군으로부터 선택되고;

[0017]

$R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6$ 은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CN,  $Si(R^9)_3$ , 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 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있고, 여기서 각각의 경우 하나 이상의 비(非)인접  $CH_2$  기는  $Si(R^9)_2, C=NR^9, P(=O)(R^9), SO, SO_2, NR^9, O, S$  또는  $CONR^9$  로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br 또는 I 로 대체될 수 있음), 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음), 5 내지 60

개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬기 또는 헤테로아르알킬기 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기  $R^1$  또는 둘 이상의 인접한 치환기  $R^2$  또는 둘 이상의 인접한 치환기  $R^3$  또는 둘 이상의 인접한 치환기  $R^4$  또는 둘 이상의 인접한 치환기  $R^5$  또는 둘 이상의 인접한 치환기  $R^6$  은 임의로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 또는 방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 을 형성할 수 있고;

[0018]  $R^7$ 은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CN,  $Si(R^9)_3$ ,  $N(R^9)_2$ , 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 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있고, 여기서 각각의 경우 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는  $Si(R^9)_2$ ,  $C=NR^9$ ,  $P(=O)(R^9)$ , SO,  $SO_2$ ,  $NR^9$ , O, S 또는  $CONR^9$  로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br 또는 I 로 대체될 수 있음), 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬기 또는 헤테로아르알킬기 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기  $R^7$  은 임의로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 또는 방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 을 형성할 수 있고;

[0019]  $R^8$ 은, H, D, F, Cl, Br, I, CN,  $Si(R^9)_3$ , 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 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있고, 여기서 각각의 경우 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는  $Si(R^9)_2$ ,  $C=NR^9$ ,  $P(=O)(R^9)$ , SO,  $SO_2$ ,  $NR^9$ , O, S 또는  $CONR^9$  로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br 또는 I 로 대체될 수 있음), 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬기 또는 헤테로아르알킬기 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 치환기  $R^8$  및 인접한 치환기  $R^1$  은 임의로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 또는 방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 을 형성할 수 있고;

[0020]  $R^9$ 는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I,  $Si(R^{10})_3$ , 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 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼  $R^{10}$  으로 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는  $Si(R^{10})_2$ ,  $C=NR^{10}$ ,  $P(=O)(R^{10})$ , SO,  $SO_2$ ,  $NR^{10}$ , O, S 또는  $CONR^{10}$  으로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br 또는 I 로 대체될 수 있음), 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^{10}$  으로 치환될 수 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^{10}$  으로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬기 또는 헤테로아르알킬기 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^{10}$  으로 치환될 수 있음) 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기  $R^9$  는 임의로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^{10}$  으로 치환될 수 있음) 을 형성할

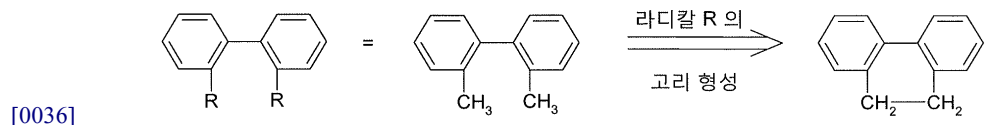
수 있고;

- [0021]  $R^{10}$ 은, H, D, F, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 지방족 탄화수소 라디칼, 6 내지 30 개의 C 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (여기서 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 로 대체될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기  $R^{10}$  은 서로 함께 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 고리 시스템을 형성할 수 있고;
- [0022] i 는, 각각의 경우, 0, 1 또는 2 이고;
- [0023] m 은 0, 1 또는 2 이고;
- [0024] n, o, p, q, r 은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 0, 1, 2, 3 또는 4 이고;
- [0025] s, t, u 는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 0, 1 또는 2 이고;
- [0026] 여기서,  $s+o \leq 4$ ,  $p+t \leq 4$  및  $r+u \leq 4$  이고;
- [0027] 나아가,  $u+t+s \leq 2$  임].
- [0028] 본 발명의 의미에서 아릴기는 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 함유하고; 본 발명의 의미에서 헤테로아릴기는 이론적으로 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자 (이 중 하나 이상은 헤테로원자임) 를 함유한다. 헤테로원자는 바람직하게는 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 이는 기본 정의이다. 예를 들어, 방향족 고리 원자의 수 또는 헤테로원자의 존재에 관하여, 다른 바람직한 것들이 본 발명의 설명에 언급되는 경우에는, 이것이 적용된다.
- [0029] 여기서 아릴기는, 단순 방향족 고리, 즉 벤젠, 또는 축합된 (애널레이트된 (annellated)) 방향족 또는 헤테로방향족 폴리사이클, 예를 들어 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 퀴놀린, 이소퀴놀린 또는 카르바졸을 의미하는 것으로 의도된다. 본 출원의 의미에서 축합된 (애널레이트된) 방향족 폴리사이클은, 서로 축합된 둘 이상의 단순 방향족 고리로 이루어진다. 대조적으로, 단일 결합에 의해 서로 연결된 방향족 고리, 예를 들어 바이페닐 또는 플루오렌은, 아릴 또는 헤테로아릴기로서가 아니라, 방향족 고리 시스템으로서 지칭된다.
- [0030] 본 발명의 의미에서 헤테로아릴기는, 방향족 고리 또는 폴리사이클 내에 하나 이상의 헤테로원자, 바람직하게는 N, O 또는 S 로부터 선택되는 헤테로원자를 함유한다. 헤테로아릴기는, 예를 들어, 단순 헤테로방향족 고리, 예를 들어 피리딘, 피리미딘, 티오펜 등, 또는 축합된 (애널레이트된) 헤테로방향족 폴리사이클, 예를 들어 카르바졸 또는 퀴놀린이다.
- [0031] 본 발명의 정의에 따른 아릴옥시기는 산소 원자를 통해 결합된, 상기 정의된 바와 같은, 아릴기를 의미하는 것으로 의도된다. 유사한 정의가 헤테로아릴옥시기에도 적용된다.
- [0032] 본 발명의 의미에서 방향족 고리 시스템은 고리 시스템 내에 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 함유한다. 본 발명의 의미에서 헤테로방향족 고리 시스템은 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 함유하고, 상기 고리 원자 중 하나 이상은 헤테로원자이다. 헤테로원자는 바람직하게는 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 본 발명의 의미에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 반드시 아릴 또는 헤테로아릴기만을 함유하는 것이 아니라, 또한, 다수의 아릴 또는 헤테로아릴기가 비(非)방향족 단위 (바람직하게는 10% 미만의 H 이외의 원자), 예를 들어,  $sp^3$ -혼성화된 C, Si 또는 O 원자,  $sp^2$ -혼성화된 C 원자 또는  $sp$ -혼성화된 C 원자에 의해 연결될 수 있는 시스템을 의미하는 것으로 의도된다. 따라서, 예를 들어, 9,9'-스피로바이폴루오렌, 9,9'-디아릴폴루오렌, 디아릴 에테르, 스틸벤 등과 같은 시스템은 또한 본 발명의 의미에서 방향족 고리 시스템으로 간주되는 것으로 의도되며, 둘 이상의 아릴기가, 예를 들어 선형 또는 시클릭 알킬, 알케닐 또는 알키닐기 또는 실릴기에 의해 연결되는 시스템도 마찬가지이다. 나아가, 둘 이상의 아릴 또는 헤테로아릴기가 단일 결합을 통해 서로 연결되는 시스템은 또한 본 발명의 의미에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 간주되며, 예를 들어 바이페닐, 테르페닐 또는 쿼테르페닐과 같은 시스템이다. 여기서 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은, 정의에 따라, 아미노기를 함유하지 않는다. 따라서, 트리아릴아미노기는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템의 정의에 포함되지 않는다.
- [0033] 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 또한 상기 정의된 바와 같은 라디칼로 치환될 수 있고, 임의의 목적하는 위치를 통해 방향족 또는 헤테로방향족기에 연결될 수 있음) 은, 특히, 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센, 페난트렌, 벤조페난트렌, 피렌, 크리센, 페릴

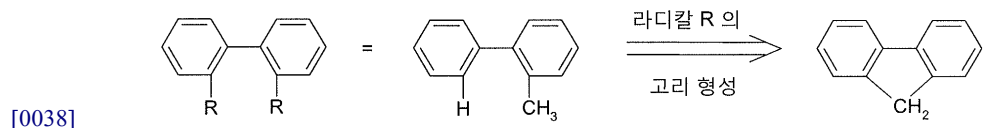
렌, 플루오란텐, 나프타센, 펜타센, 벤조피렌, 바이페닐, 바이페닐렌, 테르페닐, 테르페닐렌, 쿼테르페닐, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 디히드로페난트렌, 디히드로피렌, 테트라히드로피렌, 시스- 또는 트랜스-인데노플루오렌, 트루센, 이소트루센, 스피로트루센, 스피로이소트루센, 푸란, 벤조푸란, 이소벤조푸란, 디벤조푸란, 티오펜, 벤조티오펜, 이소벤조티오펜, 디벤조티오펜, 피롤, 인돌, 이소인돌, 카르바졸, 인돌로카르바졸, 인데노카르바졸, 피리딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 아크리딘, 페난트리딘, 벤조-5,6-퀴놀린, 벤조-6,7-퀴놀린, 벤조-7,8-퀴놀린, 페노티아진, 페녹사진, 피라졸, 인다졸, 이미다졸, 벤즈이미다졸, 나프티미다졸, 페난트리미다졸, 피리디미다졸, 피라진이미다졸, 퀴놀살린이미다졸, 옥사졸, 벤즈옥사졸, 나프톡사졸, 안트톡사졸, 페난트록사졸, 이속사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴놀살린, 1,5-디아자안트라센, 2,7-디아자피렌, 2,3-디아자피렌, 1,6-디아자피렌, 1,8-디아자피렌, 4,5-디아자피렌, 4,5,9,10-테트라아자페릴렌, 피라진, 페나진, 페녹사진, 페노티아진, 플루오루빈, 나프티리딘, 아자카르바졸, 벤조카르바졸, 페난트롤린, 1,2,3-트리아졸, 1,2,4-트리아졸, 벤조트리아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아졸, 1,2,5-옥사디아졸, 1,3,4-옥사디아졸, 1,2,3-티아디아졸, 1,2,4-티아디아졸, 1,2,5-티아디아졸, 1,3,4-티아디아졸, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 1,2,3-트리아진, 테트라졸, 1,2,4,5-테트라진, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,3,5-테트라진, 퓨린, 프테리딘, 인돌리진 및 벤조티아디아졸, 또는 상기 기들의 조합에서 유래된 기를 의미하는 것으로 의도된다.

[0034] 본 발명의 목적을 위하여, 1 내지 40 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 40 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 또는 2 내지 40 개의 C 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (여기서, 또한 각각의 H 원자 또는 CH<sub>2</sub> 기는 상기 라디칼의 정의 하에서 상기 언급된 기로 치환될 수 있음) 는, 바람직하게는 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, s-부틸, t-부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, s-펜틸, 시클로펜틸, 네오펜틸, n-헥실, 시클로헥실, 네오헥실, 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 또는 옥티닐 라디칼을 의미하는 것으로 의도된다. 1 내지 40 개의 C 원자를 갖는 알콕시 또는 티오알킬기는 바람직하게는 메톡시, 트리플루오로메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, s-부톡시, t-부톡시, n-펜톡시, s-펜톡시, 2-메틸부톡시, n-헥속시, 시클로헥실옥시, n-헵톡시, 시클로헵틸옥시, n-옥틸옥시, 시클로옥틸옥시, 2-에틸헥실옥시, 펜타플루오로에톡시, 2,2,2-트리플루오로에톡시, 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 의도된다.

[0035] 본 설명의 목적을 위하여, 둘 이상의 라디칼이 서로 함께 고리를 형성할 수 있다는 표현은, 특히, 2 개의 라디칼이 화학 결합에 의해 서로 연결된다는 것을 의미하는 것으로 의도된다. 이는 하기 반응식으로 예시된다:



[0037] 하지만, 나아가, 상기 언급된 표현은 또한, 2 개의 라디칼 중 하나가 수소를 나타내는 경우, 두 번째 라디칼이 수소 원자가 결합된 위치에 결합되어 고리를 형성한다는 것을 의미하는 것으로 의도된다. 이는 하기 반응식으로 예시된다:



[0039] 본 발명의 바람직한 구현예에서, s+t+u 는 0 또는 1 이다. 따라서, 상기 화합물은 1 또는 2 개의 디아릴아미노기를 함유한다.

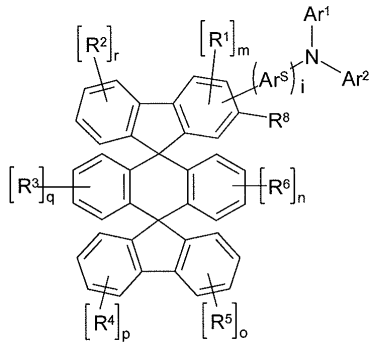
[0040] 본 발명의 보다 바람직한 구현예에서, m, n, o, p, q, r 은, 동일하거나 상이하게, 0 또는 1 이고, 바람직하게

는 m, o, p, r 은 0 이고, 매우 특히 바람직하게는 m, o, p, r 은 0 이고, n, q 는 0 또는 1 이다.

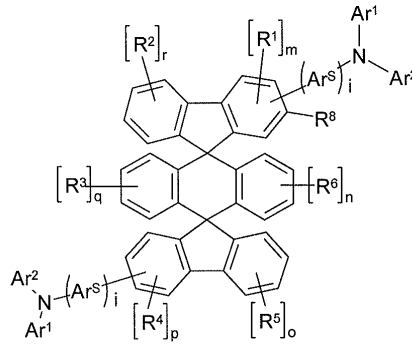
[0041] 본 발명의 보다 바람직한 구현예에서, 화학식 (1) 에서 모든 지수 i 는 각각의 경우 동일하고, 즉 모든 지수 i 는, 예를 들어, 0 의 값을 갖는다. i 가 0 인 경우, 질소 원자는 기본 구조에 직접 결합된다.

[0042] 본 발명의 보다 바람직한 구현예에서, 하나 이상의 기  $-(Ar^S)_iNAr^1Ar^2$  는 총 18 개 이상의 방향족 고리 원자, 특히 바람직하게는 18 개 이상 및 50 개 미만의 방향족 고리 원자를 함유한다.

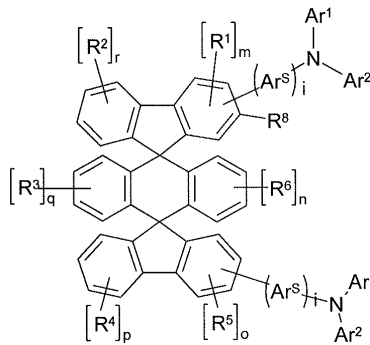
[0043] 바람직한 구현예에서, 화학식 (1) 의 화합물은 하기 화학식 (2) 내지 (5) 중 하나의 화합물이다:



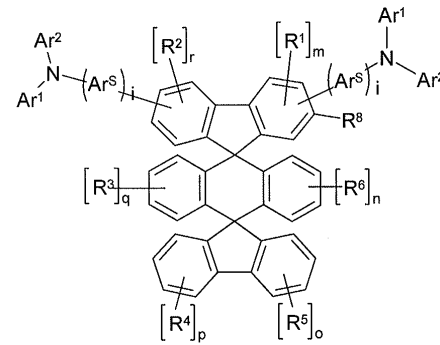
화학식 (2)



화학식 (3)



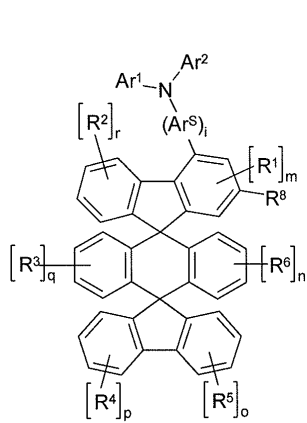
화학식 (4)



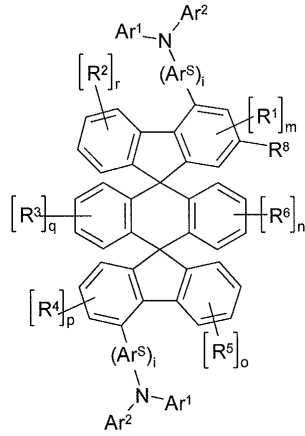
화학식 (5)

[0044]  
[0045] [식 중, 기호 및 지수는 화학식 (1) 에 대한 것과 동일한 의미를 가짐].

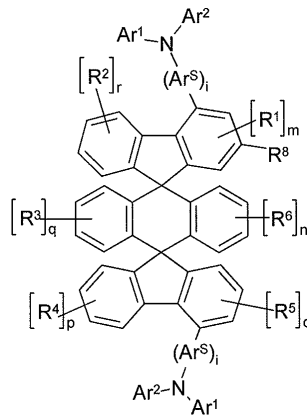
[0046] 특히 바람직한 구현예에서, 화학식 (1) 의 화합물은 하기 화학식 (6) 내지 (28) 중 하나의 화합물이다:



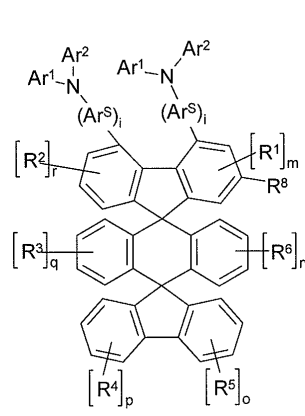
화학식 (6)



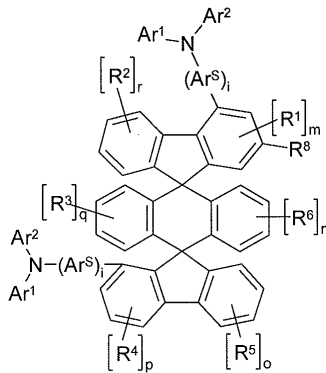
화학식 (7)



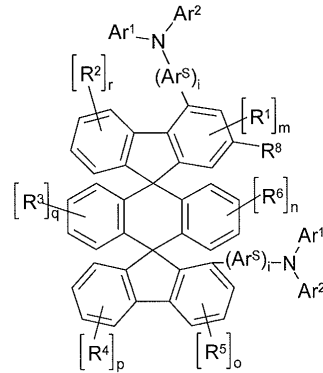
화학식 (8)



화학식 (9)

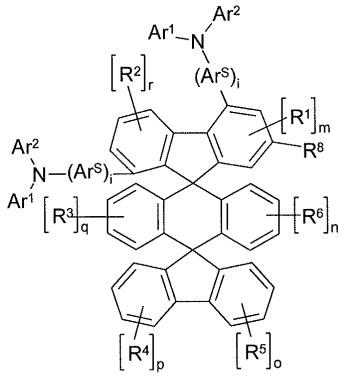


화학식 (10)

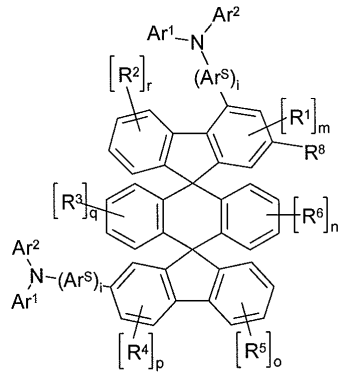


화학식 (11)

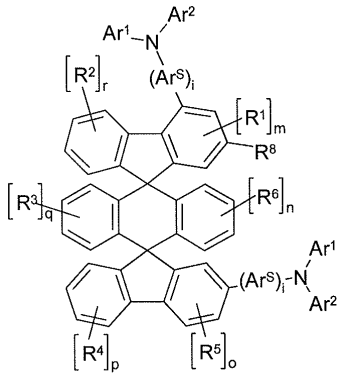
[0047]



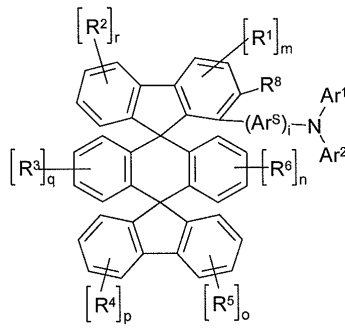
화학식 (12)



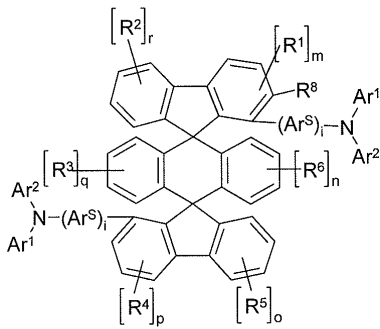
화학식 (13)



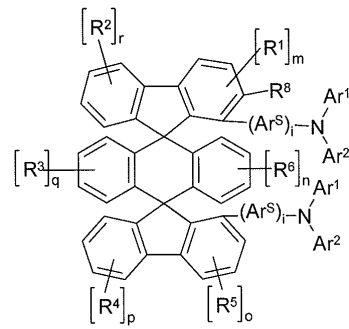
화학식 (14)



화학식 (15)

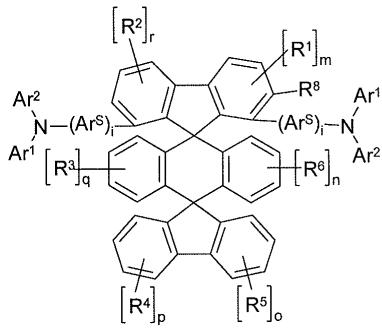


화학식 (16)

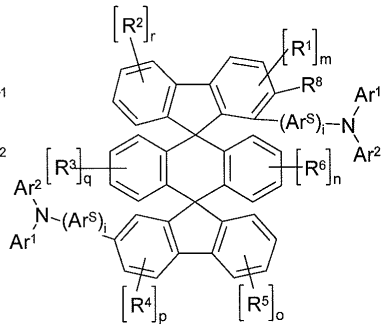


화학식 (17)

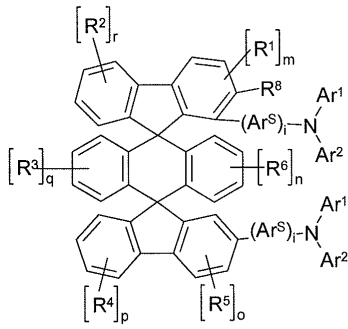
[0048]



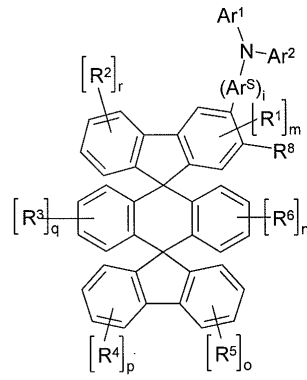
화학식 (18)



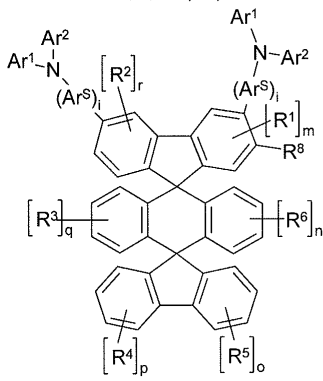
화학식 (19)



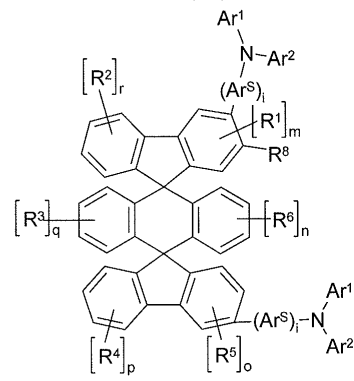
화학식 (20)



화학식 (21)

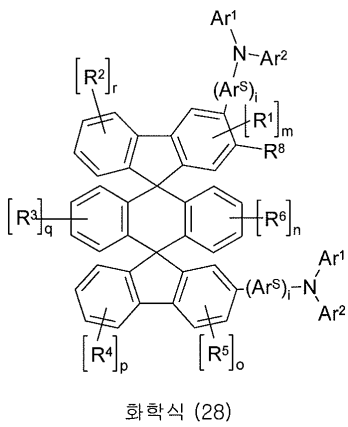
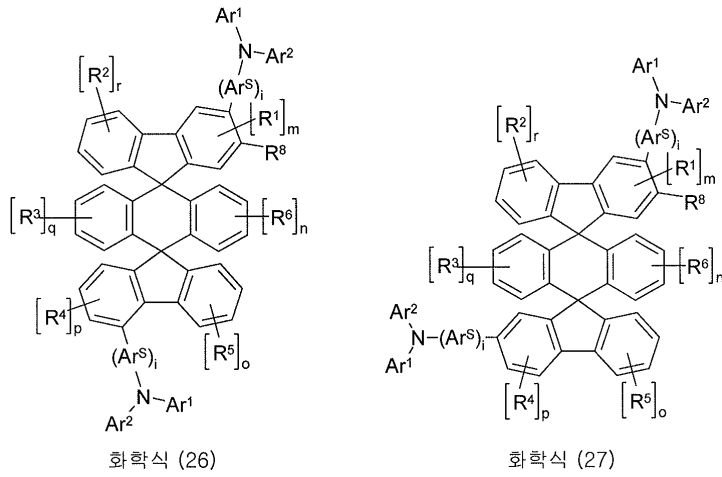
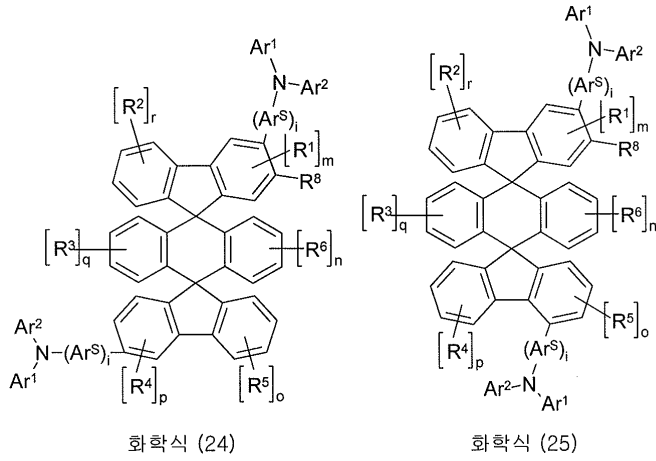


화학식 (22)



화학식 (23)

[0049]



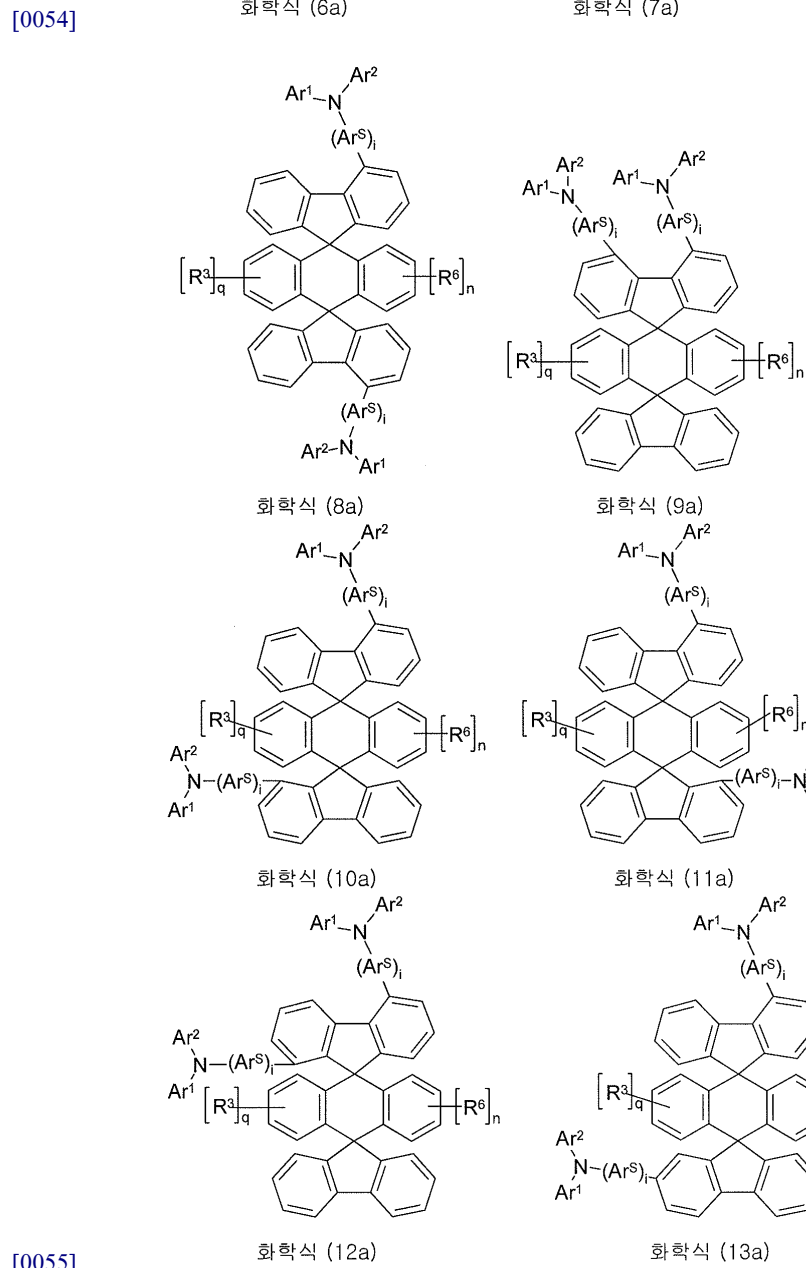
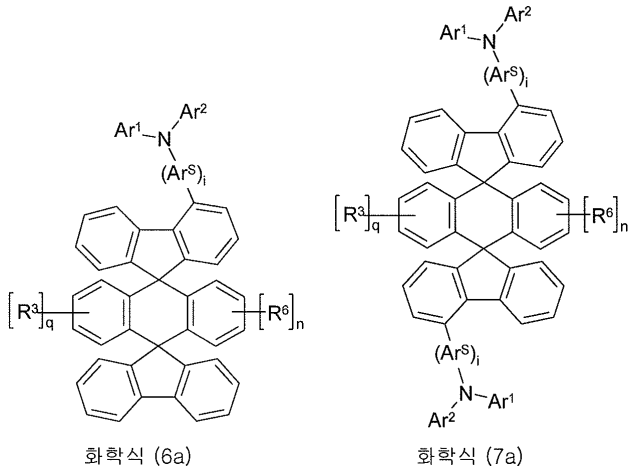
[0050]

[0051]

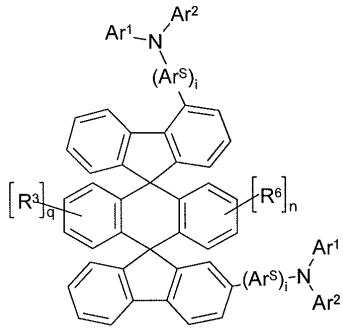
[0052]

[식 중, 기호 및 지수는 화학식 (1) 에 대한 것과 동일한 의미를 가짐].

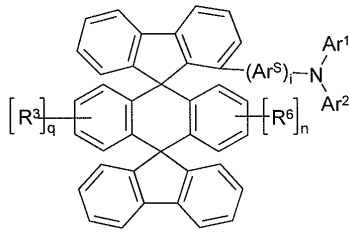
[0053] 더욱 특히 바람직한 구현예에서, 화학식 (1) 의 화합물은 하기 화학식 (6a) 내지 (28a) 중 하나의 화합물이다:



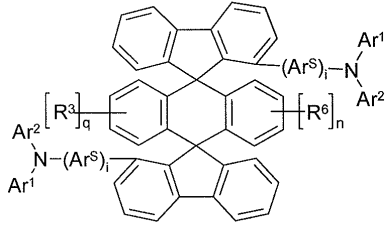
[0055]



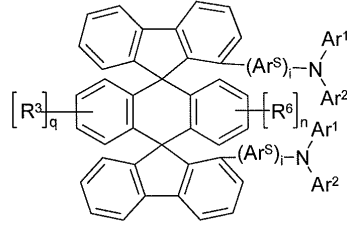
화학식 (14a)



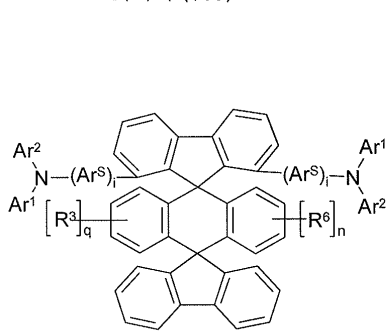
화학식 (15a)



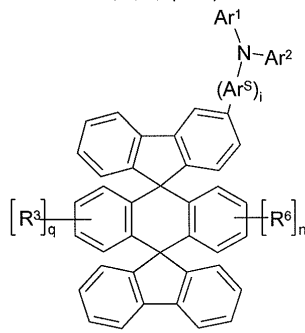
화학식 (16a)



화학식 (17a)

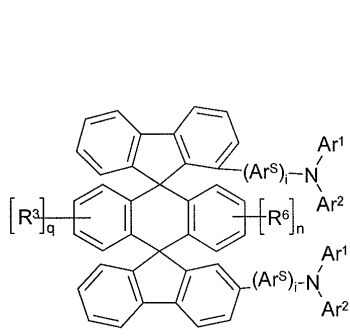


화학식 (18a)

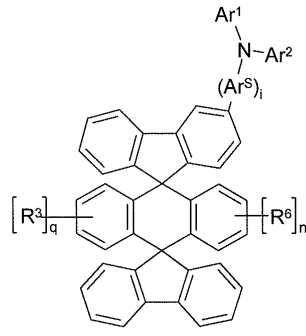


화학식 (19a)

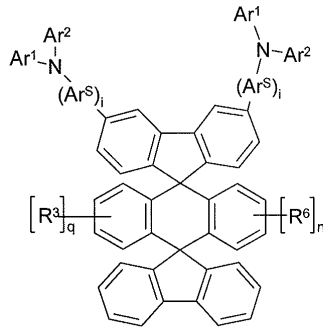
[0056]



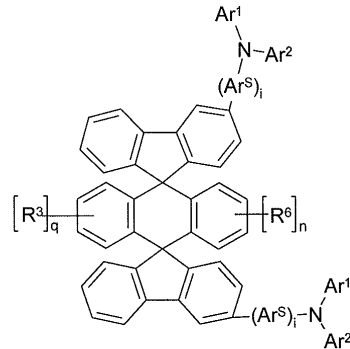
화학식 (20a)



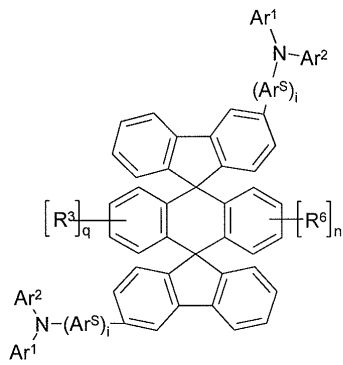
화학식 (21a)



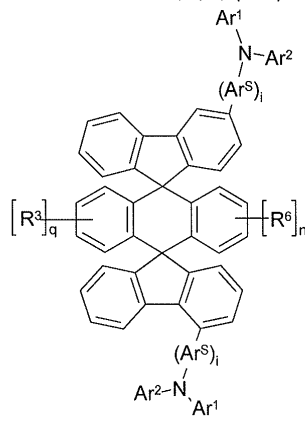
화학식 (22a)



화학식 (23a)

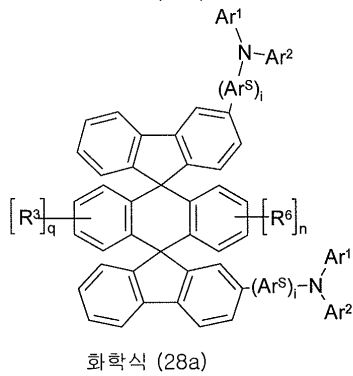
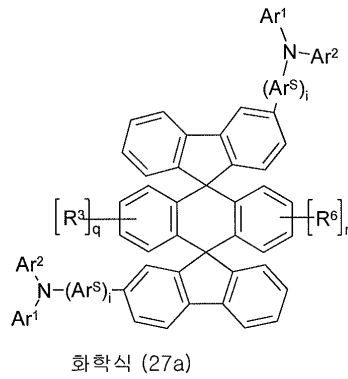
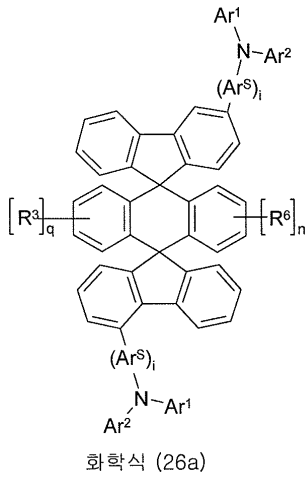


화학식 (24a)



화학식 (25a)

[0057]



[0058]

[0059]

[0060]

[식 중, 기호 및 지수는 화학식 (1) 에 대한 것과 동일한 의미를 가짐].

본 발명의 바람직한 구현예에서, 기  $-NAr^1Ar^2$  또는  $(Ar^S)_i-NAr^1Ar^2$  는 위치 1, 3 또는 4 에 배치되고, 존재하는 경우, 하나 이상의 추가 기  $-NAr^1Ar^2$  또는  $(Ar^S)_i-NAr^1Ar^2$  는 위치 1", 2", 4", 5", 7" 또는 8" 중 하나에 배치된다. 상기 2 개의 기는 특히 바람직하게는 위치 4 및 5, 4 및 4", 4 및 5", 4 및 2", 4 및 7", 3 및 4", 3 및 5", 3 및 2", 3 및 7", 1 및 4", 1 및 5", 1 및 2", 1 및 7" 에 배치된다. 정확하게 2 개의 기  $-NAr^1Ar^2$  또는  $(Ar^S)_i-NAr^1Ar^2$  를 함유하는 화합물이 특히 바람직하다. 따라서, 화학식 (6), (7), (8), (9), (10), (11), (13), (14), (15), (19), (20), (21), (25), (26), (27) 및 (28) 의 화합물이 바람직하고, 화학식 (6a), (7a), (8a), (9a), (10a), (11a), (13a), (14a), (15a), (19a), (20a), (21a), (25a), (26a), (27a) 및 (28a) 의 화합물이 특히 바람직하다.

[0061]

본 발명에 따른 화합물은 또한 화학식 (1) 의 둘 이상의 치환 이성질체의 혼합물 형태로 존재할 수 있다. 치환 이성질체는 기본 구조 상에 동일한 라디칼을 함유하고 있지만, 이들이 기본 구조 상의 상이한 위치에 배치되어 있는 화합물을 의미하는 것으로 의도된다. 이는 바람직하게는 하나 이상의 플루오렌 단위 및/또는 안트라센 단위 상에 서로 거울상 치환 패턴을 갖는 치환 이성질체이다. 이는, 이러한 화합물에 있어서, 하나의 화합물의 위치 1' 에 있는 치환기가 다른 하나의 화합물의 위치 8' 에 있는 치환기에 해당한다는 것을 의미한다. 이는 또한, 위치 2'/7', 3'/6', 4'/5', 5'/4', 6'/3', 2'/7', 1'/8' 및/또는 1"/8", 2"/7", 3"/6", 4"/5", 5"/4", 6"/3", 7"/2", 8"/1" 에 있는 각각의 치환기에 대해서도 적용되며, 여기서 첫 번째 숫자는 하나의 화합물의 치환기 위치를 나타내고, 두 번째 숫자는 다른 하나의 화합물의 치환기 위치를 나타낸다. 치환 이성질체의 위치 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 및 8 에서의 치환 패턴은 바람직하게는 동일하다.

[0062]

따라서, 예를 들어 화합물 (7) 의 합성의 경우, 화학식 (8) 의 해당 치환 이성질체가 수득될 수 있다. 이성질체가 분리되지 않은 경우, 본 발명에 따른 화합물은 화학식 (7) 및 (8) 의 치환 이성질체의 혼합물 형태로 존재한다.

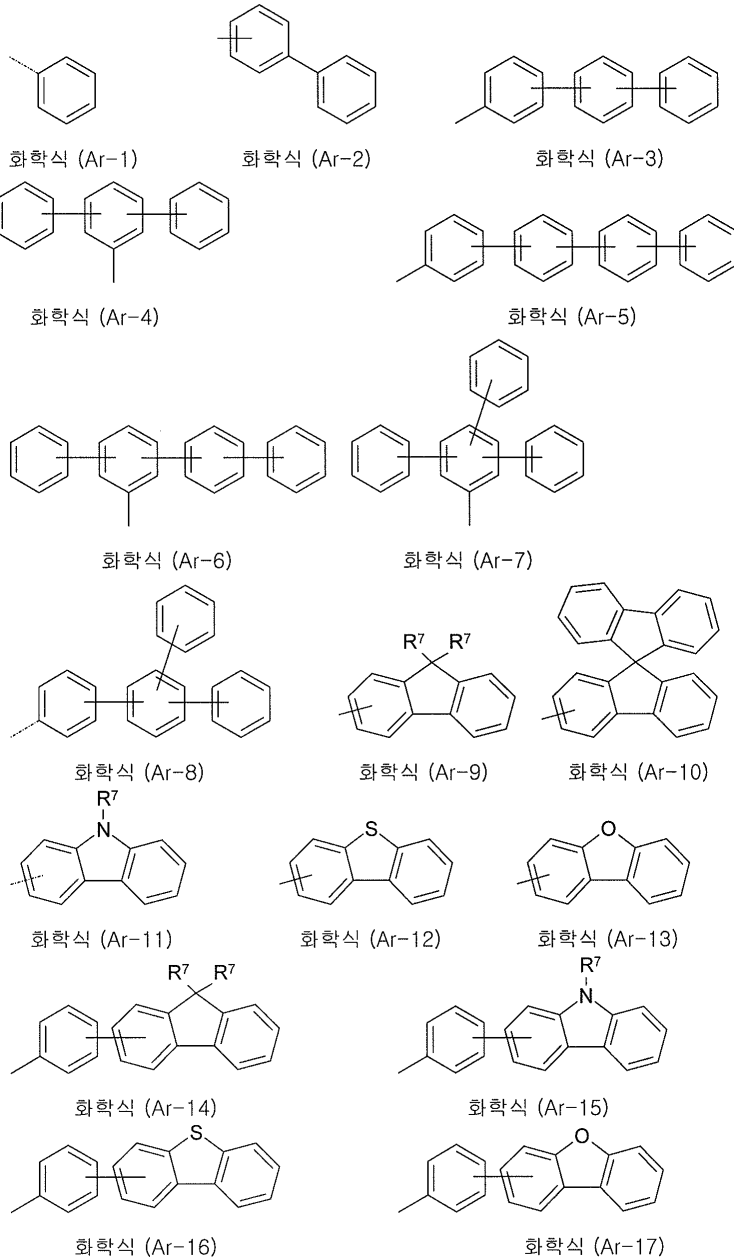
[0063]

입체 중심이 존재하는 경우, 상기 화합물은 또한 거울상이성질체의 혼합물 형태 또는 단리된 거울상이성질체의 형태, 또는 부분입체이성질체의 혼합물 또는 단리된 부분입체이성질체 형태로 존재할 수 있다. 상기 화합물

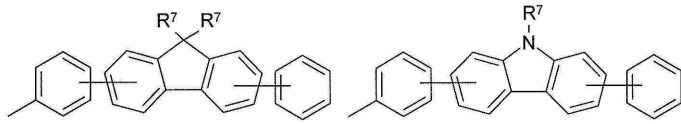
은 또한 본 발명에 따른 다수의 화합물의 혼합물 형태로 이용될 수 있다.

[0064] 본 발명의 보다 바람직한 구현예에서, q 및 n 은 각각 0 또는 1 이다. 존재하는 경우, 라디칼  $R^3$  및  $R^6$  은, 특히 바람직하게는 위치 2', 3', 6' 및/또는 7' 에 배치된다.

[0065] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 기  $Ar^1$  및  $Ar^2$  는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 하기 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-33) 을 갖는 기로부터 선택된다:

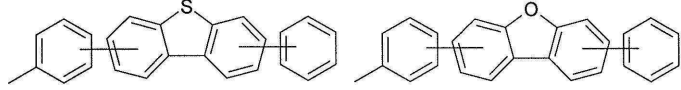


[0066]



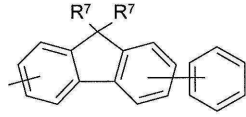
화학식 (Ar-18)

화학식 (Ar-19)

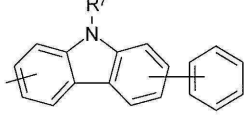


화학식 (Ar-20)

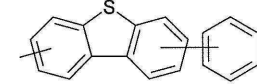
화학식 (Ar-21)



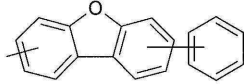
화학식 (Ar-22)



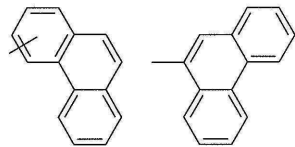
화학식 (Ar-23)



화학식 (Ar-24)



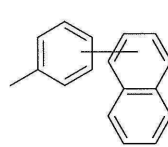
화학식 (Ar-25)



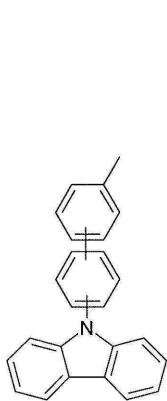
화학식 (Ar-26) 화학식 (Ar-27)



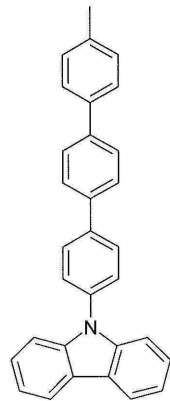
화학식 (Ar-28)



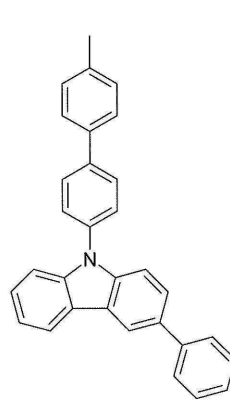
화학식 (Ar-29)



화학식 (Ar-30)

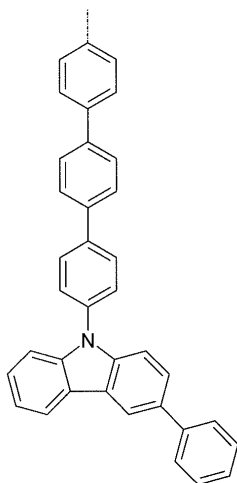


화학식 (Ar-31)



화학식 (Ar-32)

[0067]



화학식 (Ar-33)

[0068]

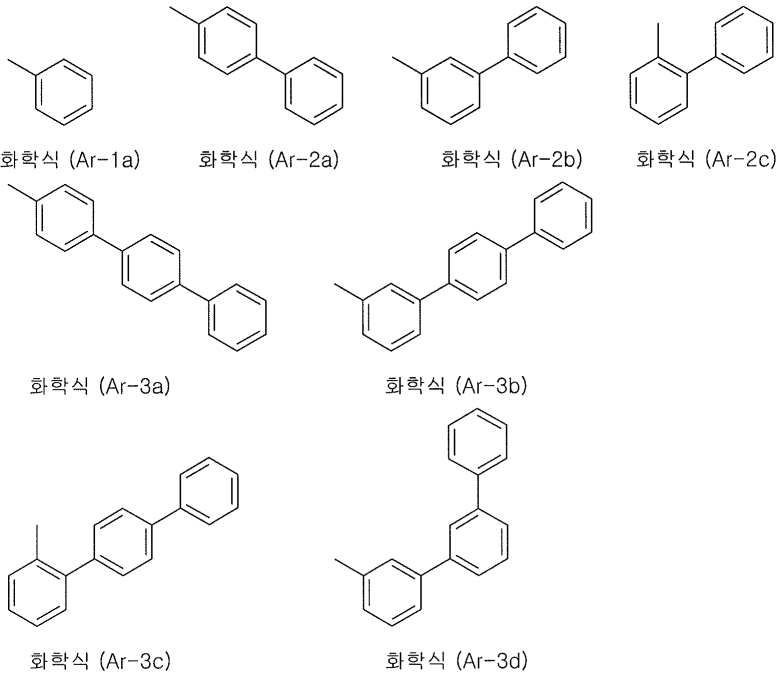
[0069]

[식 중, 사용된 기호는 상기 제시된 의미를 갖고, 대시 기호의 결합 (dashed bond) (또는 말단 단일 결합) 은 질소에의 상기 기의 결합 위치를 나타냄]. 여기서 상기 기들은 자유 위치에서 R<sup>7</sup> 로 치환될 수 있으나, 바

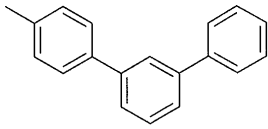
람직하게는 미치환된다.

[0070]

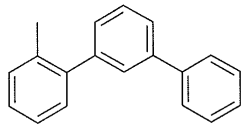
본 발명의 특히 바람직한 구현예에서, 기  $Ar^1$  및  $Ar^2$  는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-33) 의 구조를 갖는 기로부터 선택되고, 여기서 상기 일반식은 하기 화학식 (Ar-1a) 내지 (Ar-33a) 의 바람직한 구현예로 대체된다 (예를 들어  $Ar-2$  는 (Ar-2a), (Ar-2b), (Ar-2c) 로 대체됨):



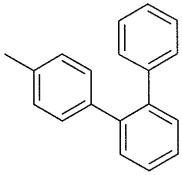
[0071]



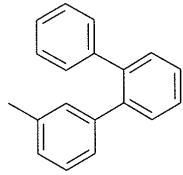
화학식 (Ar-3e)



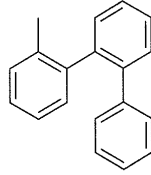
화학식 (Ar-3f)



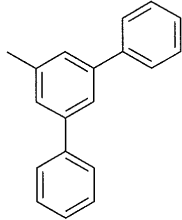
화학식 (Ar-3g)



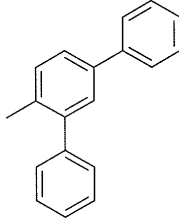
화학식 (Ar-3h)



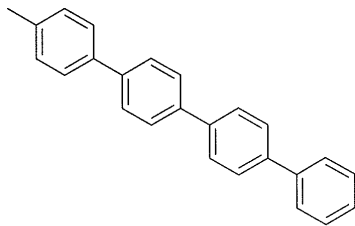
화학식 (Ar-3i)



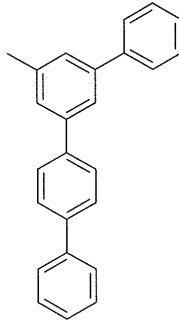
화학식 (Ar-4a)



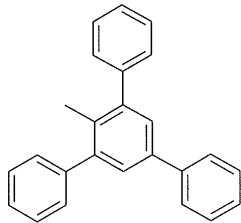
화학식 (Ar-4b)



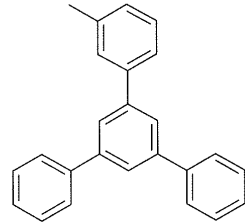
화학식 (Ar-5a)



화학식 (Ar-6a)

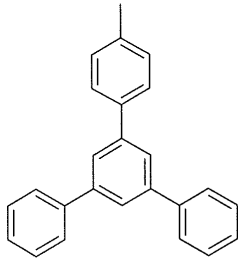


화학식 (Ar-7a)

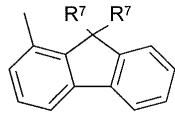


화학식 (Ar-8a)

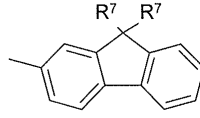
[0072]



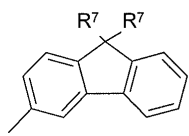
화학식 (Ar-8b)



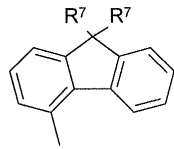
화학식 (Ar-9a)



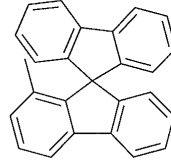
화학식 (Ar-9b)



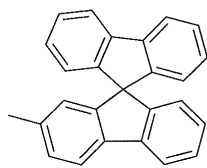
화학식 (Ar-9c)



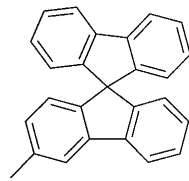
화학식 (Ar-9d)



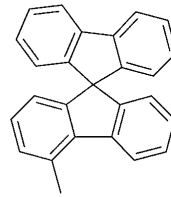
화학식 (Ar-10a)



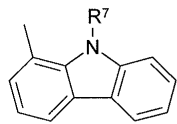
화학식 (Ar-10b)



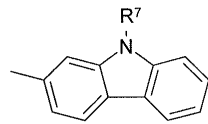
화학식 (Ar-10c)



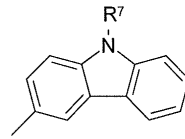
화학식 (Ar-10d)



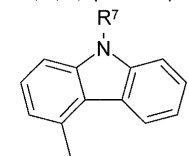
화학식 (Ar-11a)



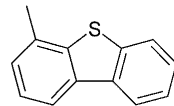
화학식 (Ar-11b)



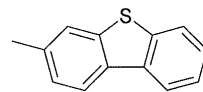
화학식 (Ar-11c)



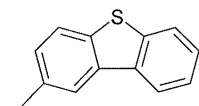
화학식 (Ar-11d)



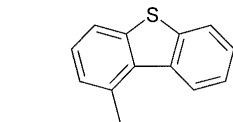
화학식 (Ar-12a)



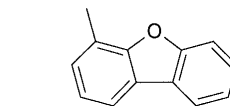
화학식 (Ar-12b)



화학식 (Ar-12c)

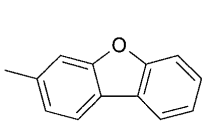


화학식 (Ar-12d)

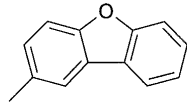


화학식 (Ar-13a)

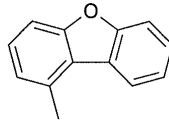
[0073]



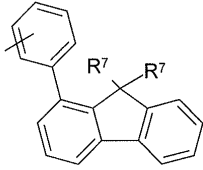
화학식 (Ar-13b)



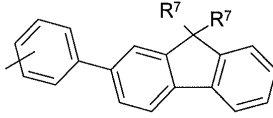
화학식 (Ar-13c)



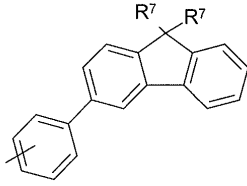
화학식 (Ar-13d)



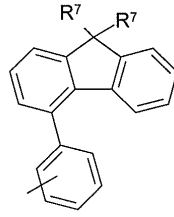
화학식 (Ar-14a)



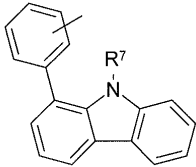
화학식 (Ar-14b)



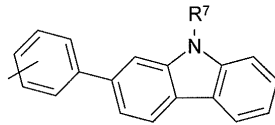
화학식 (Ar-14c)



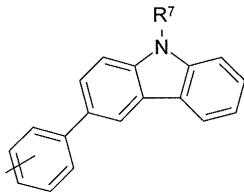
화학식 (Ar-14d)



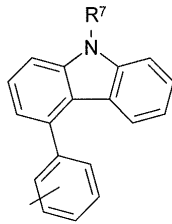
화학식 (Ar-15a)



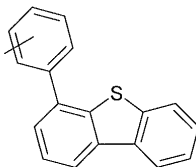
화학식 (Ar-15b)



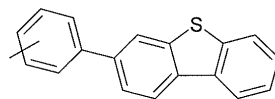
화학식 (Ar-15c)



화학식 (Ar-15d)

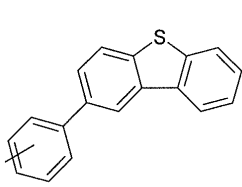


화학식 (Ar-16a)

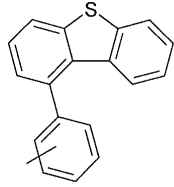


화학식 (Ar-16b)

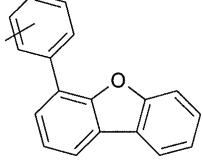
[0074]



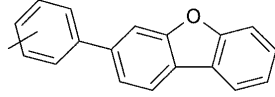
화학식 (Ar-16c)



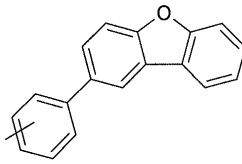
화학식 (Ar-16d)



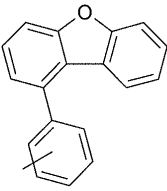
화학식 (Ar-17a)



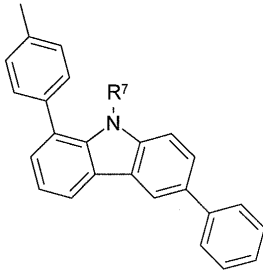
화학식 (Ar-17b)



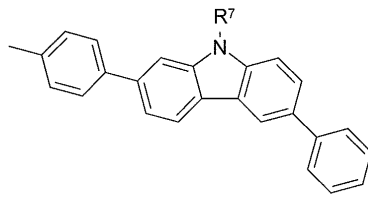
화학식 (Ar-17c)



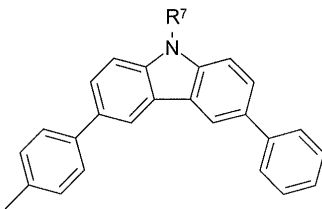
화학식 (Ar-17d)



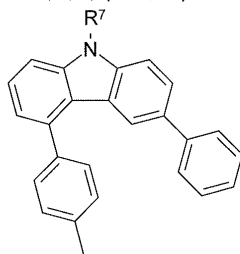
화학식 (Ar-19a)



화학식 (Ar-19b)

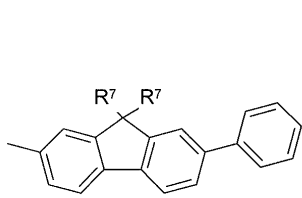


화학식 (Ar-19c)

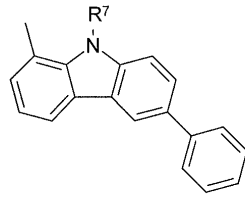


화학식 (Ar-19d)

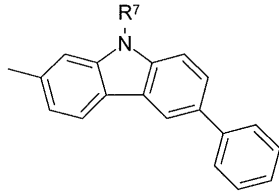
[0075]



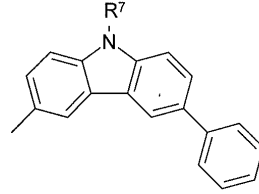
화학식 (Ar-22a)



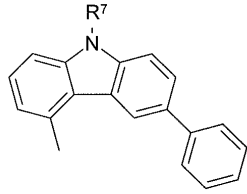
화학식 (Ar-23a)



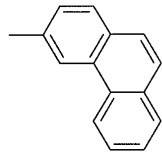
화학식 (Ar-23b)



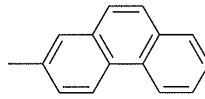
화학식 (Ar-23c)



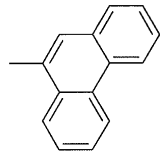
화학식 (Ar-23d)



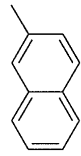
화학식 (Ar-26a)



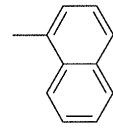
화학식 (Ar-26b)



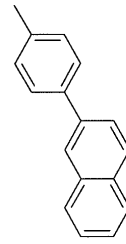
화학식 (Ar-27a)



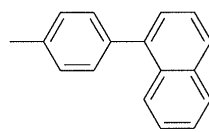
화학식 (Ar-28a)



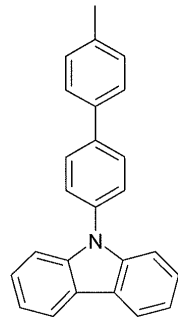
화학식 (Ar-28b)



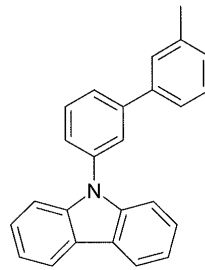
화학식 (Ar-29a)



화학식 (Ar-29b)

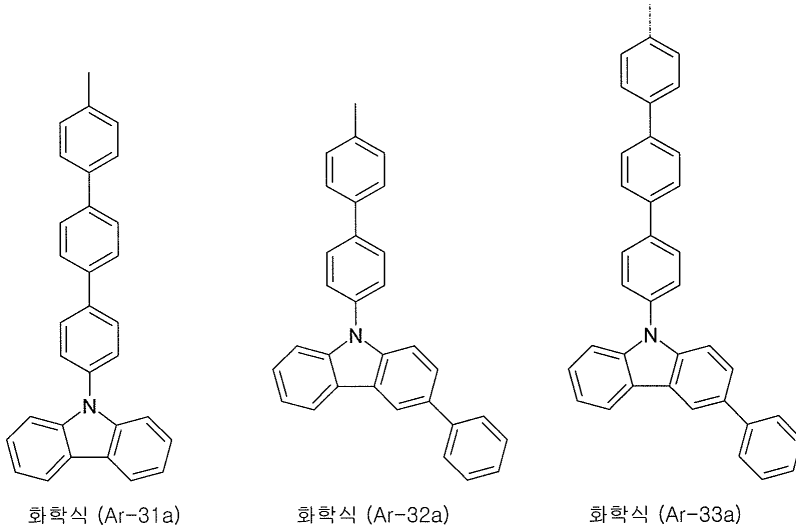


화학식 (Ar-30a)



화학식 (Ar-30b)

[0076]



[0077]

[0078]

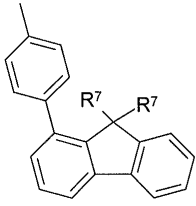
[식 중, 사용된 기호는 상기 제시된 의미를 갖고, 대시 기호의 결합 (또는 말단 단일 결합) 은 질소와의 상기 기의 결합 위치를 나타냄]. 여기서 상기 기들은 자유 위치에서 R<sup>7</sup> 로 치환될 수 있다. 이들은 바람직한 것은 미치환된다.

[0079]

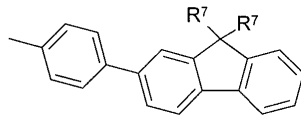
본 발명의 더욱 특히 바람직한 구현예에서, 기 Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup> 는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 화학식 (Ar-1a) 내지 (Ar-33a) 의 구조를 갖는 기로부터 선택된다.

[0080]

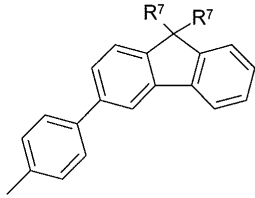
화학식 (Ar-14a) 의 기의 특히 바람직한 구조는 하기 화학식 (Ar-14a1) 로 제시된다. 화학식 (Ar-14b) 의 기의 특히 바람직한 구조는 하기 화학식 (Ar-14b1) 로 제시된다. 화학식 (Ar-14c) 의 기의 특히 바람직한 구조는 하기 화학식 (Ar-14c1) 로 제시된다. 화학식 (Ar-14d) 의 기의 특히 바람직한 구조는 하기 화학식 (Ar-14d1) 로 제시된다. 화학식 (Ar-15a) 의 기의 특히 바람직한 구조는 하기 화학식 (Ar-15a1) 로 제시된다. 화학식 (Ar-15b) 의 기의 특히 바람직한 구조는 하기 화학식 (Ar-15b1) 로 제시된다. 화학식 (Ar-15c) 의 기의 특히 바람직한 구조는 하기 화학식 (Ar-15c1) 로 제시된다. 화학식 (Ar-15d) 의 기의 특히 바람직한 구조는 하기 화학식 (Ar-15d1) 로 제시된다. 화학식 (Ar-16a) 의 기의 특히 바람직한 구조는 하기 화학식 (Ar-16a1) 로 제시된다. 화학식 (Ar-16b) 의 기의 특히 바람직한 구조는 하기 화학식 (Ar-16b1) 로 제시된다. 화학식 (Ar-16c) 의 기의 특히 바람직한 구조는 하기 화학식 (Ar-16c1) 로 제시된다. 화학식 (Ar-16d) 의 기의 특히 바람직한 구조는 하기 화학식 (Ar-16d1) 로 제시된다. 화학식 (Ar-17a) 의 기의 특히 바람직한 구조는 하기 화학식 (Ar-17a1), (Ar-17a2) 및 (Ar-17a3) 으로 제시된다. 화학식 (Ar-17b) 의 기의 특히 바람직한 구조는 하기 화학식 (Ar-17b1) 로 제시된다. 화학식 (Ar-17c) 의 기의 특히 바람직한 구조는 하기 화학식 (Ar-17c1) 및 (Ar-17c2) 로 제시된다. 화학식 (Ar-17d) 의 기의 특히 바람직한 구조는 하기 화학식 (Ar-17d1) 로 제시된다.



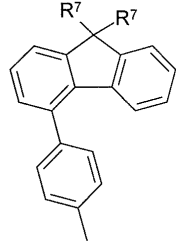
화학식 (Ar-14a1)



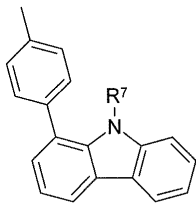
화학식 (Ar-14b1)



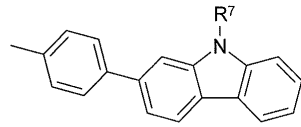
화학식 (Ar-14c1)



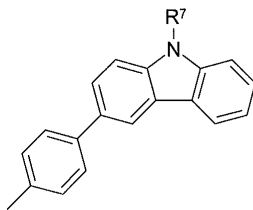
화학식 (Ar-14d1)



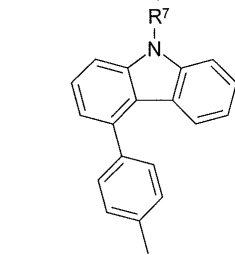
화학식 (Ar-15a1)



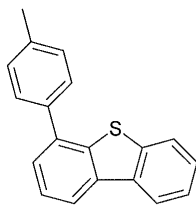
화학식 (Ar-15b1)



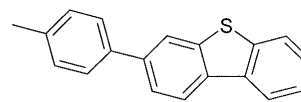
화학식 (Ar-15c1)



화학식 (Ar-15d1)

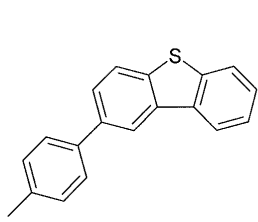


화학식 (Ar-16a1)

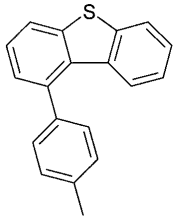


화학식 (Ar-16b1)

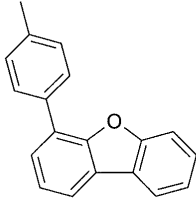
[0081]



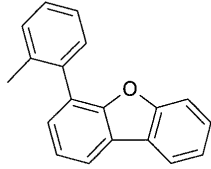
화학식 (Ar-16c1)



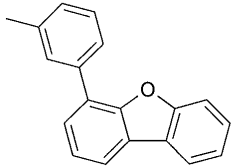
화학식 (Ar-16d1)



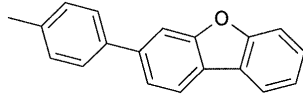
화학식 (Ar-17a1)



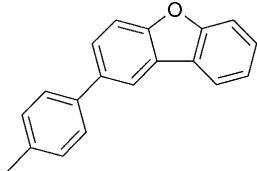
화학식 (Ar-17a2)



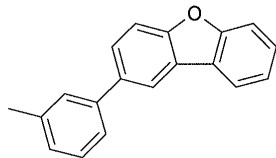
화학식 (Ar-17a3)



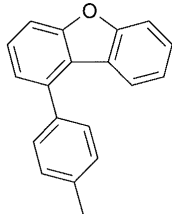
화학식 (Ar-17b1)



화학식 (Ar-17c1)



화학식 (Ar-17c2)



화학식 (Ar-17d1)

[0082]

[0083]

[식 중, 사용된 기호는 상기 제시된 의미를 갖고, 대시 기호의 결합 (또는 말단 단일 결합) 은 질소에의 상기 기의 결합 위치를 나타냄]. 여기서 상기 기들은 자유 위치에서  $R^7$  로 치환될 수 있다. 이들은 바람직하게는 미치환된다.

[0084]

상기 제시된 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-33) 의 2 개의 기  $Ar^1$  및  $Ar^2$  는 목적하는 경우 서로 조합될 수 있다. 여기서, 화학식 (Ar-1), (Ar-2), (Ar-3), (Ar-4), (Ar-8), (Ar-9), (Ar-10), (Ar-11), (Ar-12), (Ar-13), (Ar-14), (Ar-15), (Ar-16), (Ar-17) 및 (Ar-29) 의 기가 특히 바람직하다.

[0085] 따라서, 매우 특히 바람직한 기  $-NAr^1Ar^2$  는  $Ar^1$  및  $Ar^2$  에 대하여 하기 조합을 갖는 기이다:

Ar <sup>1</sup> 에 대한 화학식	Ar <sup>2</sup> 에 대한 화학식
(Ar-2)	(Ar-1)
(Ar-3)	(Ar-1)
(Ar-4)	(Ar-1)
(Ar-8)	(Ar-1)
(Ar-9)	(Ar-1)
(Ar-10)	(Ar-1)
(Ar-11)	(Ar-1)
(Ar-12)	(Ar-1)
(Ar-13)	(Ar-1)
(Ar-14)	(Ar-1)
(Ar-15)	(Ar-1)
(Ar-16)	(Ar-1)
(Ar-17)	(Ar-1)
(Ar-29)	(Ar-1)
(Ar-2)	(Ar-2)
(Ar-3)	(Ar-2)
(Ar-4)	(Ar-2)
(Ar-8)	(Ar-2)
(Ar-9)	(Ar-2)
(Ar-10)	(Ar-2)
(Ar-11)	(Ar-2)
(Ar-12)	(Ar-2)
(Ar-13)	(Ar-2)
(Ar-14)	(Ar-2)
(Ar-15)	(Ar-2)
(Ar-16)	(Ar-2)
(Ar-17)	(Ar-2)
(Ar-29)	(Ar-2)
(Ar-3)	(Ar-3)
(Ar-4)	(Ar-3)
(Ar-8)	(Ar-3)
(Ar-9)	(Ar-3)
(Ar-10)	(Ar-3)
(Ar-11)	(Ar-3)
(Ar-12)	(Ar-3)
(Ar-13)	(Ar-3)
(Ar-14)	(Ar-3)
(Ar-15)	(Ar-3)
(Ar-16)	(Ar-3)
(Ar-17)	(Ar-3)
(Ar-29)	(Ar-3)
(Ar-4)	(Ar-4)
(Ar-8)	(Ar-4)
(Ar-9)	(Ar-4)
(Ar-10)	(Ar-4)

Ar <sup>1</sup> 에 대한 화학식	Ar <sup>2</sup> 에 대한 화학식
(Ar-11)	(Ar-4)
(Ar-12)	(Ar-4)
(Ar-13)	(Ar-4)
(Ar-14)	(Ar-4)
(Ar-15)	(Ar-4)
(Ar-16)	(Ar-4)
(Ar-17)	(Ar-4)
(Ar-29)	(Ar-4)
(Ar-8)	(Ar-8)
(Ar-9)	(Ar-8)
(Ar-10)	(Ar-8)
(Ar-11)	(Ar-8)
(Ar-12)	(Ar-8)
(Ar-13)	(Ar-8)
(Ar-14)	(Ar-8)
(Ar-15)	(Ar-8)
(Ar-16)	(Ar-8)
(Ar-17)	(Ar-8)
(Ar-29)	(Ar-8)
(Ar-9)	(Ar-9)
(Ar-10)	(Ar-9)
(Ar-11)	(Ar-9)
(Ar-12)	(Ar-9)
(Ar-13)	(Ar-9)
(Ar-14)	(Ar-9)
(Ar-15)	(Ar-9)
(Ar-16)	(Ar-9)
(Ar-17)	(Ar-9)
(Ar-29)	(Ar-9)
(Ar-10)	(Ar-10)
(Ar-11)	(Ar-10)
(Ar-12)	(Ar-10)
(Ar-13)	(Ar-10)
(Ar-14)	(Ar-10)
(Ar-15)	(Ar-10)
(Ar-16)	(Ar-10)
(Ar-17)	(Ar-10)
(Ar-29)	(Ar-10)
(Ar-11)	(Ar-11)
(Ar-12)	(Ar-11)
(Ar-13)	(Ar-11)
(Ar-14)	(Ar-11)
(Ar-15)	(Ar-11)
(Ar-16)	(Ar-11)
(Ar-17)	(Ar-11)

[0086]

Ar <sup>1</sup> 에 대한 화학식	Ar <sup>2</sup> 에 대한 화학식
(Ar-29)	(Ar-11)
(Ar-12)	(Ar-12)
(Ar-13)	(Ar-12)
(Ar-14)	(Ar-12)
(Ar-15)	(Ar-12)
(Ar-16)	(Ar-12)
(Ar-17)	(Ar-12)
(Ar-29)	(Ar-12)
(Ar-13)	(Ar-13)
(Ar-14)	(Ar-13)
(Ar-15)	(Ar-13)
(Ar-16)	(Ar-13)
(Ar-17)	(Ar-13)
(Ar-29)	(Ar-13)
(Ar-14)	(Ar-14)
(Ar-15)	(Ar-14)

Ar <sup>1</sup> 에 대한 화학식	Ar <sup>2</sup> 에 대한 화학식
(Ar-16)	(Ar-14)
(Ar-17)	(Ar-14)
(Ar-29)	(Ar-14)
(Ar-15)	(Ar-15)
(Ar-16)	(Ar-15)
(Ar-17)	(Ar-15)
(Ar-29)	(Ar-15)
(Ar-16)	(Ar-16)
(Ar-17)	(Ar-16)
(Ar-29)	(Ar-16)
(Ar-17)	(Ar-17)
(Ar-29)	(Ar-17)
(Ar-29)	(Ar-29)
(Ar-1)	(Ar-1)
(Ar-9)	(Ar-30)
(Ar-1)	(Ar-30)

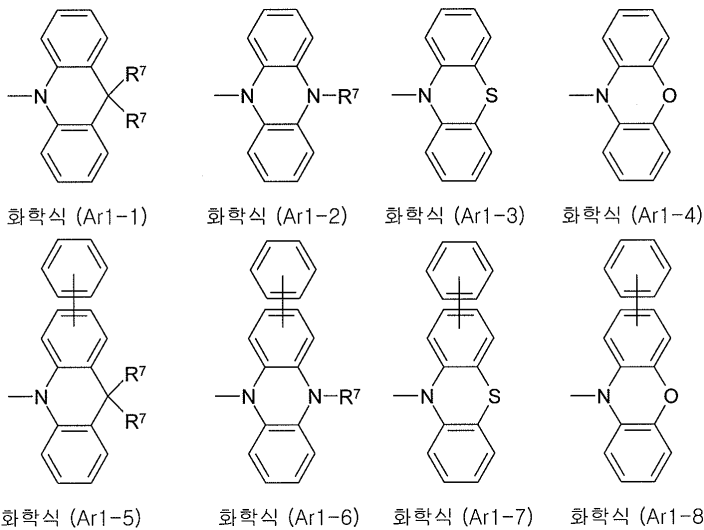
[0087]

[0088]

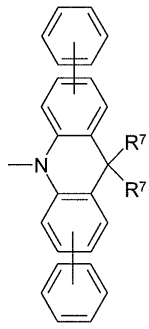
매우 바람직한 기 -NAr<sup>1</sup>Ar<sup>2</sup>는 상기 제시된 표의 조합을 갖는 기로서, 여기서, 화학식 (Ar-1), (Ar-2), (Ar-3), (Ar-4), (Ar-8), (Ar-9), (Ar-10), (Ar-11), (Ar-12), (Ar-13), (Ar-14), (Ar-15), (Ar-16), (Ar-17) 및 (Ar-29) 대신, 각각의 화학식의 바람직한 화학식, 예를 들어 (Ar-2a), (Ar-2b) 또는 (Ar-2c)가, 각각의 경우, (Ar-2) 대신 이용된다.

[0089]

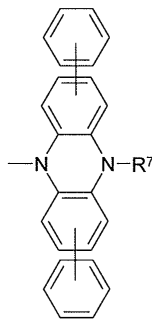
화학식 (1) 내지 (28) 또는 (6a) 내지 (28a)의 화합물에서 기 Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>가 기 E에 의해 서로 연결되는 경우, 기 -NAr<sup>1</sup>Ar<sup>2</sup>는 바람직하게는 하기 화학식 (Ar1-1) 내지 (Ar1-19) 중 하나의 구조를 갖는다:



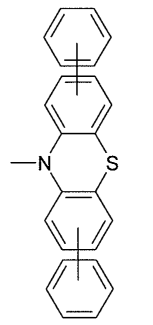
[0090]



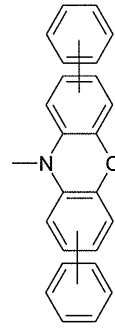
화학식 (Ar1-9)



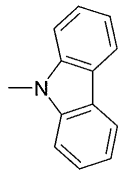
화학식 (Ar1-10)



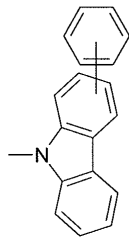
화학식 (Ar1-11)



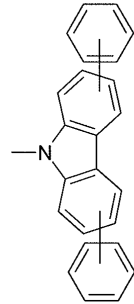
화학식 (Ar1-12)



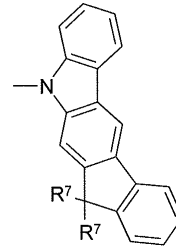
화학식 (Ar1-13)



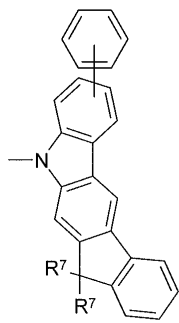
화학식 (Ar1-14)



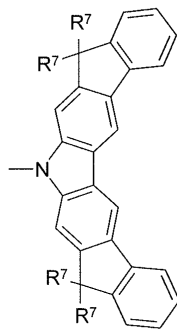
화학식 (Ar1-15)



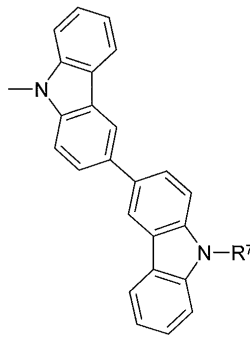
화학식 (Ar1-16)



화학식 (Ar1-17)



화학식 (Ar1-18)



화학식 (Ar1-19)

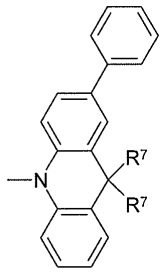
[0091]

[0092]

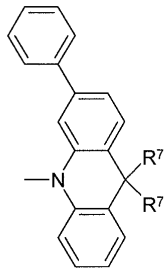
[식 중, 사용된 기호는 상기 제시된 의미를 갖고, 대시 기호의 결합 (또는 말단 단일 결합) 은 기본 구조, 또는  $Ar^s$  에의 결합 위치를 나타냄]. 여기서 상기 기들은 자유 위치에서  $R^7$  로 치환될 수 있다.

[0093]

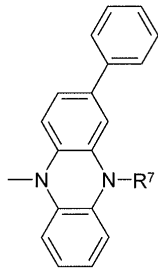
본 발명의 특히 바람직한 구현예에서, 화학식 (Ar1-5), (Ar1-6), (Ar1-7), (Ar1-8), (Ar1-9), (Ar1-10), (Ar1-11), (Ar1-12), (Ar1-14), (Ar1-15) 및 (Ar1-17) 의 화합물은 하기 화학식을 갖는 화합물로부터 선택된다:



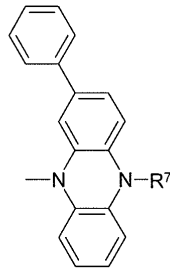
화학식 (Ar1-5a)



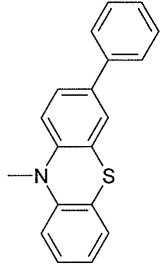
화학식 (Ar1-5b)



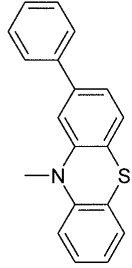
화학식 (Ar1-6a)



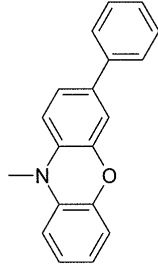
화학식 (Ar1-6b)



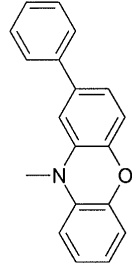
화학식 (Ar1-7a)



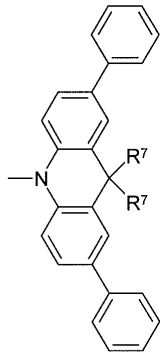
화학식 (Ar1-7b)



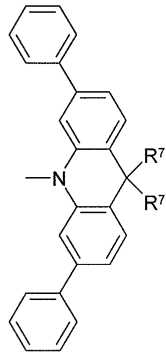
화학식 (Ar1-8a)



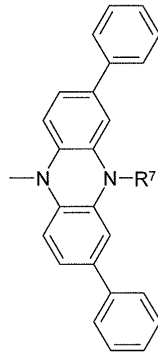
화학식 (Ar1-8b)



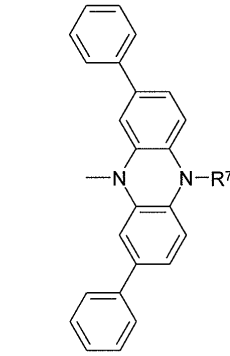
화학식 (Ar1-9a)



화학식 (Ar1-9b)

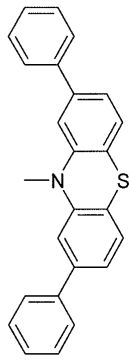
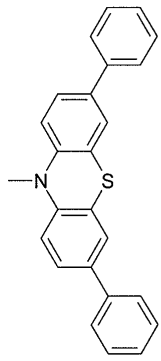


화학식 (Ar1-10a)

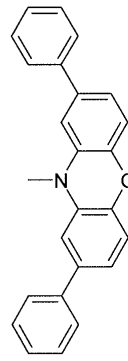
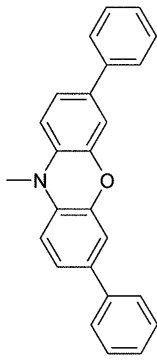


화학식 (Ar1-10b)

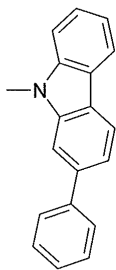
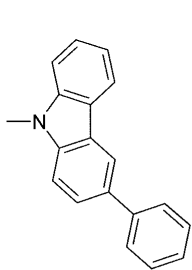
[0094]



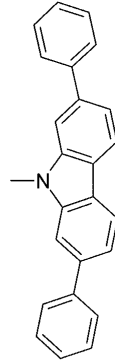
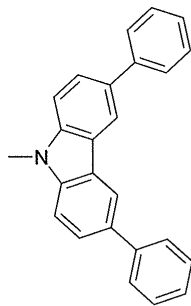
화학식 (Ar1-11a) 화학식 (Ar1-11b)



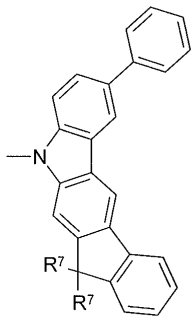
화학식 (Ar1-12a) 화학식 (Ar1-12b)



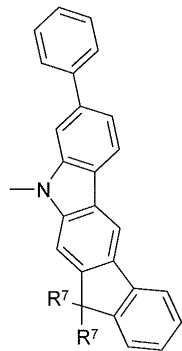
화학식 (Ar1-14a) 화학식 (Ar1-14b)



화학식 (Ar1-15a) 화학식 (Ar1-15b)



화학식 (Ar1-17a)



화학식 (Ar1-17b)

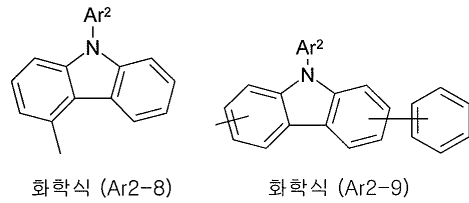
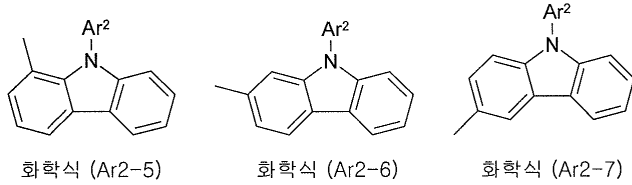
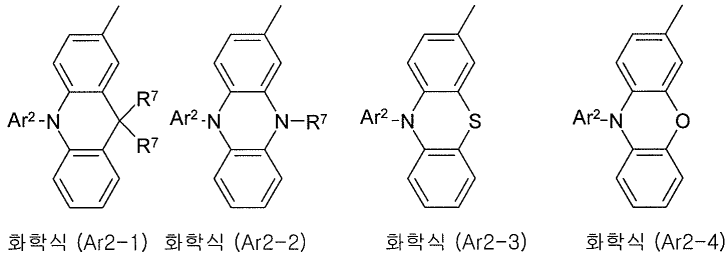
[0095]

[0096]

[식 중, 사용된 기호는 상기 제시된 의미를 갖고, 대시 기호의 결합 (또는 말단 단일 결합) 은 기본 구조, 또는  $Ar^S$  에의 결합 위치를 나타냄]. 여기서 상기 기호들은 자유 위치에서  $R^7$  로 치환될 수 있다. 이들은 바람직하게는 미치환된다.

[0097]

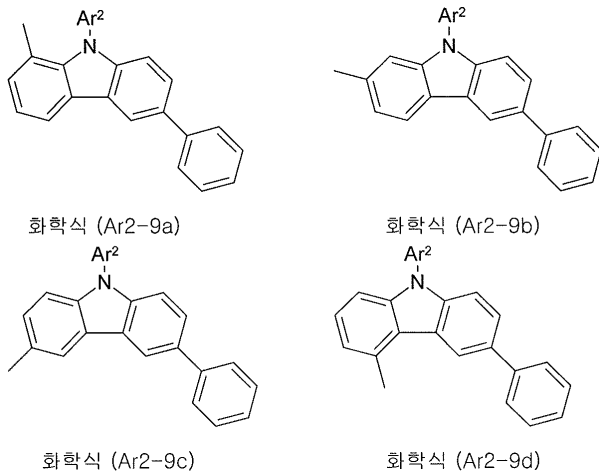
화학식 (1) 내지 (28) 또는 (6a) 내지 (28a) 의 화합물에서 기  $Ar^S$  가 기 E 에 의해  $Ar^1$  에 연결되는 경우, 기  $-Ar^S-NAr^1Ar^2$  는 바람직하게는 하기 화학식 (Ar2-1) 내지 (Ar2-9) 중 하나의 구조를 갖고, 대시 기호의 결합은 기본 구조 또는 옆  $Ar^S$  단위에서의 결합을 나타낸다. 유사한 경향이 기  $Ar^S$  의  $Ar^2$  에의 연결에도 적용된다.



[0098]

[0099] [식 중, 사용된 기호는 상기 제시된 의미를 가짐]. 여기서 상기 기들은 자유 위치에서  $R^7$  로 치환될 수 있다. 이들은 바람직하게는 미치환된다.

[0100] 화학식 (Ar2-9) 의 바람직한 구현예는 하기 화학식으로 제시된다:

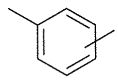


[0101]

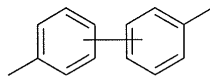
[0102] [식 중, 사용된 기호는 상기 제시된 의미를 가짐]. 여기서 상기 기들은 자유 위치에서  $R^7$  로 치환될 수 있다. 이들은 바람직하게는 미치환된다.

[0103] 기  $Ar^S$  는 바람직하게는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 6 내지 18 개의 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 이다.

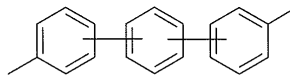
[0104] 본 발명의 보다 바람직한 구현예에서, 지수  $i$  는 1 또는 2 이고, 기  $Ar^S$  는 하기 화학식 (Ar3-1) 내지 (Ar3-12) 중 하나의 기를 나타낸다:



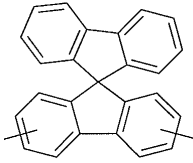
화학식 (Ar3-1)



화학식 (Ar3-2)



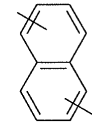
화학식 (Ar3-3)



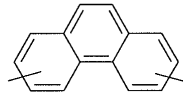
화학식 (Ar3-4)



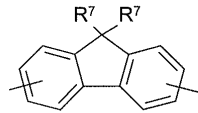
화학식 (Ar3-5)



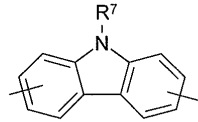
화학식 (Ar3-6)



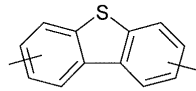
화학식 (Ar3-7)



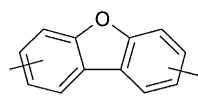
화학식 (Ar3-8)



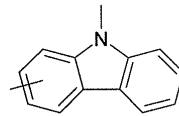
화학식 (Ar3-9)



화학식 (Ar3-10)



화학식 (Ar3-11)



화학식 (Ar3-12)

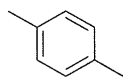
[0105]

[0106]

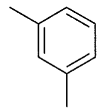
[식 중, 사용된 기호는 상기 제시된 의미를 갖고, 2 개의 대시 기호의 결합 (또는 말단 단일 결합) 은 인접한 기들에의 결합을 나타냄]. 여기서 상기 기들은 자유 위치에서 R<sup>7</sup> 로 치환될 수 있다. 이들은 바람직하게는 미치환된다.

[0107]

상기 화학식의 바람직한 구현에는 하기 화학식 (Ar3-1a) 내지 (Ar3-12a) 로 제시된다:



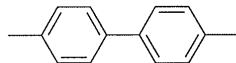
화학식 (Ar3-1a)



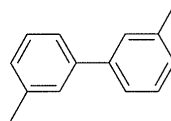
화학식 (Ar3-1b)



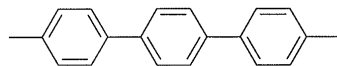
화학식 (Ar3-1c)



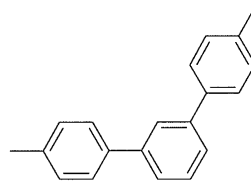
화학식 (Ar3-2a)



화학식 (Ar3-2b)

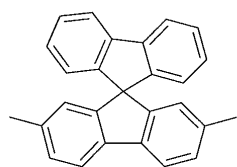


화학식 (Ar3-3a)

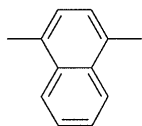


화학식 (Ar3-3b)

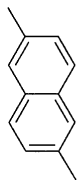
[0108]



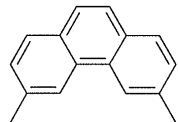
화학식 (Ar3-4a)



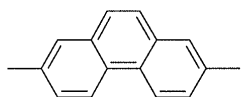
화학식 (Ar3-5a)



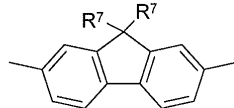
화학식 (Ar3-6a)



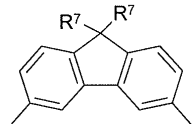
화학식 (Ar3-7a)



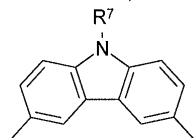
화학식 (Ar3-7b)



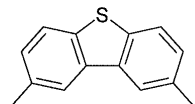
화학식 (Ar3-8a)



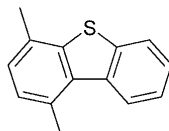
화학식 (Ar3-8b)



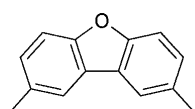
화학식 (Ar3-9a)



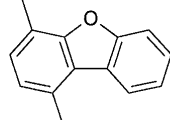
화학식 (Ar3-10a)



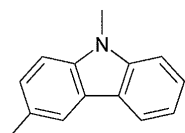
화학식 (Ar3-10b)



화학식 (Ar3-11a)



화학식 (Ar3-11b)



화학식 (Ar3-12a)

[0109]

[0110]

[식 중, 사용된 기호는 상기 제시된 의미를 갖고, 2 개의 대시 기호의 결합 (또는 말단 단일 결합) 은 인접한 기들에의 결합을 나타냄]. 여기서 상기 기들은 자유 위치에서  $R^7$  로 치환될 수 있다. 이들은 바람직하게는 미치환된다.

[0111]

각각의 기 ( $Ar^S$ )<sub>i</sub> 에 있어서, 최대 하나의  $Ar^S$  가 화학식 (Ar3-9), (Ar3-12), (Ar3-9a) 또는 (Ar3-12a) 의 기인 것이 바람직하다.

[0112]

$R^7$  이  $N(R^7)_2$  를 나타내는 경우,  $R^7$  은 바람직하게는, 동일하거나 상이하게, 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타낸다. 따라서,  $R^7$  은 특히 바람직하게는 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-33) 또는 이의 바람직한 구현예의 구조 (이들은 여기서  $R^7$  대신  $R^9$  로 치환될 수 있음) 로부터 선택된다.

[0113]

바람직한 구현예에 있어서,  $R^7$  은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CN,  $Si(R^9)_3$ , 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 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있고, 여기서 각각의 경우 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는  $Si(R^9)_2$ ,  $C=NR^9$ ,  $P(=O)(R^9)$ , SO,  $SO_2$ ,  $NR^9$ , O, S 또는  $CONR^9$  로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br 또는 I 로 대체될 수 있음), 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기 또는 헤테로아릴옥시기 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬기 또는 헤테로아르알킬기 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기  $R^7$

은 임의로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 또는 방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 을 형성할 수 있다.

[0114]  $R^7$  의 상기 정의에 따라, 화학식 (1) 의 화합물은 상기 화합물에 명백하게 제시된 것 이외에 추가의 아릴아미노기를 함유하지 않는다.

[0115] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 화학식 (1) 내지 (28), 또는 (6a) 내지 (28a) 의 화합물에서  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$ ,  $R^8$  은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Si( $R^9$ )<sub>3</sub>, CN, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기 또는 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시기 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는 O 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 로 대체될 수 있음), 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기  $R^1$  내지  $R^7$ , 또는  $R^1$  및  $R^8$  은, 임의로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 을 형성할 수 있다.

[0116] 본 발명의 특히 바람직한 구현예에서, 화학식 (1) 내지 (28), 또는 (6a) 내지 (28a) 의 화합물에서  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$ ,  $R^8$  은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음), 6 내지 60 개의 C 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기  $R^1$  내지  $R^7$ , 또는  $R^1$  및  $R^8$  은, 임의로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 을 형성할 수 있다. 본 발명의 매우 특히 바람직한 구현예에서, 화학식 (1) 내지 (28), 또는 (6a) 내지 (28a) 의 화합물에서  $R^1$  내지  $R^6$  은 H 이다.

[0117] 본 발명의 보다 바람직한 구현예에서,  $Ar^1$  또는  $Ar^2$  또는  $Ar^5$  에 결합된 라디칼  $R^7$  은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0118] 본 발명의 보다 바람직한 구현예에서, 질소에 직접 결합된  $Ar^1$  또는  $Ar^2$  의 아틸기의 오르토-위치에 결합된 하나 이상의 라디칼  $R^7$  은 수소 또는 중수소가 아니다. 이는, 특히, 추가의 아틸기가 아틸기 상의 오르토-위치에 이미 결합되어 있지 않은 경우에 적용되고, 예를 들어, 화학식 (Ar-2c) 의 경우와 같다.

[0119] 나아가, 플루오렌의 9-위치에 있는 2 개의 치환기  $R^7$  이 함께, 바람직하게는 3 내지 8 개의 C 원자, 특히 바람직하게는 5 또는 6 개의 C 원자를 갖는 시클로알킬 고리를 형성하는 것이 바람직할 수 있다.

[0120] 보다 바람직한 구현예에서, 화학식 (Ar1-1), (Ar1-5), (Ar1-9), (Ar1-16), (Ar1-17), (Ar1-5a), (Ar1-5b), (Ar1-9a), (Ar1-9b), (Ar1-17a), (Ar1-17b), (Ar2-1), (Ar3-8), (Ar3-8a) 및 (Ar3-8b) 에서 탄소 브릿지에 결합된  $R^7$  은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 또는 6 내지 30 개의 C 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (이는 상기 정의된 바와 같고, 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택된다. 여기서, 2 개의 기  $R^7$  은 또한 서로 함께 지방족 또는, 상기 제시된  $R^7$  의 정의 이외에, 또한 방향족일 수 있는 고리 시스템을 형성할 수 있다. 스피로 시스템은 고리 형성에 의해 형성된다.

[0121] 보다 바람직한 구현예에서, 화학식 (Ar1-2), (Ar1-6), (Ar1-10), (Ar1-19), (Ar1-6a), (Ar1-6b), (Ar1-10a), (Ar1-10b), (Ar2-2), (Ar3-9) 및 (Ar3-9a) 에서 질소 브릿지에 결합된  $R^7$  은, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 또는 6 내지 30 개의 C 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 특히 6 내지 24 개의 C 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (이는 상기 정의된 바와 같고, 하나

이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택된다.

- [0122] 보다 바람직한 구현예에서,  $R^3$  및  $R^6$  은, 이들이 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 포함하는 경우, 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-33), 특히 바람직하게는 (Ar-1) 내지 (Ar-10), 및 이러한 기들의 바람직한 구현예의 기로부터 선택된다. 라디칼  $R^3$  및  $R^6$  은 바람직하게는 헤테로방향족 고리 시스템을 포함하지 않는다.
- [0123] 진공 증발에 의해 가공되는 화합물의 경우, 알킬기는 바람직하게는 4 개 이하의 C 원자, 특히 바람직하게는 1 개 이하의 C 원자를 갖는다. 용액으로부터 가공되는 화합물의 경우, 10 개 이하의 C 원자를 갖는 선형, 분지형 또는 시클릭 알킬기로 치환된 화합물 또는 올리고아틸렌기, 예를 들어 오르토-, 메타-, 파라- 또는 분지형 테르페닐 또는 쿼테르페닐기로 치환된 화합물이, 또한 적합하다.
- [0124] 본 발명의 바람직한 구현예에서,  $R^9$  는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 또는 6 내지 30 개의 C 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (이는 상기 정의된 바와 같고, 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0125] 본 발명의 특히 바람직한 구현예에서,  $R^9$  는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, 1 내지 5 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 5 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기, 또는 6 내지 18 개의 C 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (이는 상기 정의된 바와 같음) 으로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0126] 본 발명의 보다 바람직한 구현예에서, 라디칼  $R^1$  내지  $R^6$  은 12 개 초과와 방향족 고리 원자를 함유하는 임의의 융합된 아틸 또는 헤테로아틸기를 함유하지 않는다.
- [0127] 본 발명의 보다 바람직한 구현예에서, 둘 이상의 인접한 라디칼  $R^1$  내지  $R^6$ , 및 인접한 라디칼  $R^1$  및  $R^8$  은, 모노- 또는 폴리시클릭 방향족 고리 시스템을 형성하지 않는다.
- [0128] 상기 언급된 바람직한 구현예가 동시에 적용되는 화학식 (1), (2) 내지 (28) 및 (6a) 내지 (28a) 의 화합물이 바람직하다. 따라서, 하기와 같은 화합물이 특히 바람직하다:
- [0129]  $Ar^S$  는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 여기서  $i=1$  또는 2 인 경우,  $Ar^S$  는 화학식 (Ar3-1) 내지 (Ar3-12), 및 화학식 (Ar3-1a) 내지 (Ar3-12a) 의 임의의 바람직한 구현예의 기로부터 선택되고, 여기서  $Ar^S$  는 기 E 에 의해  $Ar^1$  에 연결될 수 있고;
- [0130]  $Ar^1$ ,  $Ar^2$  는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-33), 및 임의의 바람직한 구현예의 기로부터 선택되는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이거나;
- [0131] 또는  $-NAr^1Ar^2$  는 화학식 (Ar1-1) 내지 (Ar1-19), 및 임의의 바람직한 구현예 중 하나의 기를 나타내거나;
- [0132] 또는  $Ar^S-NAr^1Ar^2$  는 화학식 (Ar2-1) 내지 (Ar2-9) 및 임의의 바람직한 구현예 중 하나의 기를 나타내고;
- [0133] E 는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게,  $C(R^7)_2$ , O, S 및  $NR^7$  로 이루어진 군으로부터 선택되고;
- [0134]  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^8$  은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F,  $Si(R^9)_3$ , CN, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기 또는 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시기 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는 O 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 로 대체될 수 있음), 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기  $R^1$  내지  $R^6$ , 또는  $R^1$  및  $R^8$  은, 임의로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 을 형성할 수 있고;

- [0135]  $R^7$ 은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F,  $Si(R^9)_3$ , CN, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기 또는 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬 또는 알콕시기 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는 O 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 로 대체될 수 있음), 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (이는 각각의 경우 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기  $R^7$  은 임의로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 을 형성할 수 있거나;
- [0136] 또는 화학식 (Ar1-1), (Ar1-5), (Ar1-9), (Ar1-16), (Ar1-17), (Ar1-5a), (Ar1-5b), (Ar1-9a), (Ar1-9b), (Ar1-17a), (Ar1-17b), (Ar2-1), (Ar3-8), (Ar3-8a) 및 (Ar3-8b) 에서 탄소 브릿지에 결합된  $R^7$  은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 또는 6 내지 30 개의 C 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택되고; 여기서 2 개의 기  $R^7$  은 또한 서로 함께 지방족 또는 방향족일 수 있는 고리 시스템을 형성할 수 있거나;
- [0137] 또는 화학식 (Ar1-2), (Ar1-6), (Ar1-10), (Ar1-19), (Ar1-6a), (Ar1-6b), (Ar1-10a), (Ar1-10b), (Ar2-2), (Ar3-9) 및 (Ar3-9a) 에서 질소 브릿지에 결합된  $R^7$  은, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 또는 6 내지 30 개의 C 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼  $R^9$  로 치환될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택되고;
- [0138]  $R^9$ 은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, 1 내지 10 개의 C 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 10 개의 C 원자를 갖는 분지형 또는 시클릭 알킬기 또는 6 내지 30 개의 C 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (이들은 각각 하나 이상의 라디칼  $R^{10}$  으로 치환될 수 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기  $R^9$  은 서로 함께 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 고리 시스템을 형성할 수 있고;
- [0139]  $R^{10}$ 은 H, D, F, 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 지방족 탄화수소 라디칼, 6 내지 30 개의 C 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 (여기서 하나 이상의 H 원자는 D 또는 F 로 대체될 수 있음) 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 둘 이상의 인접한 치환기  $R^{10}$  은 서로 함께 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 고리 시스템을 형성할 수 있고;
- [0140] i 는, 각각의 경우, 0, 1 또는 2 이고;
- [0141] m 은 0 또는 1, 바람직하게는 0 이고;
- [0142] o, p, r 은, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 0, 1 또는 2, 바람직하게는 0 이고;
- [0143] n, q 는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 0, 1 또는 2, 바람직하게는 0 또는 1 이고;
- [0144] s, t, u 는, 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, 0 또는 1 이고;
- [0145] 여기서,  $u+t+s \leq 2$  임.
- [0146] 상기 언급된 화합물은 또한 둘 이상의 치환 이성질체의 혼합물 형태로 존재할 수 있다.
- [0147] 본 발명의 구현예에서, 상기 언급된 바람직한 것들은 목적하는 경우 서로 조합될 수 있다.
- [0148] 화학식 (1) 의 화합물의 바람직한 구조의 예는 하기 표에 제시된 바와 같다. 상기 화합물은 기본 구조 (6a), (7a), (8a), (10a), (15a) 및 (21a) 를 기반으로 한다. 융합된 셀은, 라디칼들이 기 E 를 통해 서로 연결된 것을 의미한다.

구조	기본 구조	i (Ar <sup>S</sup> )	Ar <sup>1</sup>	Ar <sup>2</sup>
6a-1-1	6a	0	Ar-9b	Ar-2a
6a-1-2	6a	0	Ar-29b	Ar-2a
6a-1-3	6a	0	Ar-1a	Ar-2a
6a-1-4	6a	0	Ar-2a	Ar-2a
6a-1-5	6a	0	Ar-17a1	Ar-2a
6a-1-6	6a	0	Ar-12a	Ar-2a
6a-1-7	6a	0	Ar-13c	Ar-2a
6a-1-8	6a	0	Ar-2c	Ar-9b
6a-1-9	6a	0	Ar-9b	Ar-9b
6a-1-10	6a	0	Ar1-5a	
6a-1-11	6a	0	Ar-2a	Ar-2a
6a-1-12	6a	0	Ar-2c	Ar-9b
6a-1-13	6a	0	Ar-2a	Ar-1a
6a-1-14	6a	0	Ar1-14a	
6a-1-15	6a	0	Ar1-15a	
6a-1-16	6a	0	Ar1-15b	
6a-1-17	6a	0	Ar1-16	
6a-1-18	6a	0	Ar1-17a	
6a-1-19	6a	0	Ar1-18	
6a-1-20	6a	0	Ar-8b	Ar-9b
6a-1-21	6a	0	Ar-8a	Ar-9b
6a-1-22	6a	0	Ar-3e	Ar-9b
6a-1-23	6a	0	Ar-2a	Ar-2a
6a-1-24	6a	0	Ar-2a	Ar-3g
6a-1-25	6a	0	Ar-2a	Ar-15c1
6a-1-26	6a	0	Ar-9b	Ar-30a
6a-1-27	6a	0	Ar-28b	Ar-2a
6a-1-28	6a	0	Ar-1a Ar-15c1	
6a-1-29	6a	0	Ar-1a Ar-17a1	

[0149]

구조	기본 구조	i (Ar <sup>S</sup> )	Ar <sup>1</sup>	Ar <sup>2</sup>
6a-1-30	6a	0	Ar-11c	Ar-17a1
6a-1-31	6a	0	Ar-1a	Ar-30b
6a-1-32	6a	0	Ar-1a	Ar-1a
6a-1-33	6a	0	Ar-1a	Ar-13a
6a-2-1	6a	2 (Ar3-12a; Ar3-1a)	Ar-2a	Ar-2a
6a-2-2	6a	2 (Ar3-12a; Ar3-1b)	Ar-2a	Ar-2a
6a-2-3	6a	2 (Ar3-12a; Ar3-1b)	Ar-9b	Ar-2a
6a-2-4	6a	1 (Ar3-1b)	Ar-2a	Ar-2a
6a-2-5	6a	1 (Ar3-1b)	Ar-2b	Ar-2a
6a-2-6	6a	1 (Ar3-1b)	Ar-2b	Ar-2a
6a-2-7	6a	2 (Ar-1a, Ar2-7)	Ar-1a	
6a-2-8	6a	2 (Ar-1a, Ar2-7)	Ar-1a	
6a-2-9	6a	2 (Ar-1a, Ar2-7)	Ar-2c	
6a-2-10	6a	1 (Ar2-9c)		Ar-2a
6a-2-11	6a	1 (Ar2-9c)		Ar-2a
6a-2-12	6a	1 (Ar2-9c)		Ar-2b
6a-2-13	6a	1 (Ar3-1a)	Ar-2a	Ar-2a
6a-2-14	6a	1 (Ar3-1a)	Ar-2a	Ar-2a
6a-2-15	6a	1 (Ar3-1a)	Ar-2a	Ar-2b
6a-2-16	6a	1 (Ar3-1a)	Ar-2a	Ar-17a2
6a-2-17	6a	1 (Ar3-1a)	Ar-2a	Ar-17a3
6a-2-18	6a	1 (Ar3-1a)	Ar-2a	Ar-17c2
6a-2-19	6a	1 (Ar3-1a)	Ar-2a	Ar-9b
6a-2-20	6a	1 (Ar3-1a)	Ar-2b	Ar-9b
6a-2-21	6a	1 (Ar3-1a)	Ar-2b	Ar-10b
6a-2-22	6a	2 (Ar3-1b, Ar2-7)		Ar-1a
6a-2-23	6a	2 (Ar3-1b, Ar2-7)		Ar-2a
6a-2-24	6a	2 (Ar3-1b, Ar2-7)		Ar-1a

[0150]

구조	기본 구조	i (Ar <sup>S</sup> )	Ar <sup>1</sup>	Ar <sup>2</sup>
7a-1-1	7a	0	Ar-2a	Ar-2a
7a-1-2	7a	0	Ar-9b	Ar-2c
8a-1-1	8a	0	Ar1-16 Ar1-16	
8a-1-2	8a	0	Ar1-16 Ar1-17a	
8a-1-3	8a	0	Ar1-16 Ar1-14a	
8a-1-4	8a	0	Ar1-14a Ar1-14a	
8a-1-5	8a	0	Ar1-14a Ar1-13	
8a-1-6	8a	0	Ar1-14b Ar1-14b	
10a-1-1	10a	0	Ar-2a	Ar-2a
10a-2-1	10a	1 (Ar3-1a)	Ar-2a	Ar-9b
10a-2-2	10a	1 (Ar3-1a)	Ar-2b	Ar-9b
10a-2-3	10a	1 (Ar3-1b)	Ar-4a	Ar-9b
10a-2-4	10a	1 (Ar3-1a)	Ar-2a	Ar-2a
10a-2-5	10a	1 (Ar3-1a)	Ar-1a	Ar-2a
10a-2-6	10a	1 (Ar3-1a)	Ar-2b	Ar-2a
10a-2-7	10a	1 (Ar3-1b)	Ar-2a	Ar-2a
10a-2-8	10a	1 (Ar3-1b)	Ar-2a	Ar-2a
10a-2-9	10a	1 (Ar3-1b)	Ar-2a	Ar-3a
10a-2-10	10a	2 (Ar3-1b, Ar2-7)		Ar-1a
10a-2-11	10a	2 (Ar3-1b, Ar2-9c)		Ar-1a
15a-1-1	15a	0	Ar-2a	Ar-2a
15a-1-2	15a	0	Ar-2a	Ar-2a
15a-2-1	15a	1 (Ar3-1a)	Ar-2a	Ar-2a
15a-2-2	15a	1 (Ar3-1a)	Ar-9b	Ar-2a
15a-2-3	15a	1 (Ar3-1a)	Ar-1a	Ar-2a

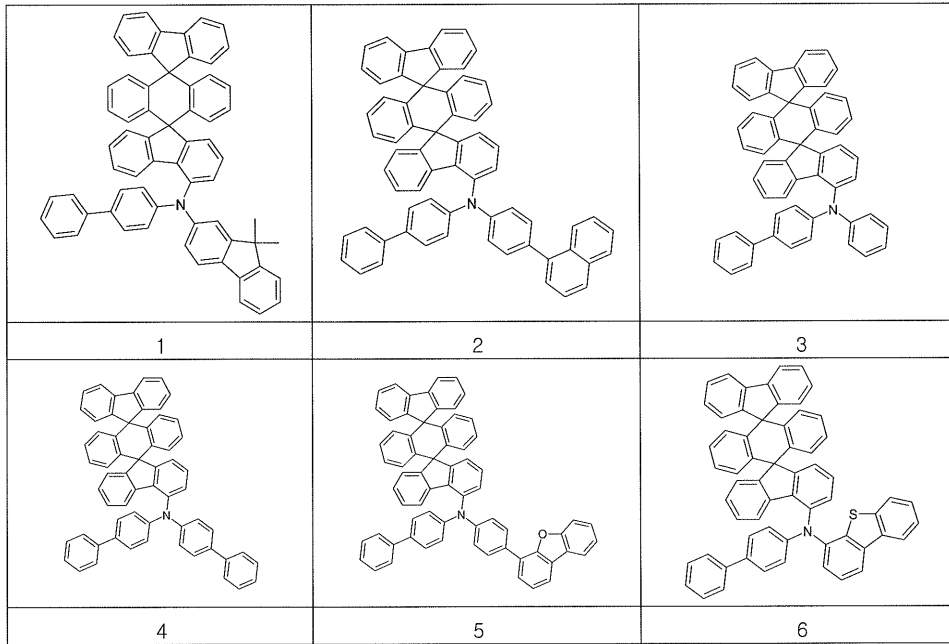
[0151]

구조	기본 구조	i (Ar <sup>S</sup> )	Ar <sup>1</sup>	Ar <sup>2</sup>
15a-2-4	15a	1 (Ar3-1b)	Ar-2a	Ar-2a
15a-2-5	15a	1 (Ar3-1b)	Ar-2a	Ar-9b
15a-2-6	15a	1 (Ar3-1b)	Ar-2a	Ar-2b
15a-2-7	15a	2 (Ar3-1a, Ar2-7)		Ar-1a
15a-2-8	15a	2 (Ar3-1b, Ar2-7)		Ar-1a
15a-2-9	15a	2 (Ar3-1b, Ar2-7)		Ar-2b
21a-1-1	21a	0	Ar-2a	Ar-2a
21a-1-2	21a	0	Ar-2c	Ar-9b
21a-1-3	21a	0	Ar-17a1	Ar-2a
21a-1-4	21a	0	Ar-2a	Ar-2a

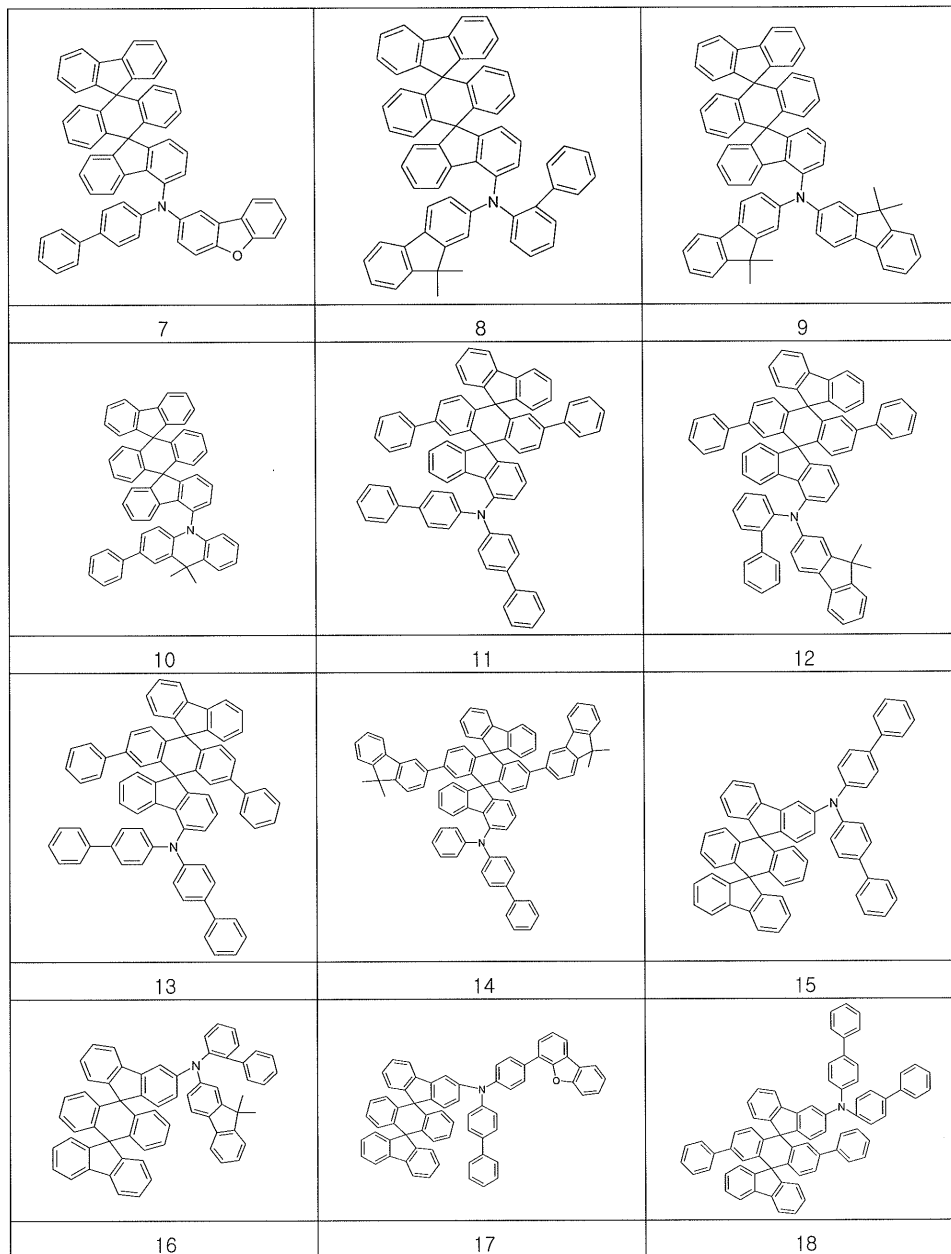
[0152]

[0153] 여기서, 화학식에서 n 및 q 는 0 또는 1 의 값을 취할 수 있다. 화학식에서 라디칼 R<sup>3</sup> 및 R<sup>6</sup> 은 바람직하게는 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-33) 의 기, 특히 바람직하게는 화학식 (Ar-1) 내지 (Ar-10) 의 기로부터 선택된다.

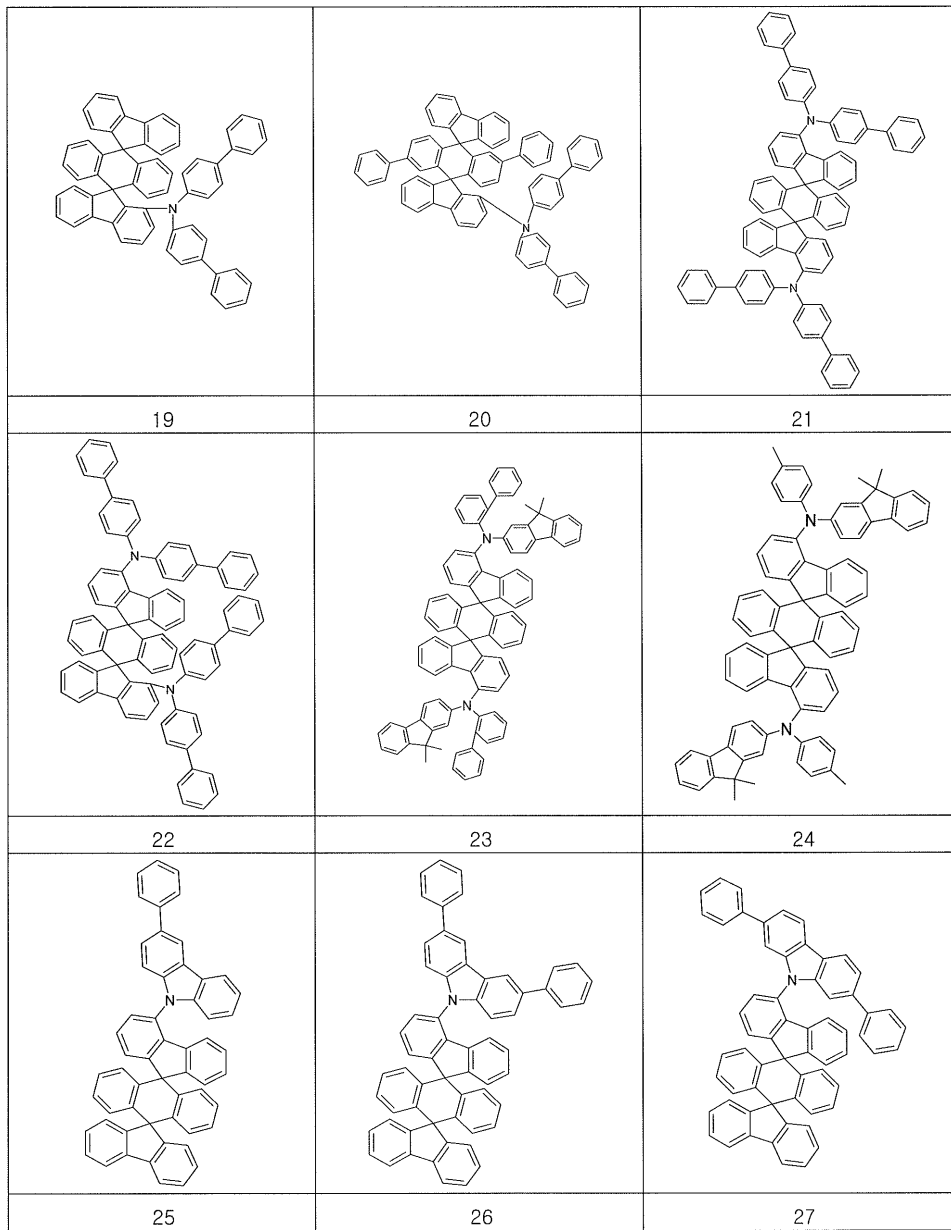
[0154] 상기 제시된 구현예에 따른 바람직한 화합물, 또는 바람직하게는 전자 소자에 이용될 수 있는 화합물의 예는, 하기 구조 (1) 내지 (98) 의 화합물이다:



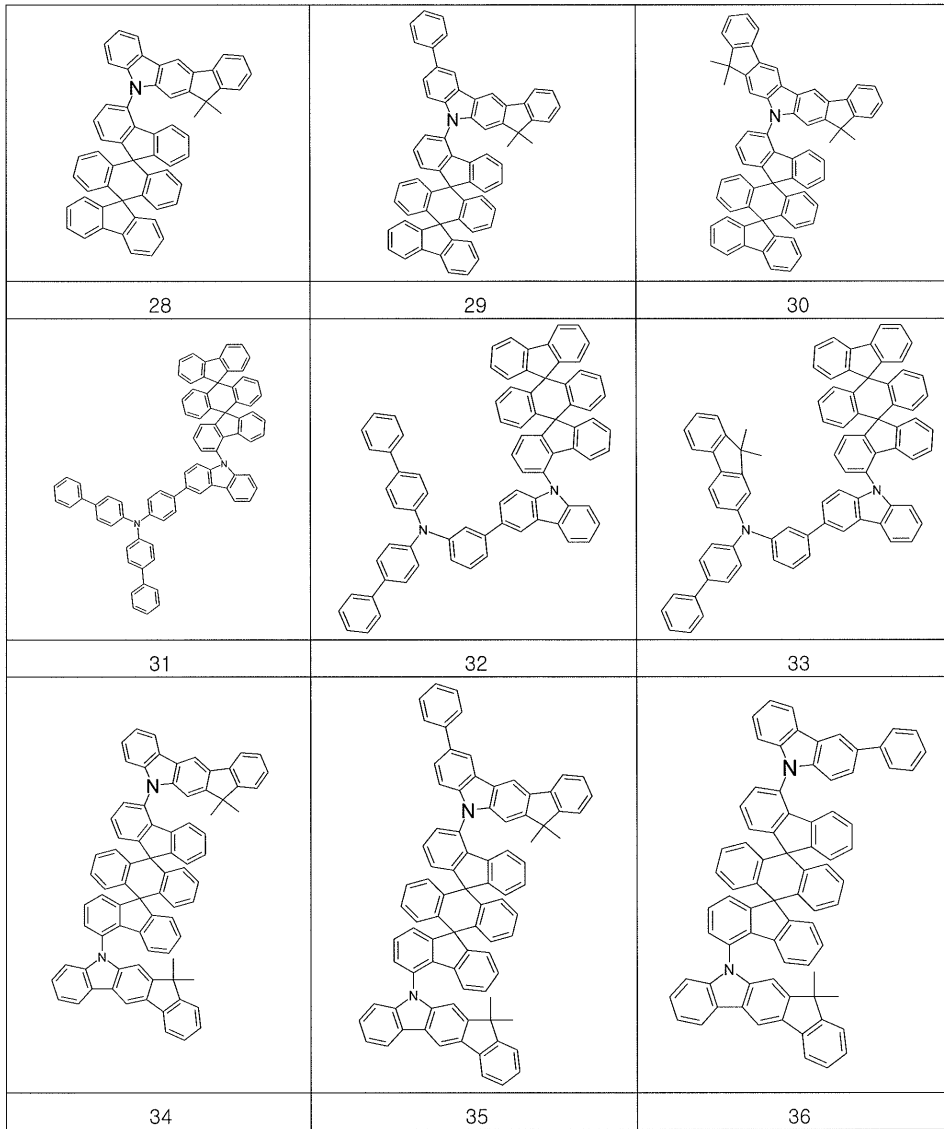
[0155]



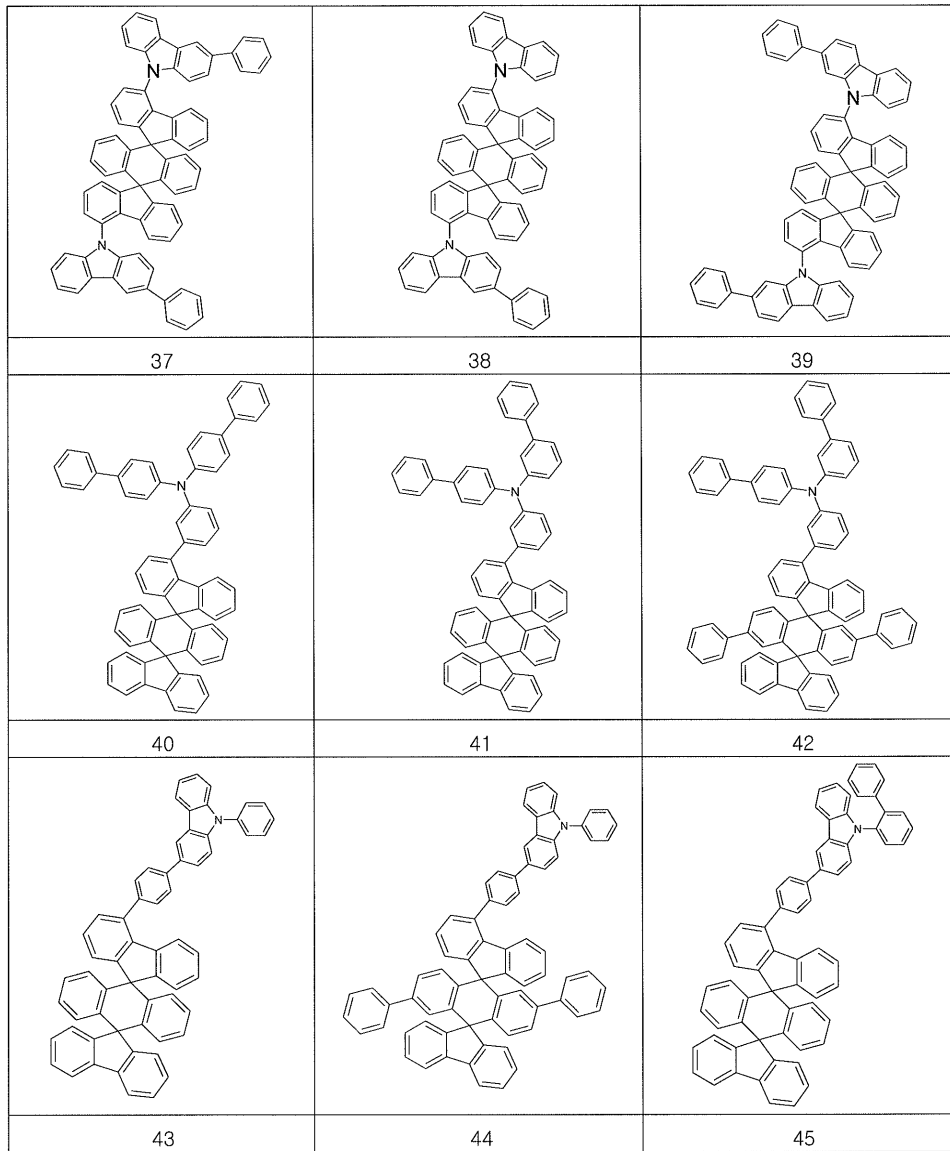
[0156]



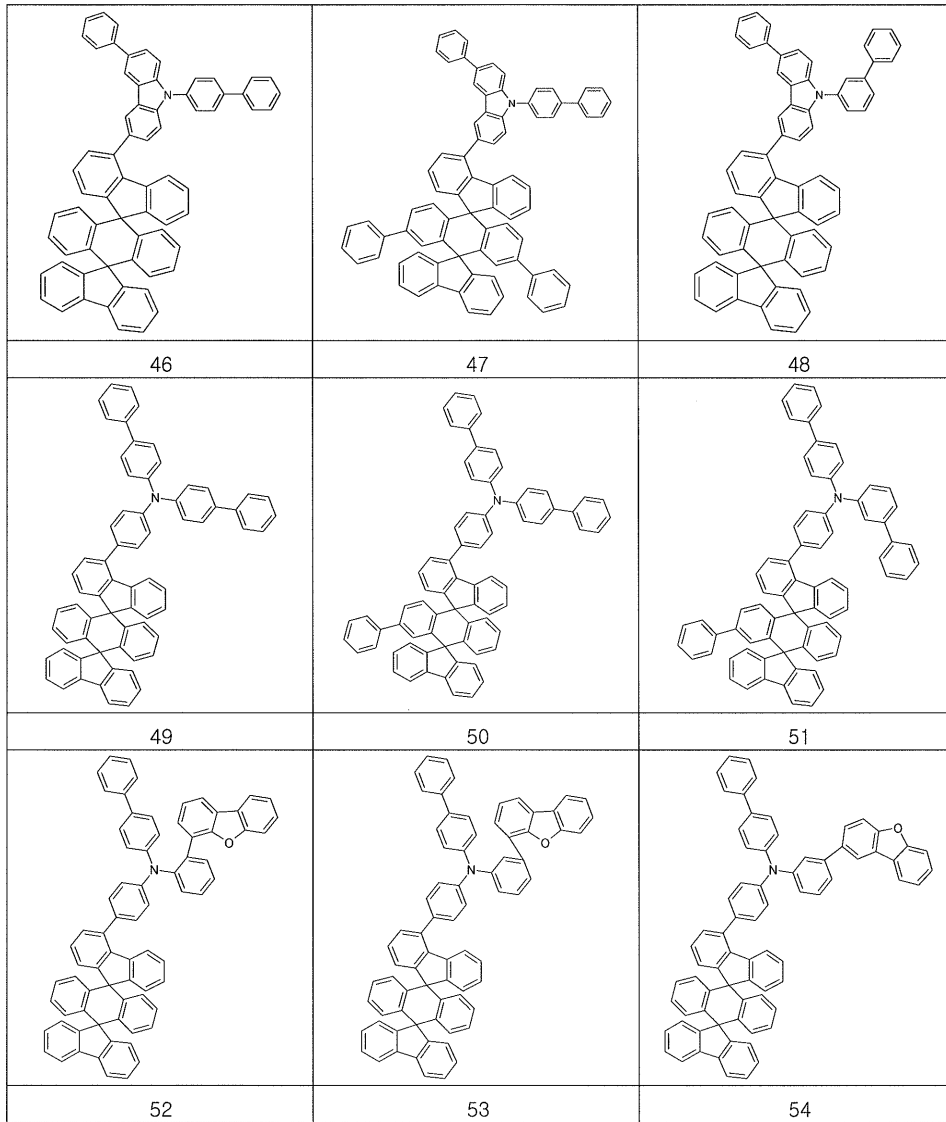
[0157]



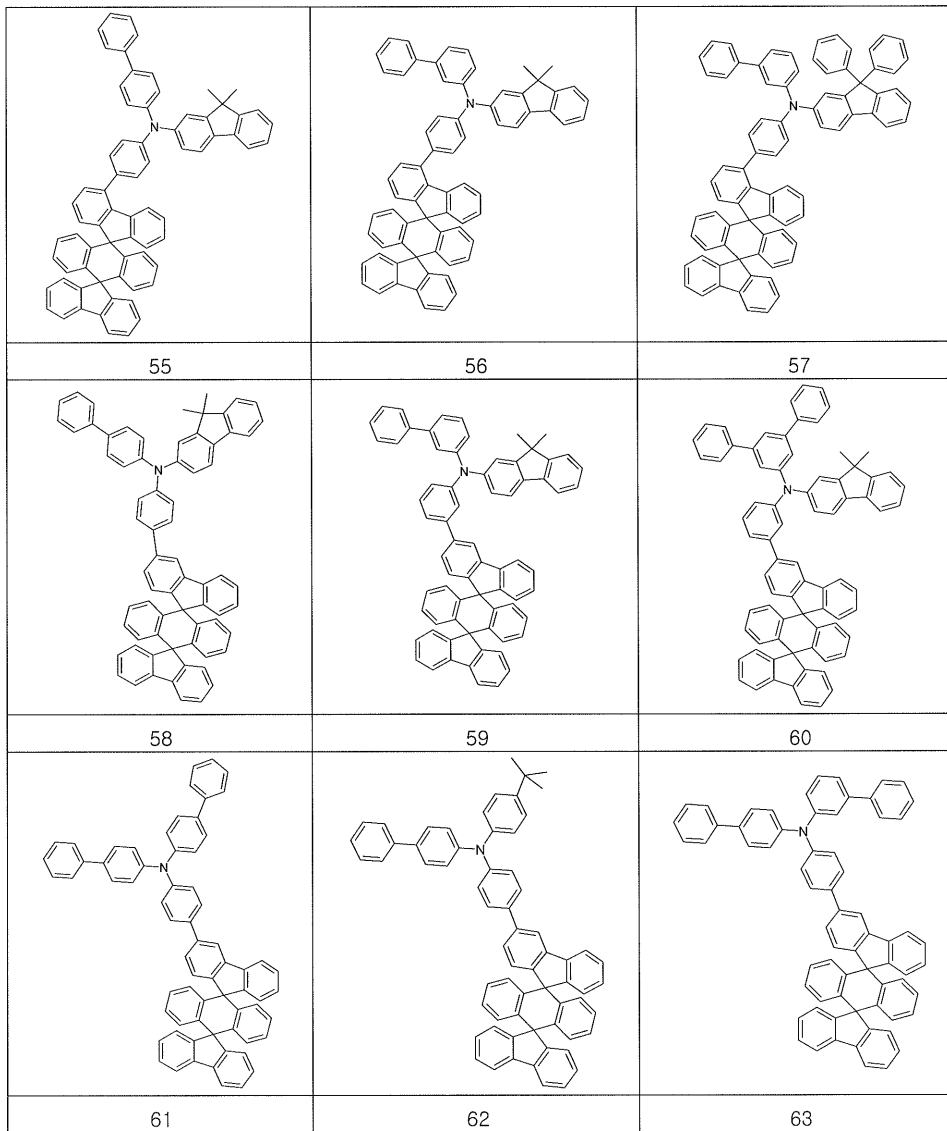
[0158]



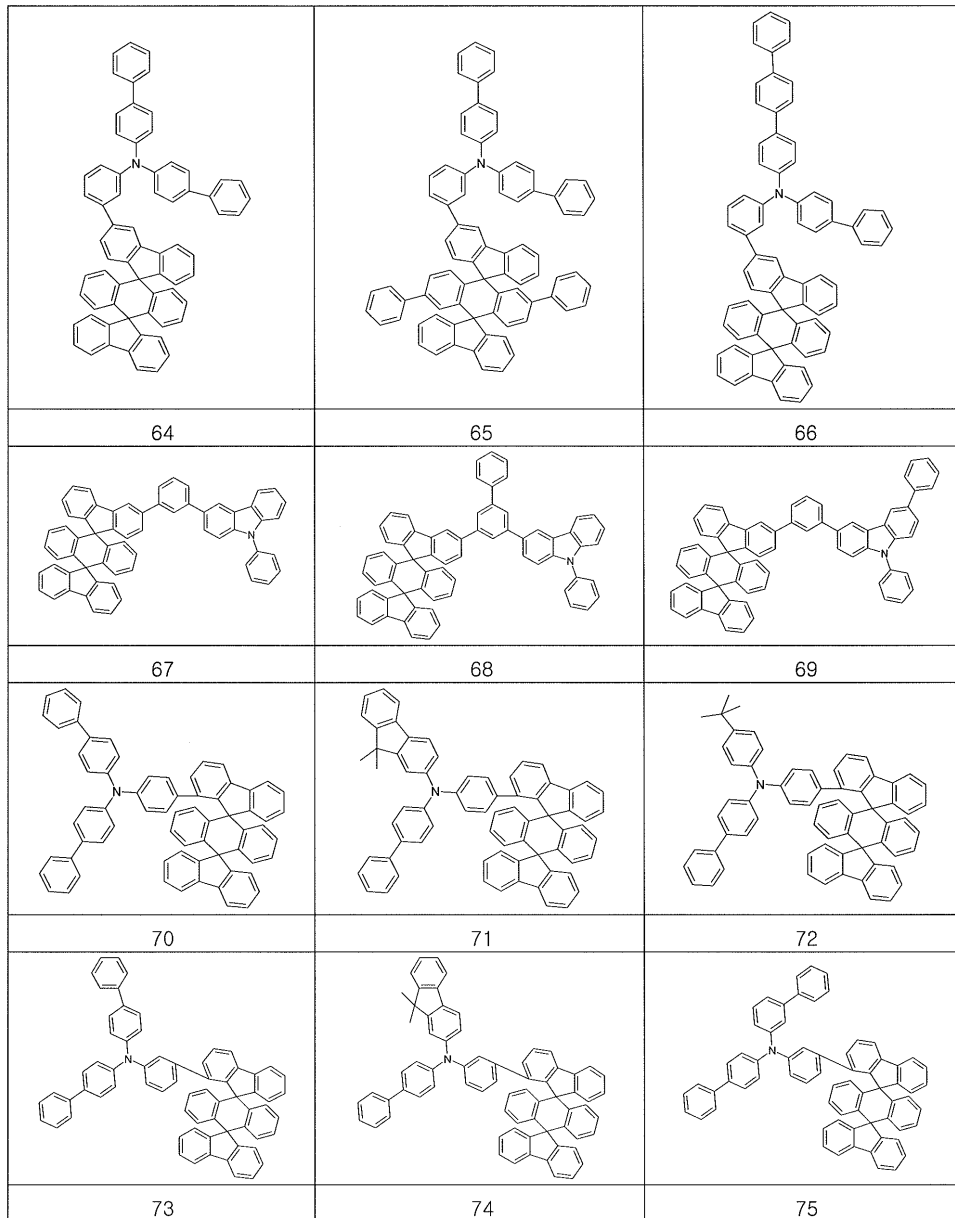
[0159]



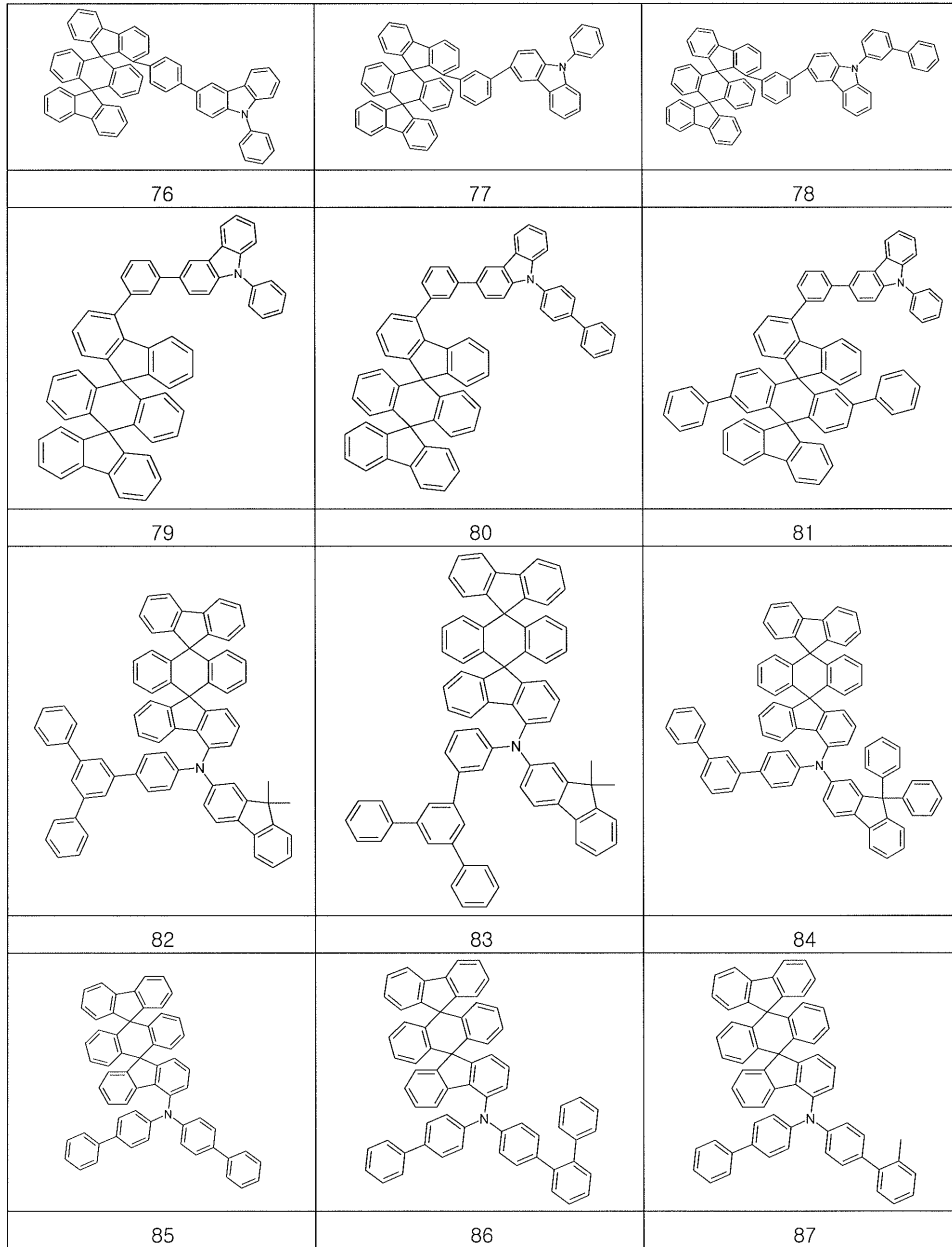
[0160]



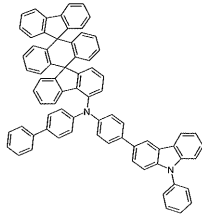
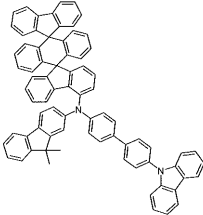
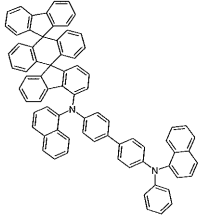
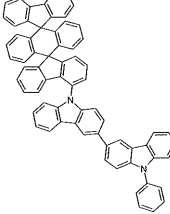
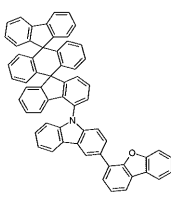
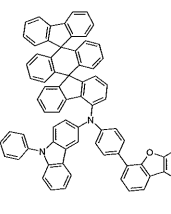
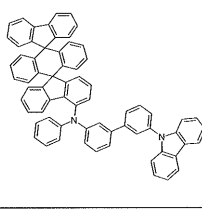
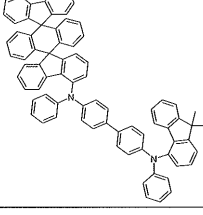
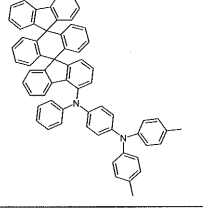
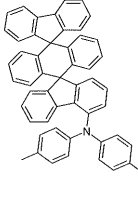
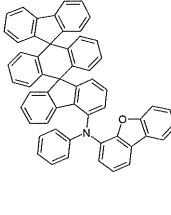
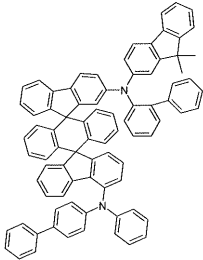
[0161]



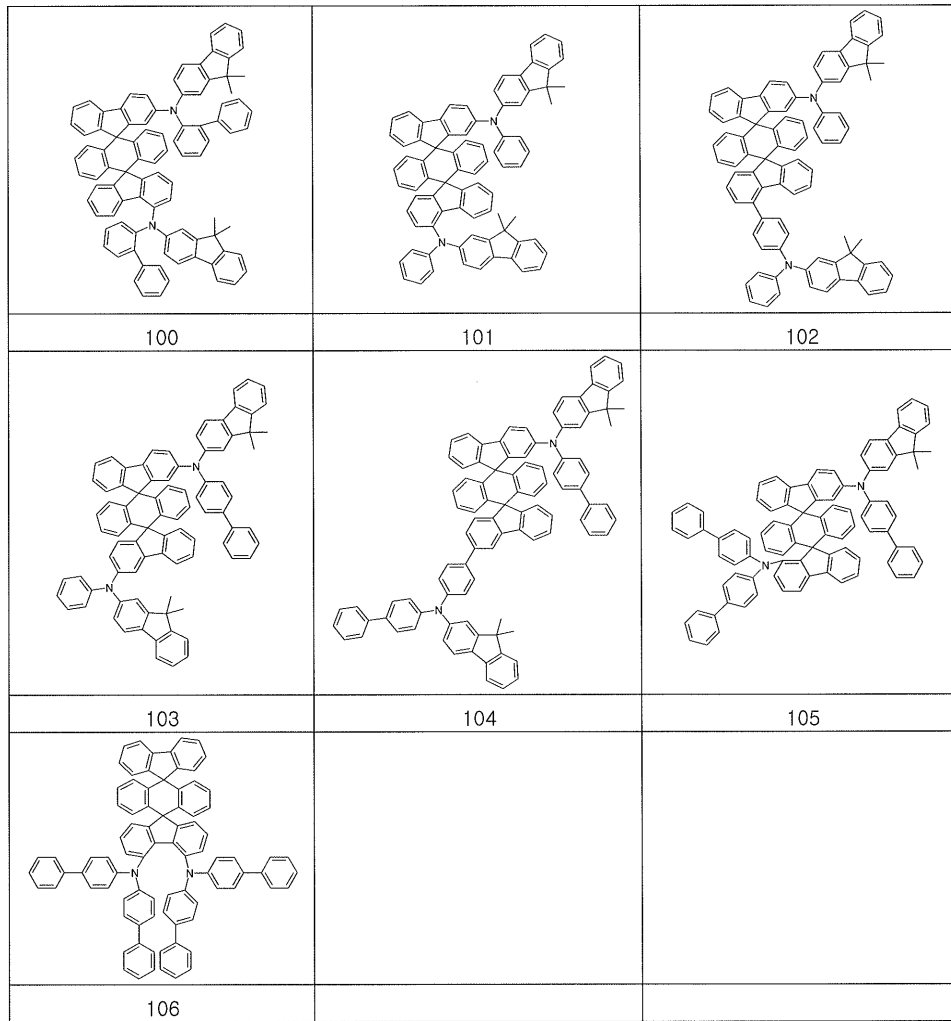
[0162]



[0163]

		
88	89	90
		
91	92	93
		
94	95	96
		
97	98	99

[0164]

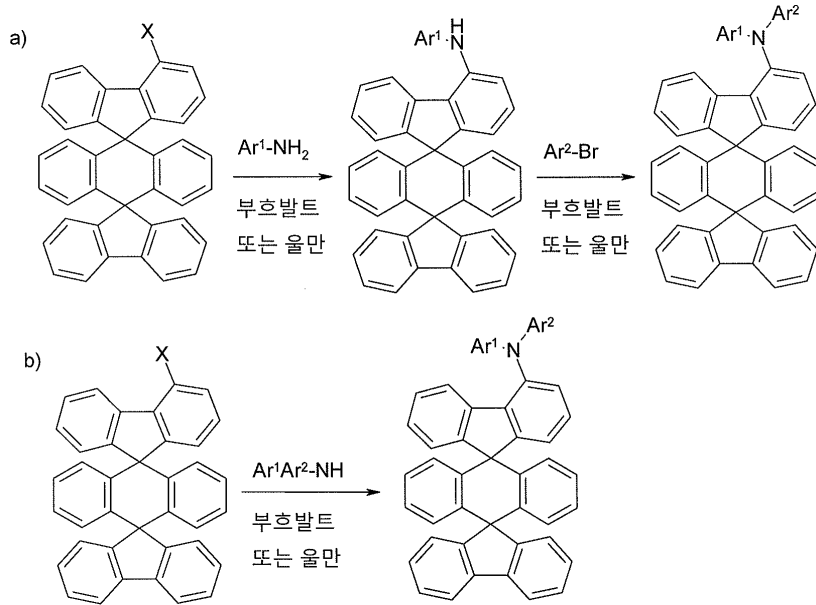


[0165]

[0166]

본 발명에 따른 화합물의 합성은 선행 기술에 공지된 방법 및 반응 유형, 예를 들어 브롬화, 울만 (Ullmann) 아릴화, 프리델-크래프트 (Friedel-Craft) 반응, 팔라듐-촉매화 분자내 C-H 아릴화, 부흐발트 (Buchwald) 커플링 및 스즈키 (Suzuki) 커플링 및 그리냐드 (Grignard) 반응에 의해 수행될 수 있다. 특히, 상기 화합물은, 반응식 1 에 도시된 바와 같이, 해당 할로젠-치환 기본 구조로부터 아미노기의 도입에 의해 합성될 수 있다. 여기서, 반응식 1 a) 에 제시된 바와 같이, 우선 1차 아민에 치환기  $Ar^1$  을 도입하고, 추가 커플링 반응에서 기  $Ar^2$  를 도입할 수 있다. 마찬가지로, 반응식 1 b) 에 제시된 바와 같이, 2차 아민  $Ar^1Ar^2NH$  을 1 단계로 바로 도입할 수 있다. 기본 구조 상에의 적합한 기 X 는 반응성 이탈기, 예를 들어, Cl, Br, I, 트리플레이트 또는 토실레이트이다. 적합한 커플링 반응은, 예를 들어, 하트비그-부흐발트 (Hartwig-Buchwald) 또는 울만 커플링 반응이다. 이러한 커플링 반응에 사용될 수 있는 반응 조건은 유기 합성 분야의 당업자에게 공지되어 있다.

반응식 1:



[0167]

[0168] i 가 1 또는 2 인 화합물의 경우, 기  $Ar^S-NAr^1-Ar^2$  는 마찬가지로 금속-촉매화 커플링 반응을 통해, 예를 들어 스즈키 커플링 또는 스틸 (Stille) 커플링을 통해 도입될 수 있다.

[0169] 따라서, 본 발명은 나아가 화학식 (1) 의 화합물의 제조 방법으로서, 1-, 3- 또는 4-위치에서 반응성 이탈기로 치환된 디스피로[플루오렌-9,9'-안트라센-10',9''-플루오렌] 유도체를,

[0170] a) 1차 아민에 커플링시키고, 이어서 반응성 이탈기로 치환된 추가의 방향족기에 커플링시키거나, 또는

[0171] b) 2차 아민에 커플링시키거나, 또는

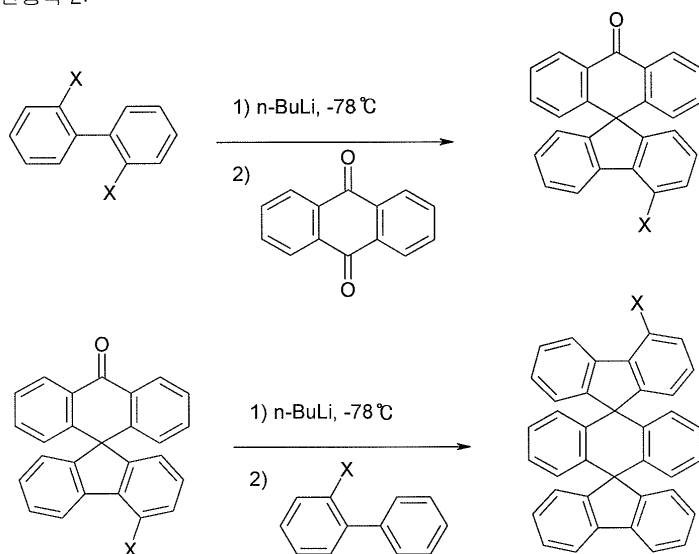
[0172] c) 트리아릴아민 유도체에 커플링시키는 방법에 관한 것이다.

[0173] 여기서 반응성 이탈기는 바람직하게는 Cl, Br, I, 트리플레이트 또는 토실레이트로부터 선택되거나 또는, 스즈키 커플링의 경우, 또한 보론산, 또는 보론산 유도체, 특히 보론산 에스테르로부터 선택된다.

[0174] 커플링 반응은 바람직하게는 하트비그-부호발트 커플링, 울만 커플링 또는 스즈키 커플링으로부터 선택된다.

[0175] 디스피로[플루오렌-9,9'-안트라센-10',9''-플루오렌] 골격은 바람직하게는 전형적인 스피로 합성과 유사하게 구축된다.

반응식 2:



[0176]

- [0177] 여기서, 기본 구조 상의 상이한 치환 패턴은 해당 치환 바이페닐의 사용을 통해 수득될 수 있다.
- [0178] 1 개 초과와 치환기를 갖는 기본 구조의 합성에서, 특히 다중치환 바이페닐을 사용하는 경우, 스피로탄소의 형성 중 치환 이성질체가 형성될 수 있다. 상기 화합물이 단리되지 않은 경우, 이들은 또한 혼합물 형태로 이용될 수 있다.
- [0179] 상기 제시된 합성 방법은 예시적인 특징으로, 이는, 본 발명에 따른 화합물의 특정 구현예의 합성에 유리한 경우, 유기 합성 분야의 당업자에 의해 적합한 방식으로 변형될 수 있다.
- [0180] 상기 기재된 본 발명에 따른 화합물, 특히 반응성 이탈기, 예컨대 브롬, 요오드, 염소, 보론산 또는 보론산 에스테르로 치환된 화합물은, 해당 올리고머, 덴드리머 또는 폴리머의 제조를 위한 모노머로서 사용될 수 있다. 적합한 반응성 이탈기는, 예를 들어, 브롬, 요오드, 염소, 보론산, 보론산 에스테르, 아민, 말단 C-C 이중 결합 또는 C-C 삼중 결합을 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 옥시란, 옥세탄, 고리첨가 반응, 예를 들어 1,3-양극성 고리첨가 반응을 거치는 기, 예를 들어, 디엔 또는 아지드, 카르복실산 유도체, 알코올 및 실란이다.
- [0181] 따라서, 본 발명은 나아가 하나 이상의 화학식 (1) 의 화합물을 포함하는 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머에 관한 것으로, 여기서 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머에의 결합(들)은 화학식 (1) 의 임의의 목적하는 자유 위치에 편재화될 수 있다. 본 발명에 따른 화합물의 연결에 따라, 상기 화합물은 올리고머 또는 폴리머의 측쇄의 일부 또는 주쇄의 일부가 된다.
- [0182] 본 발명의 의미에서 올리고머는 3 개 이상의 모노머 단위로부터 구축된 화합물을 의미하는 것으로 의도된다. 본 발명의 의미에서 폴리머는 10 개 이상의 모노머 단위로부터 구축된 화합물을 의미하는 것으로 의도된다.
- [0183] 본 발명에 따른 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머는 공액되거나, 부분적으로 공액되거나 또는 비(非)공액될 수 있다. 본 발명에 따른 올리고머 또는 폴리머는 선형, 분지형 또는 수지형 (dendritic) 일 수 있다.
- [0184] 선형으로 연결된 구조에서, 화학식 (1) 의 단위는 서로 직접적으로 연결되거나 또는 서로 2가 기, 예를 들어 치환 또는 미치환 알킬렌기를 통해, 헤테로원자를 통해 또는 2가 방향족 또는 헤테로방향족기를 통해 연결될 수 있다.
- [0185] 분지형 및 수지형 구조에서, 예를 들어, 화학식 (1) 의 3 개 이상의 단위는 3가 또는 다가 기, 예를 들어 3가 또는 다가 방향족 또는 헤테로방향족기를 통해 연결되어, 분지형 또는 수지형 올리고머 또는 폴리머를 형성할 수 있다.
- [0186] 올리고머, 덴드리머 및 폴리머에서의 화학식 (1) 의 반복 단위에 대하여, 본 발명에 따른 화합물에 대하여 상기 기재된 바와 같은 바람직한 것들이 동일하게 적용된다.
- [0187] 올리고머 또는 폴리머의 제조를 위하여, 본 발명에 따른 모노머는 추가의 모노머와 동중중합 또는 공중합된다. 적합하고 바람직한 공모노머는 플루오렌 (예를 들어 EP 842208 또는 WO 2000/22026 에 따름), 스피로바이폴루오렌 (예를 들어 EP 707020, EP 894107 또는 WO 2006/061181 에 따름), 파라-페닐렌 (예를 들어 WO 1992/18552 에 따름), 카르바졸 (예를 들어 WO 2004/070772 또는 WO 2004/113468 에 따름), 티오펜 (예를 들어 EP 1028136 에 따름), 디히드로페난트렌 (예를 들어 WO 2005/014689 또는 WO 2007/006383 에 따름), 시스- 및 트랜스-인테노플루오렌 (예를 들어 WO 2004/041901 또는 WO 2004/113412 에 따름), 케톤 (예를 들어 WO 2005/040302 에 따름), 페난트렌 (예를 들어 WO 2005/104264 또는 WO 2007/017066 에 따름) 또는, 또한 다수의 상기 단위로부터 선택된다. 상기 폴리머, 올리고머 및 덴드리머는 통상적으로 또한 추가의 단위, 예를 들어 발광 (형광 또는 인광) 단위, 예컨대 비닐트리아릴아민 (예를 들어 WO 2007/068325 에 따름) 또는 인광 금속 착물 (예를 들어 WO 2006/003000 에 따름), 및/또는 전하-수송 단위, 특히 트리아릴아민을 기반으로 하는 단위들을 함유한다.
- [0188] 본 발명에 따른 폴리머, 올리고머 및 덴드리머는 유리한 특성, 특히 긴 수명, 높은 효율 및 우수한 색좌표를 갖는다.
- [0189] 본 발명에 따른 폴리머 및 올리고머는 일반적으로 하나 이상의 유형의 모노머의 중합에 의해 제조되며, 이 중 하나 이상의 모노머는 폴리머에서 화학식 (1) 의 반복 단위가 된다. 적합한 중합 반응은 당업자에게 공지되어 있고, 문헌에 기재되어 있다. C-C 또는 C-N 연결을 유도하는 특히 적합하고 바람직한 중합 반응은 하기와 같다:
- [0190] (A) 스즈키 (SUZUKI) 중합;

- [0191] (B) 야마모토 (YAMAMOTO) 중합;
- [0192] (C) 스틸 (STILLE) 중합; 및
- [0193] (D) 하트비그-부흐발트 (HARTWIG-BUCHWALD) 중합.
- [0194] 중합이 상기 방법에 의해 수행될 수 있는 방법 및 그 후 폴리머가 반응 매질로부터 분리 및 정제될 수 있는 방법은 당업자에게 공지되어 있고, 문헌, 예를 들어 WO 2003/048225, WO 2004/037887 및 WO 2004/037887 에 상세하게 기재되어 있다.
- [0195] 따라서, 본 발명은 또한 스키 중합, 야마모토 중합, 스틸 중합 또는 하트비그-부흐발트 중합에 의해 제조되는 것을 특징으로 하는, 본 발명에 따른 폴리머, 올리고머 및 덴드리머의 제조 방법에 관한 것이다. 본 발명에 따른 덴드리머는 당업자에게 공지된 방법에 의해 또는 이와 유사하게 제조될 수 있다. 적합한 방법은 문헌, 예를 들어 [Frechet, Jean M. J.; Hawker, Craig J., "Hyper-branched polyphenylene and hyperbranched polyesters: new soluble, three-dimensional, reactive polymers", *Reactive & Functional Polymers* (1995), 26(1-3), 127-36]; [Janssen, H. M.; Meijer, E. W., "The synthesis and characterization of dendritic molecules", *Materials Science and Technology* (1999), 20 (Synthesis of Polymer), 403-458]; [Tomalia, Donald A., "Dendrimer molecules", *Scientific American* (1995), 272(5), 62-6]; WO 2002/067343 A1 및 WO 2005/026144 A1 에 기재되어 있다.
- [0196] 액체상으로부터, 예를 들어 스핀 코팅 또는 프린팅 공정에 의한 본 발명에 따른 화합물의 가공을 위하여, 본 발명에 따른 화합물의 제형이 요구된다. 이러한 제형은, 예를 들어 용액, 분산액 또는 에멀전일 수 있다. 이러한 목적을 위하여 둘 이상의 용매의 혼합물을 사용하는 것이 바람직할 수 있다. 적합하고 바람직한 용매는, 예를 들어 톨루엔, 아니솔, *o*-, *m*- 또는 *p*-자일렌, 메틸 벤조에이트, 메시틸렌, 테트라린, 베라트룰, THF, 메틸-THF, THP, 클로로벤젠, 디옥산, 페녹시톨루엔, 특히 3-페녹시톨루엔, (-)-펜톤 (fenchone), 1,2,3,5-테트라메틸벤젠, 1,2,4,5-테트라메틸벤젠, 1-메틸나프탈렌, 2-메틸벤조티아졸, 2-페녹시에탄올, 2-피롤리디논, 3-메틸아니솔, 4-메틸아니솔, 3,4-디메틸아니솔, 3,5-디메틸아니솔, 아세토페논,  $\alpha$ -테르피네올, 벤조티아졸, 부틸 벤조에이트, 큐멘, 시클로헥산올, 시클로헥사논, 시클로헥실벤젠, 데칼린, 도데실벤젠, 에틸 벤조에이트, 인단, 메틸 벤조에이트, NMP, *p*-시멘, 페넨톨, 1,4-디이소프로필벤젠, 디벤질 에테르, 디에틸렌 글리콜 부틸 메틸 에테르, 트리에틸렌 글리콜 부틸 메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디부틸 에테르, 트리에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르, 트리프로필렌 글리콜 디메틸 에테르, 테트라에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 2-이소프로필나프탈렌, 펜틸벤젠, 헥실벤젠, 헵틸벤젠, 옥틸벤젠, 1,1-비스(3,4-디메틸페닐)에탄 또는 이러한 용매의 혼합물이다.
- [0197] 따라서, 본 발명은 나아가 하나 이상의 화학식 (1) 의 화합물 또는 하나 이상의 화학식 (1) 의 단위를 함유하는 하나 이상의 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머 및 하나 이상의 용매, 바람직하게는 유기 용매를 포함하는 제형, 특히 용액, 분산액 또는 에멀전에 관한 것이다. 이러한 유형의 용액의 제조 방법은 당업자에게 공지되어 있고, 예를 들어 WO 2002/072714, WO 2003/019694 및 상기 문헌에 인용된 문헌에 기재되어 있다.
- [0198] 본 발명에 따른 화합물은 전자 소자에 사용하기에 적합하다. 여기서, 전자 소자는 하나 이상의 유기 화합물을 포함하는 하나 이상의 층을 포함하는 소자를 의미하는 것으로 의도된다. 하지만, 상기 성분은 또한 무기 물질, 또는 또한 무기 물질로부터 전적으로 구축된 층을 포함할 수 있다.
- [0199] 따라서, 본 발명은 나아가 전자 소자에서의 본 발명에 따른 화합물의 용도 및 하나 이상의 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 전자 소자 그 자체에 관한 것이다. 여기서 전자 소자는 바람직하게는 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 광검출기, 유기 광수용체, 유기 전계-켄치 소자 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-laser) 및 특히 바람직하게는 유기 전계발광 소자 (OLED) 로 이루어진 군으로부터 선택된다. 특히 바람직한 것은, 애노드, 캐소드 및 하나 이상의 발광층을 포함하는 유기 전계발광 소자로서, 발광층, 정공 수송층 또는 또 다른 층일 수 있는 하나 이상의 유기층이, 하나 이상의 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 소자이다.
- [0200] 유기 전계발광 소자 및 발광 전기화학 전지는 각종 적용, 예를 들어 단색 또는 다색 디스플레이, 조명 적용 또는 의료적 및/또는 미용적 적용, 예를 들어, 광선요법에 이용될 수 있다
- [0201] 캐소드, 애노드 및 발광층 이외에, 유기 전계발광 소자는 또한 추가 층을 포함할 수 있다. 이는, 예를

들어, 각각의 경우, 하나 이상의 정공-주입층, 정공-수송층, 정공-차단층, 전자-수송층, 전자-주입층, 전자-차단층, 여기자-차단층, 중간층, 전하-생성층 (IDMC 2003, Taiwan; Session 21 OLED (5), T. Matsumoto, T. Nakada, J. Endo, K. Mori, N. Kawamura, A. Yokoi, J. Kido, *Multiphoton Organic EL Device Having Charge Generation Layer*) 및/또는 유기 또는 무기 p/n 접합으로부터 선택된다. 하지만, 각각의 이러한 층이 반드시 존재해야 할 필요는 없으며, 층의 선택은 항상 사용되는 화합물, 및 특히 또한 상기 전계발광 소자가 형광 또는 인광인지 여부에 따라 달라진다는 것에 유의해야 한다.

[0202] 유기 전계발광 소자는 또한 다수의 발광층을 포함할 수 있다. 이러한 경우, 이러한 발광층은 특히 바람직하게는 종합적으로 백색 발광을 초래하도록 전체적으로 380 nm 내지 750 nm 에서 다수의 발광 최대값을 갖고; 즉 형광 또는 인광일 수 있고 청색, 황색, 주황색 또는 적색 광을 발광하는 각종 발광 화합물이 발광층에 사용된다. 3-층 시스템, 즉 3 개의 발광층을 갖는 시스템이 특히 바람직하며, 여기서 이러한 층들 중 하나 이상은 하나 이상의 본 발명에 따른 화합물을 포함하고, 3 개의 층은 청색, 녹색 및 주황색 또는 적색 발광을 나타낸다 (기본 구조에 대하여, 예를 들어 WO 2005/011013 참조). 본 발명에 따른 화합물은 대안적으로 및/또는 부가적으로 또한 정공-수송층 및/또는 중간층에 존재할 수 있다. 백색 광의 생성을 위하여, 색상을 발광하는 다수의 발광체 화합물보다, 넓은 파장 범위에서 발광하는 개별적으로 사용된 발광체 화합물이 또한 적합할 수 있다는 점에 유의해야 한다. 여기서, 모든 발광층이 형광이거나, 또는 모든 발광층이 인광이거나, 또는 하나 이상의 발광층이 형광이고 하나 이상의 다른 층이 인광일 수 있다.

[0203] 상기 제시된 구현예에 따른 본 발명에 따른 화합물은 정확한 구조에 따라 각종 층에 이용될 수 있다. 정공-수송 또는 정공-주입 또는 여기자-차단층에서 정공-수송 물질로서 또는 형광 또는 인광 발광체, 특히 인광 발광체용 매트릭스 물질로서 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예의 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 상기 제시된 바람직한 구현예는 또한 전자 소자에서의 상기 물질의 용도에도 적용된다.

[0204] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예의 화합물은 정공-수송 또는 정공-주입층에서 정공-수송 또는 정공-주입 물질로서 이용된다. 여기서 발광층은 형광 또는 인광일 수 있다. 본 발명의 의미에서 정공-주입층은 애노드에 바로 인접한 층이다. 본 발명의 의미에서 정공-수송층은 정공-주입층과 발광층 사이에 위치한 층이다. 정공-수송층은 발광층에 바로 인접해 있을 수 있다. 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예의 화합물이 정공-수송 물질 또는 정공-주입 물질로서 사용되는 경우, 이는 전자-수용체 화합물, 예를 들어 F4-TCNQ 또는 EP 1476881 또는 EP 1596445 에 기재된 화합물로 도핑되는 것이 바람직할 수 있다.

[0205] 본 발명의 보다 바람직한 구현예에서, 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예의 화합물은 US 2007/0092755 에 기재된 바와 같이, 헥사아자트리페닐렌 유도체와 조합으로 정공-수송 물질로서 사용된다. 여기서, 헥사아자트리페닐렌 유도체는 특히 바람직하게는 개별적인 층으로 이용된다.

[0206] 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예의 화합물이 정공-수송층에서 정공-수송 물질로서 이용되는 경우, 상기 화합물은 정공-수송층에 순수한 물질로서, 즉 100% 의 비율로 이용될 수 있거나, 또는 정공-수송층에 하나 이상 추가 화합물과의 조합으로 이용될 수 있다.

[0207] 본 발명의 보다 더욱 바람직한 구현예에서, 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예의 화합물은, 전자-차단층에 이용된다. 전자-차단층은 애노드 측 발광층에 바로 인접한 층을 의미하는 것으로 의도된다.

[0208] 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예의 화합물을 정공-수송 또는 전자-차단층에서 사용하는 것이 특히 바람직하다.

[0209] 본 발명의 보다 바람직한 구현예에서, 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예의 화합물은, 발광층에서 형광 또는 인광 화합물, 특히 인광 화합물용 매트릭스 물질로서 이용된다. 여기서 유기 전계발광 소자는 하나의 발광층을 포함하거나, 또는 다수의 발광층을 포함할 수 있으며, 여기서 하나 이상의 발광층은 매트릭스 물질로서 하나 이상의 본 발명에 따른 화합물을 포함한다.

[0210] 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예의 화합물이, 발광층에서 발광 화합물용 매트릭스 물질로서 이용되는 경우, 이는 바람직하게는 하나 이상의 인광 물질 (삼중항 발광체) 과 조합으로 이용된다. 본 발명의 의미에서 인광은 스핀 다중도 > 1 을 갖는 여기된 상태로부터, 특히 여기된 삼중항 상태로부터의 발광을 의미하는 것으로 의도된다. 본 출원의 목적을 위하여, 전이 금속 또는 란타노이드와의 모든 발광 착물, 특히 모든 발광성 이리듐, 백금 및 구리 착물이, 인광 화합물로서 간주된다.

[0211] 화학식 (1) 의 화합물, 또는 바람직한 구현예의 화합물, 및 발광 화합물의 혼합물은, 발광체 및 매트릭스 물질의 전체 혼합물을 기준으로, 99.9 내지 1 중량%, 바람직하게는 99 내지 10 중량%, 특히 바람직하게는 97 내지 60 중량%, 특히 95 내지 80 중량% 의, 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예의 화합물을 포함한다. 따라서, 상

기 혼합물은, 발광체 및 매트릭스 물질의 전체 혼합물을 기준으로, 0.1 내지 99 중량%, 바람직하게는 1 내지 90 중량%, 특히 바람직하게는 3 내지 40 중량%, 특히 5 내지 20 중량%의 발광체를 포함한다. 상기 제시된 한계는, 특히, 층이 용액으로부터 적용되는 경우에 적용된다. 층이 진공 증발에 의해 적용되는 경우에도, 동일한 수치가 적용되지만, 이러한 경우에는, 상기 %가, 각각의 경우, 부피%로서 제시된다.

[0212] 유기 전계발광 소자의 발광층은 또한 다수의 매트릭스 물질 (혼합-매트릭스 시스템 (mixed-matrix systems)) 및 /또는 다수의 도펀트를 포함하는 시스템을 포함할 수 있다. 이러한 경우, 도펀트는 일반적으로 시스템에서 이의 비율이 보다 작은 물질이고, 매트릭스 물질은 시스템에서 이의 비율이 보다 큰 물질이다. 하지만, 각각의 경우, 시스템에서 개별적인 매트릭스 물질의 비율은 개별적인 도펀트의 비율보다 더 작을 수 있다.

[0213] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 화학식 (1)의 화합물은 혼합-매트릭스 시스템의 성분으로서 사용된다. 상기 혼합-매트릭스 시스템은 바람직하게는 2 또는 3종의 상이한 매트릭스 물질, 특히 바람직하게는 2종의 상이한 매트릭스 물질을 포함한다. 여기서 2종의 상이한 매트릭스 물질은 1:10 내지 1:1, 바람직하게는 1:4 내지 1:1의 비로 존재할 수 있다.

[0214] 혼합 매트릭스 시스템은 하나 이상의 도펀트를 포함할 수 있다. 본 발명에 있어서, 도펀트 화합물 또는 도펀트 화합물들은 함께, 발광체에 대하여 상기 제시된 비율을 갖는다.

[0215] 혼합 매트릭스 시스템은 바람직하게는 인광 유기 전계발광 소자에 이용된다.

[0216] 혼합 매트릭스 시스템의 매트릭스 성분으로서 본 발명에 따른 화합물과 조합으로 이용될 수 있는 특히 적합한 매트릭스 물질은, 방향족 케톤, 방향족 포스핀 옥시드 또는 방향족 술포시드 또는 술포 (예를 들어 WO 04/013080, WO 04/093207, WO 06/005627 또는 WO 10/006680에 따름), 트리아릴아민, 카르바졸 유도체, 예를 들어 CBP (N,N-비스카르바졸릴바이페닐), m-CBP 또는 WO 05/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527 또는 WO 08/086851에 개시된 카르바졸 유도체, 인돌로카르바졸 유도체 (예를 들어 WO 07/063754 또는 WO 08/056746에 따름), 인데노카르바졸 유도체 (예를 들어 WO 2010/136109 또는 WO 2011/000455에 따름), 아자카르바졸 유도체 (예를 들어 EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160에 따름), 양극성 매트릭스 물질 (예를 들어 WO 07/137725에 따름), 실란 (예를 들어 WO 05/111172에 따름), 아자보롤 또는 보론산 에스테르 (예를 들어 WO 06/117052에 따름), 트리아진 유도체 (예를 들어 WO 10/015306, WO 07/063754 또는 WO 08/056746에 따름), 아연 착물 (예를 들어 EP 652273 또는 WO 09/062578에 따름), 플루오렌 유도체 (예를 들어 WO 2010/054730에 따름), 또는 브릿지된 카르바졸 유도체 (예를 들어 US 2009/0136779, WO 2010/050778, WO 2011/042107 또는 미공개 특허출원 DE 10201005697.9에 따름), 디아자실롤 또는 테트라아자실롤 유도체 (예를 들어 WO 10/054729에 따름), 또는 디아자포스폴 유도체 (예를 들어 WO 10/054730에 따름)이다. 나아가, 예를 들어, WO 2010/108579에 기재된 바와 같이, 정공-수송 특성도 전자-수송 특성도 갖지 않는 전기적 중성의 공-호스트 (co-host)를 사용할 수 있다.

[0217] 마찬가지로, 둘 이상의 인광 발광체를 혼합물로 사용할 수 있다. 이러한 경우, 보다 단파장에서 발광하는 발광체가 혼합물에서 공-호스트로서 작용한다.

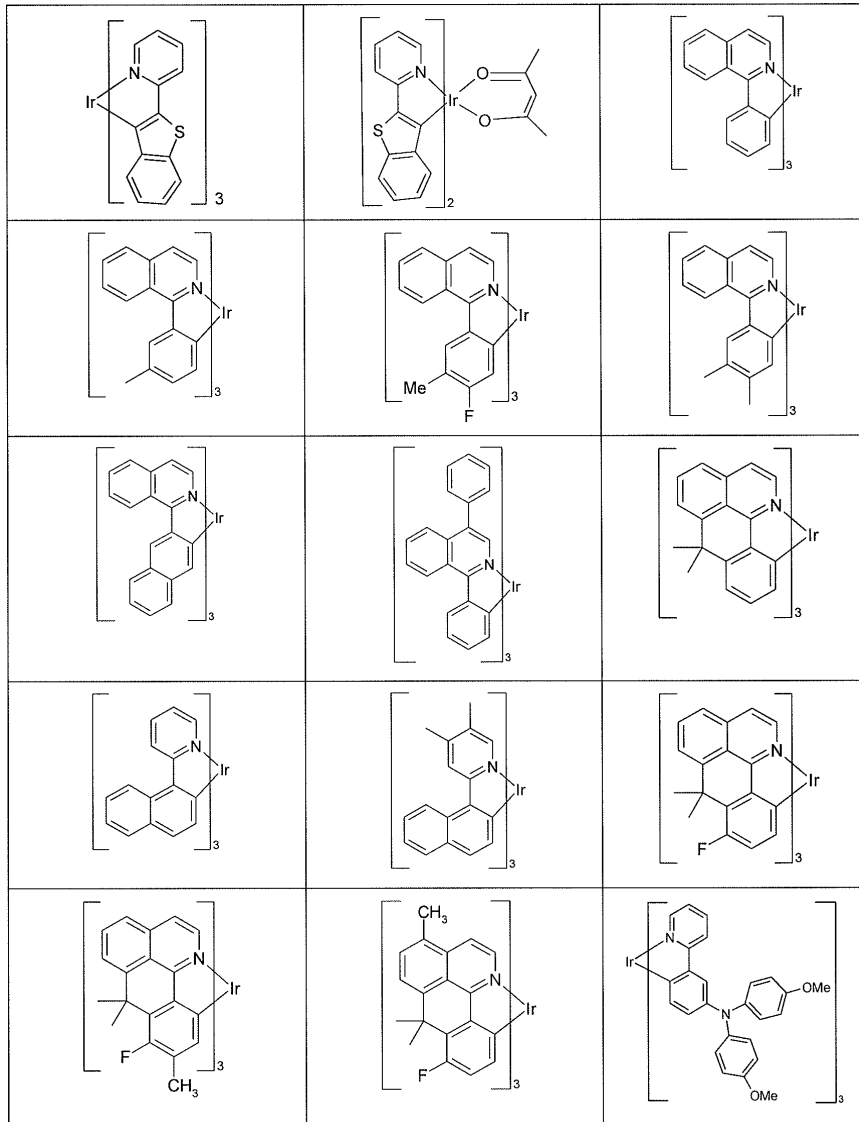
[0218] 용어 인광 도펀트는 통상적으로 스핀-금지 전이, 예를 들어 여기된 삼중항 상태 또는 비교적 높은 스핀 양자수를 갖는 상태, 예를 들어 오중항 상태로부터의 전이를 통해 발광이 일어나는 화합물을 포함한다.

[0219] 적합한 인광 도펀트는, 특히, 적합하게 여기되는 경우, 바람직하게는 가시 범위에서 발광하고, 또한 20 초과, 바람직하게는 38 초과 내지 84 미만, 특히 바람직하게는 56 초과 내지 80 미만의 원자 번호를 갖는 하나 이상의 원자를 함유하는 화합물이다. 바람직하게는 구리, 몰리브덴, 텅스텐, 레늄, 루테튬, 오스뮴, 로듐, 이리듐, 팔라듐, 백금, 은, 금 또는 यू로퓼을 함유하는 화합물, 특히 이리듐, 백금 또는 구리를 함유하는 화합물이 인광 도펀트로 사용된다.

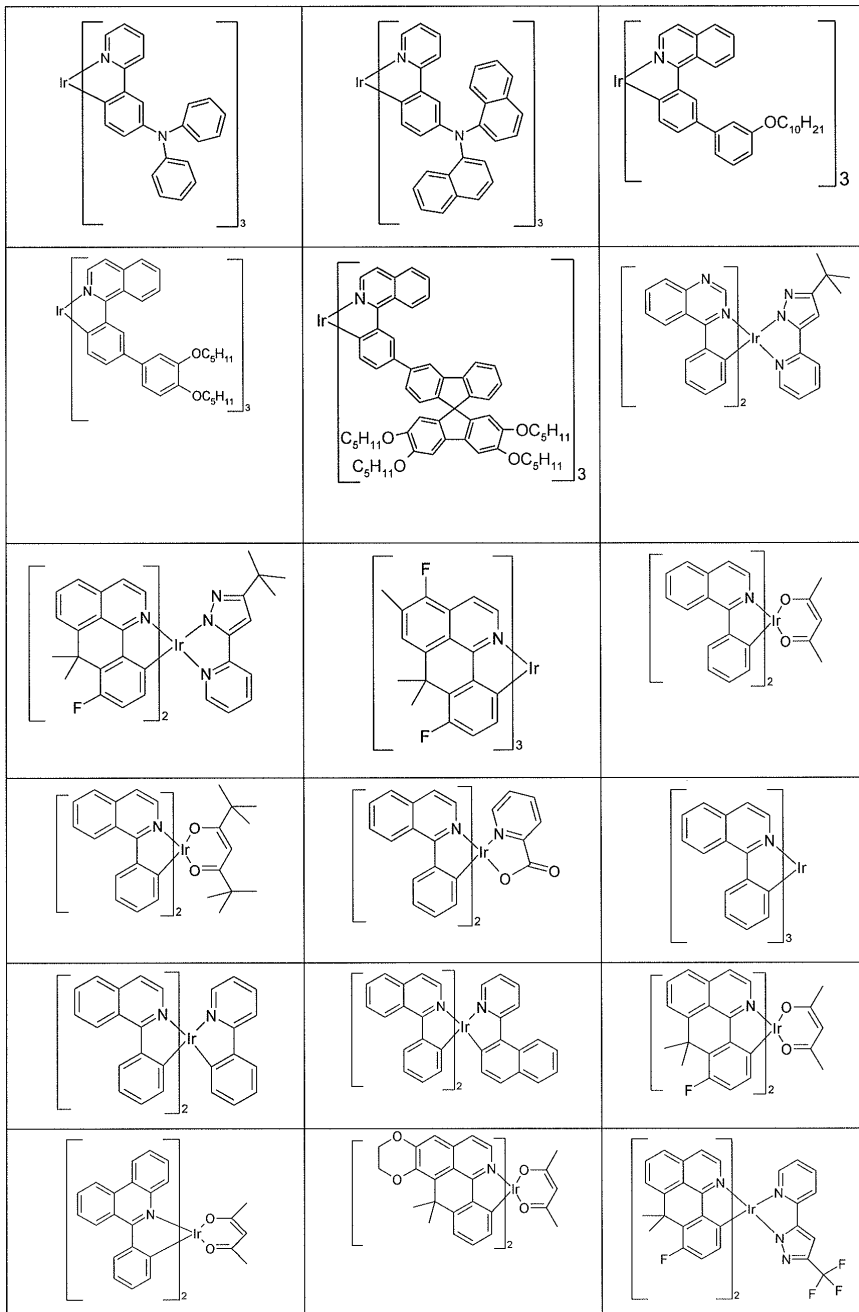
[0220] 본 발명의 의미에서, 모든 발광성 이리듐, 백금 또는 구리 착물이 인광 화합물로서 간주된다.

[0221] 인광 도펀트의 예는, 특허출원 WO 2000/70655, WO 2001/41512, WO 2002/02714, WO 2002/15645, EP 1191613, EP 1191612, EP 1191614, WO 2005/033244, WO 2005/019373 및 US 2005/0258742에 제시되어 있다. 일반적으로, 선행기술에 따라 인광 OLED에 사용되고 유기 전계발광 소자 분야의 당업자에게 공지되어 있는 모든 인광 착물이, 본 발명에 따른 소자에 사용하기에 적합하다. 당업자는 또한, 진보성 없이, 추가의 인광 착물을 OLED에서 본 발명에 따른 화합물과 조합으로 이용할 수 있다.

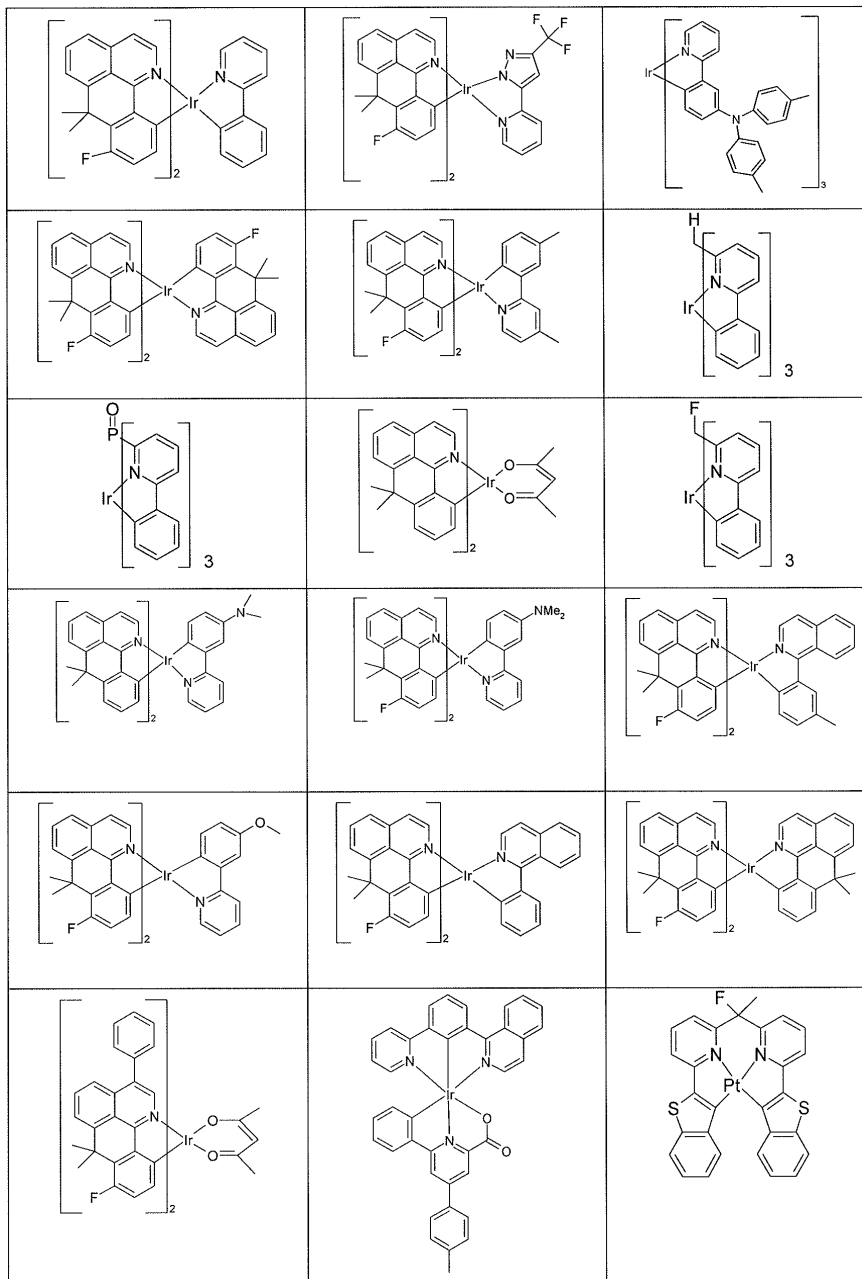
[0222] 적합한 인광 발광체 화합물의 명시적인 예는 하기 표에 도시된 인광 도펀트이다.



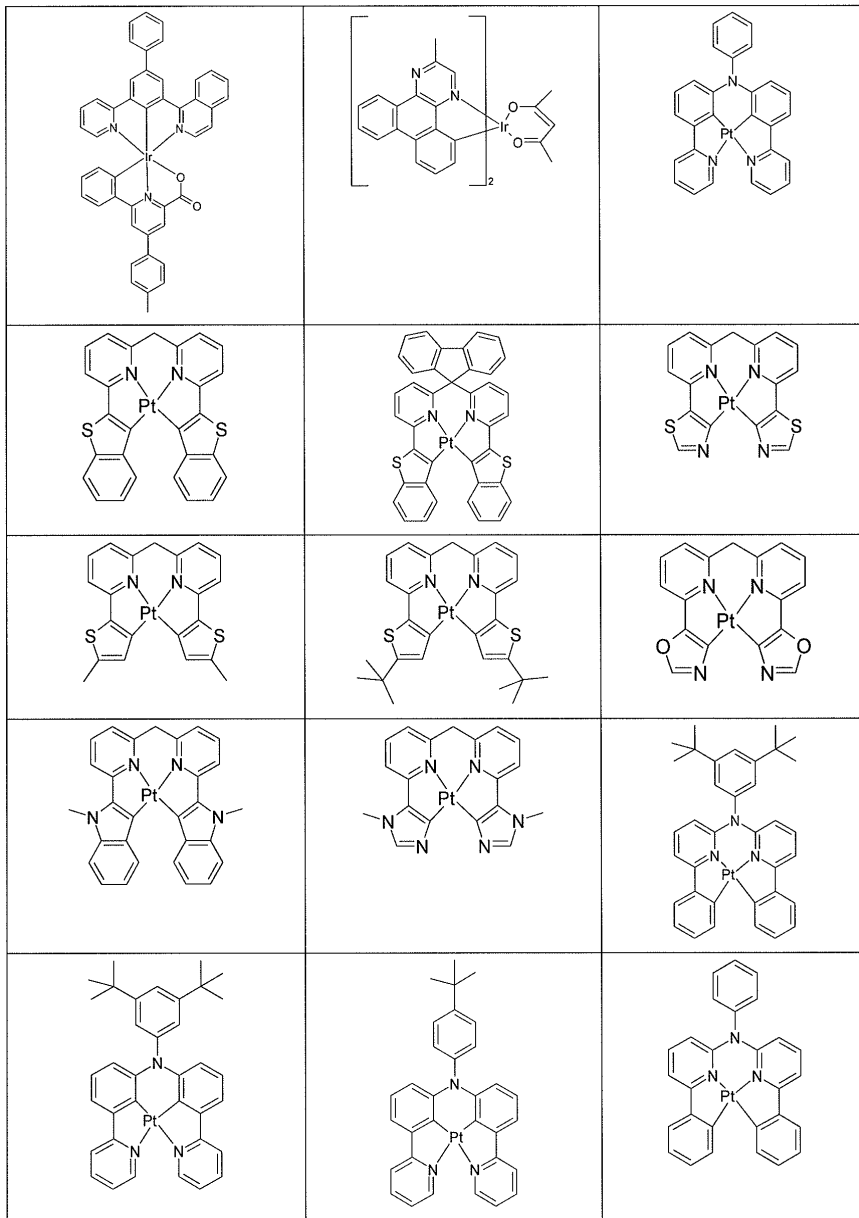
[0223]



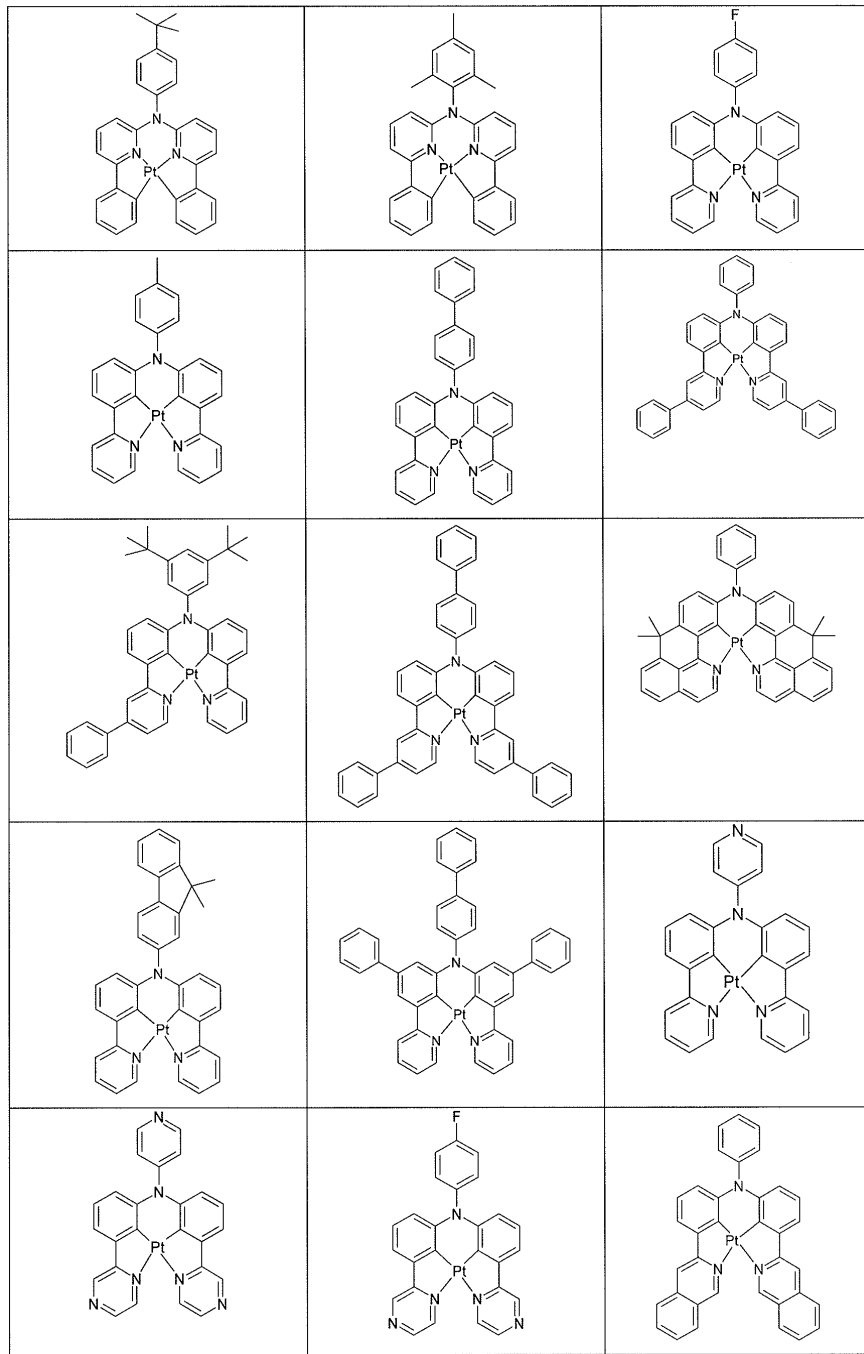
[0224]



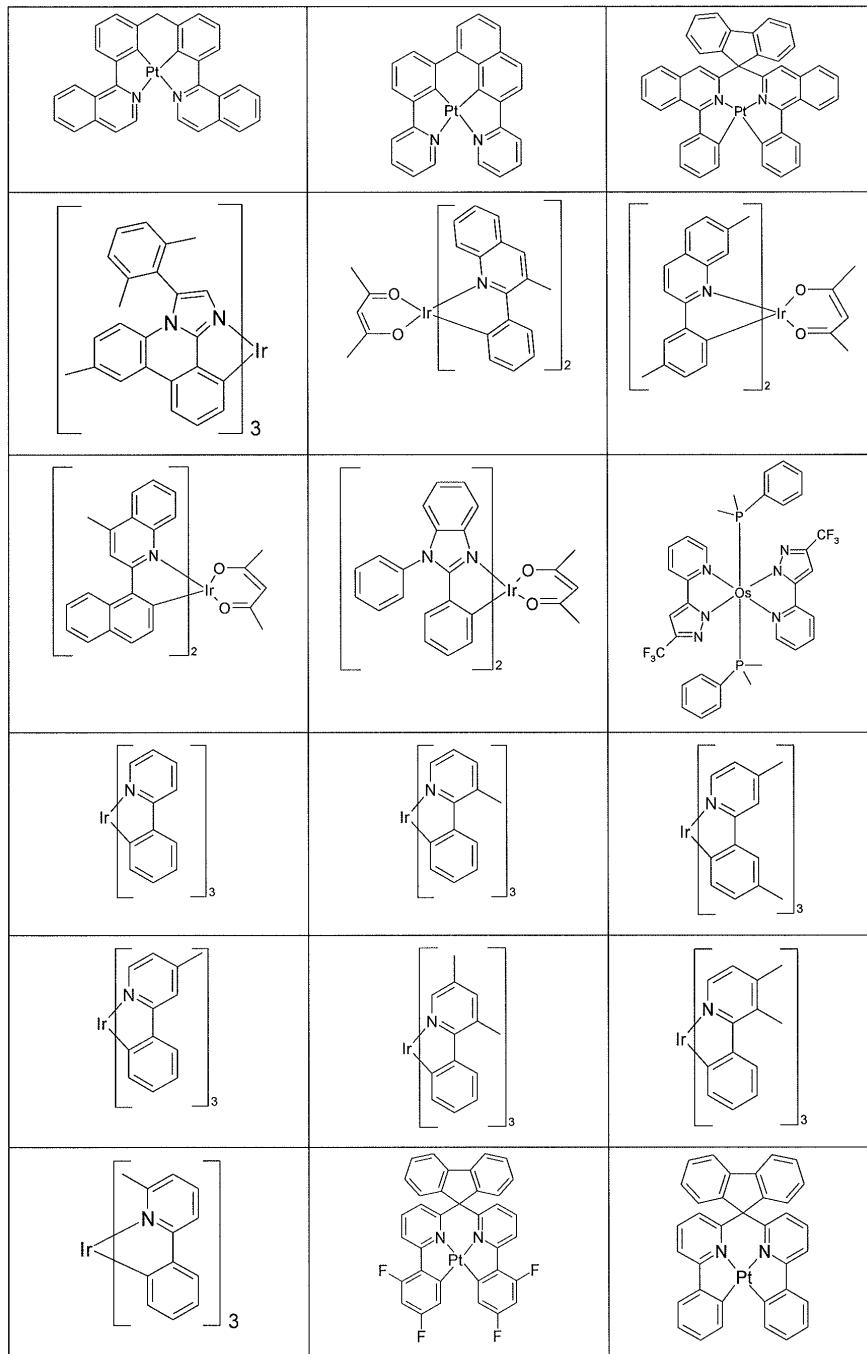
[0225]



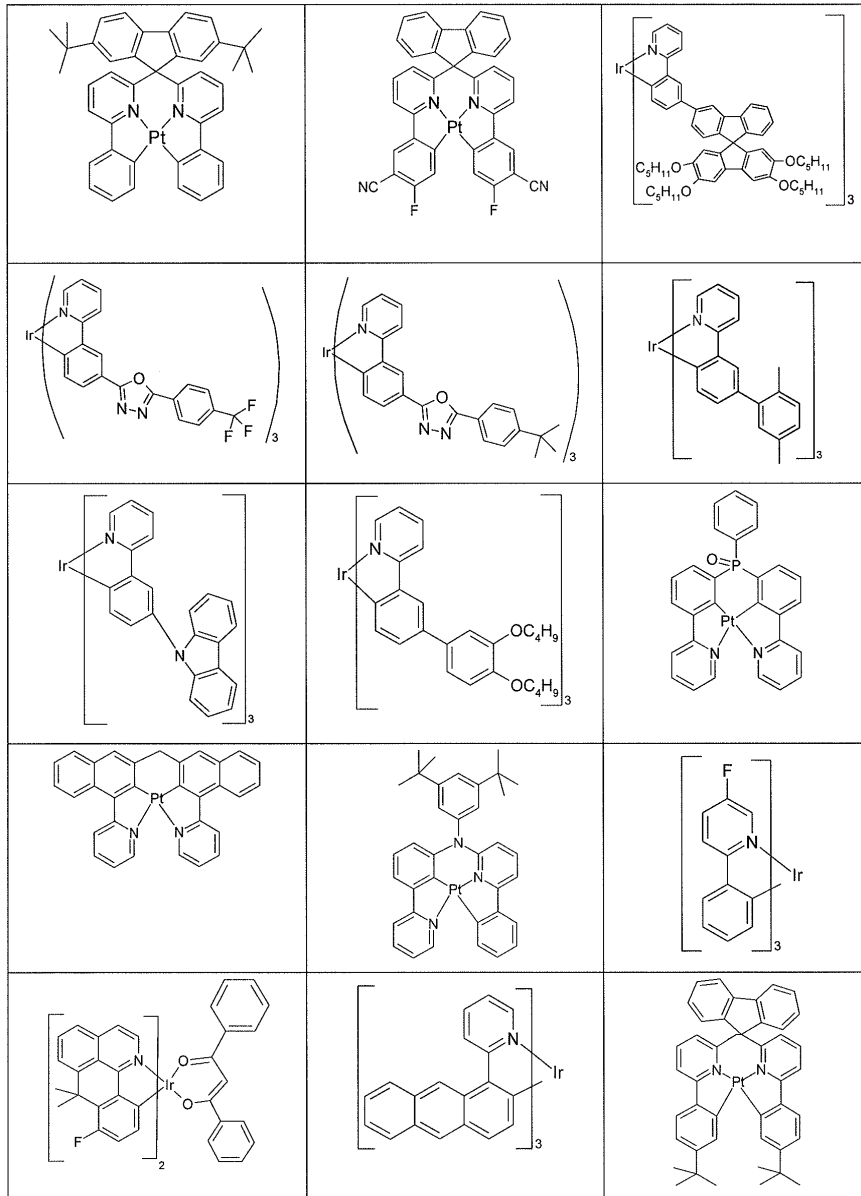
[0226]



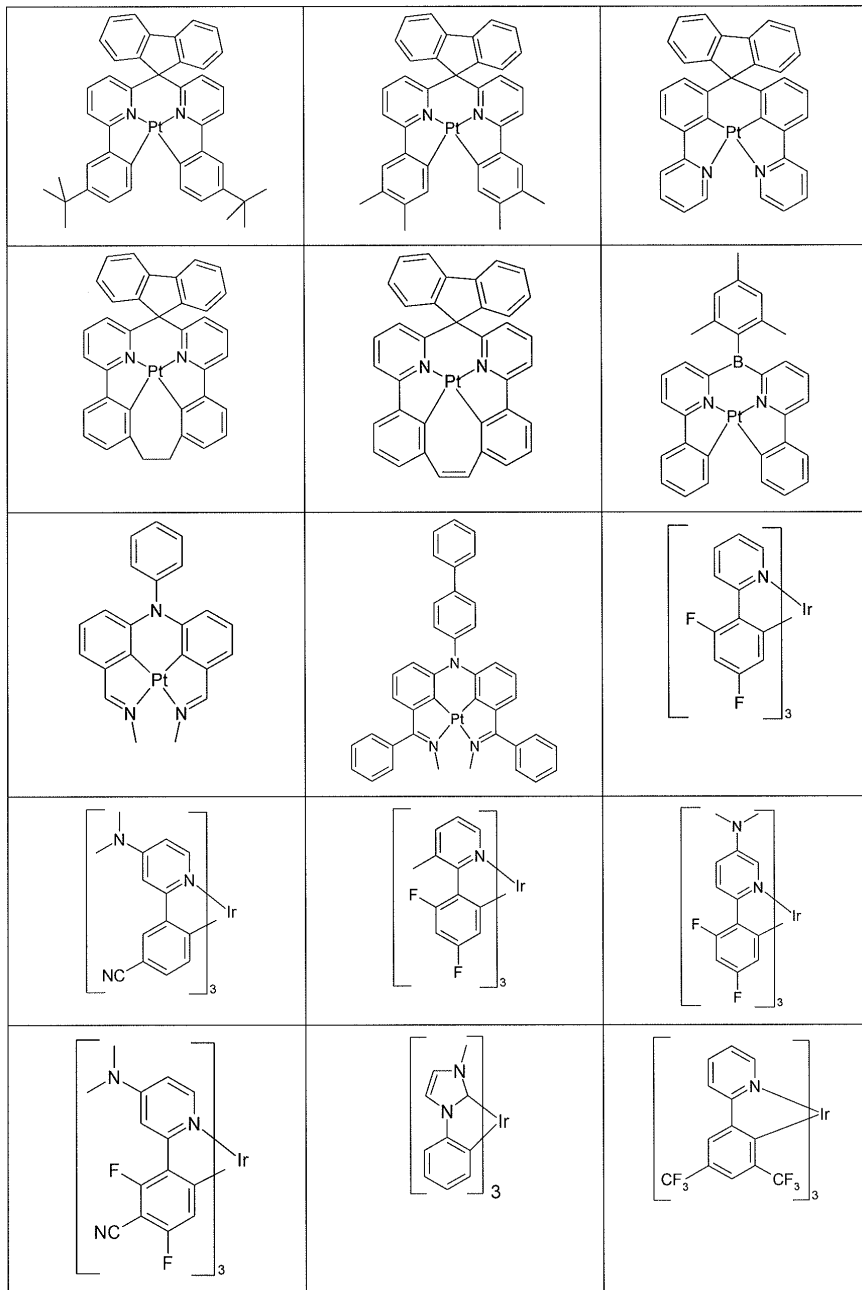
[0227]



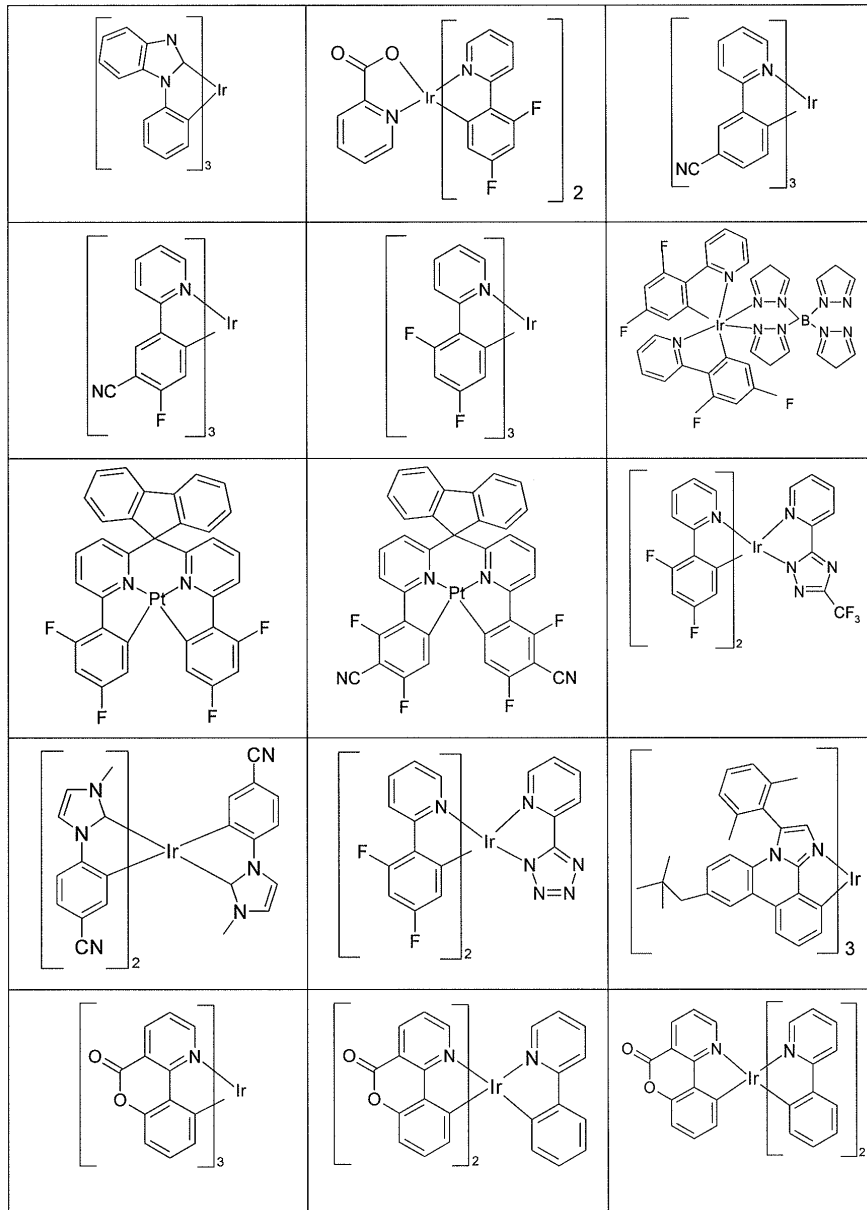
[0228]



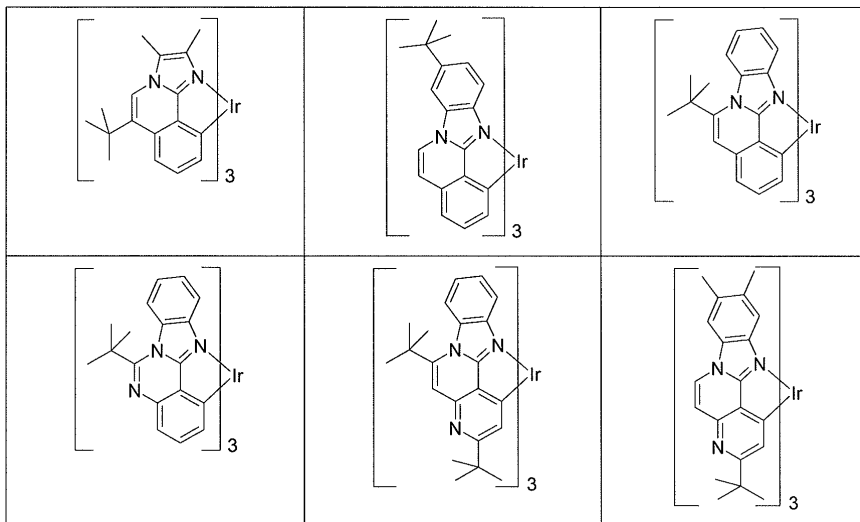
[0229]



[0230]



[0231]



[0232]

[0233]

본 발명의 추가의 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자는 분리된 정공-주입층 및/또는 정공-수송층 및/또는 정공-차단층 및/또는 전자-수송층을 포함하지 않으며, 즉, 발광층은 정공-주입층 또는 애노드에 바로

인접해 있고/있거나, 발광층은 전자-수송층 또는 전자-주입층 또는 캐소드에 바로 인접해 있다 (예를 들어, WO 2005/053051 에 기재된 바와 같음). 나아가, 정공-수송 또는 정공-주입 물질로서, 발광층에 바로 인접한, 발광층에서의 금속 착물과 동일하거나 유사한 금속 착물이 사용될 수 있다 (예를 들어, WO 2009/030981 에 기재된 바와 같음).

- [0234] 나아가, 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예의 화합물은 정공-수송층 또는 여기자-차단층에, 및 또한 발광층에서 매트릭스로서 사용될 수 있다.
- [0235] 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자의 추가의 층에서, 선행 기술에 따라 통상적으로 이용되는 모든 물질이 사용될 수 있다. 따라서, 당업자는, 진보성 없이, 본 발명에 따른 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예의 화합물과 조합으로 유기 전계발광 소자에 대하여 공지된 모든 물질을 이용할 수 있다.
- [0236] 본 발명의 보다 바람직한 구현예에 있어서, 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예의 화합물은, 중간층에 이용된다. 중간층은 바람직하게는 다수의 발광층을 포함하는 유기 전계발광 소자, 예를 들어 각각의 경우, 하나의 적색-발광층, 하나의 녹색-발광층 및 하나의 청색-발광층을 포함하는 백색-발광 OLED 에 이용된다. 중간층은 특히 바람직하게는 2 개의 발광층 사이에 배치된다. 본 발명의 바람직한 구현예에 있어서, 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 중간층은 하나의 적색-발광층, 하나의 녹색-발광층 및 하나의 청색-발광층을 포함하는 백색발광 OLED 의 청색-발광층과 녹색-발광층 사이에 배치된다. 여기서 청색-발광층이 형광층이고, 녹색-발광층이 인광층인 것이 특히 바람직하다.
- [0237] 바람직한 형광 도펀트는 아릴아민의 부류로부터 선택된다. 본 발명의 의미에서 아릴아민 또는 방향족 아민은 질소에 직접 결합된 3 개의 치환 또는 미치환 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 함유하는 화합물을 의미하는 것으로 의도된다. 이러한 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 중 하나 이상은 바람직하게는 축합된 고리 시스템, 특히 바람직하게는 14 개 이상의 방향족 고리 원자를 갖는 축합된 고리 시스템이다. 이의 바람직한 예는 방향족 안트라센아민, 방향족 안트라센디아민, 방향족 피렌아민, 방향족 피렌디아민, 방향족 크리센아민 또는 방향족 크리센디아민이다. 방향족 안트라센아민은 1 개의 디아릴아미노기가 바람직하게는 9-위치에서 안트라센기에 직접 결합된 화합물을 의미하는 것으로 의도된다. 방향족 안트라센디아민은 2 개의 디아릴아미노기가 바람직하게는 9,10-위치에서 안트라센기에 직접 결합된 화합물을 의미하는 것으로 의도된다. 방향족 피렌아민, 피렌디아민, 크리센아민 및 크리센디아민은 이와 유사하게 정의되며, 여기서 디아릴아미노기는 바람직하게는 1-위치 또는 1,6-위치에서 피렌에 결합된다. 보다 바람직한 형광 도펀트는, 인데노플루오렌아민 또는 인데노플루오렌디아민 (예를 들어 WO 2006/122630 에 따름), 벤조인데노플루오렌아민 또는 벤조인데노플루오렌디아민 (예를 들어 WO 2008/006449 에 따름), 및 디벤조인데노플루오렌아민 또는 디벤조인데노플루오렌디아민 (예를 들어 WO 2007/140847 에 따름) 으로부터 선택된다. 나아가, WO 2010/012328 에 개시된 축합된 탄화수소가 바람직하다.
- [0238] 적합한 형광 도펀트는 JP 2006/001973, WO 2004/047499, WO 2006/098080, WO 2007/065678, US 2005/0260442 및 WO 2004/092111 에 이러한 개시된 구조의 유도체이다.
- [0239] 바람직하게는 형광 도펀트용으로 적합한 매트릭스 물질은, 각종 물질의 부류로부터의 물질이다. 바람직한 매트릭스 물질은 올리고아릴렌 (예를 들어 EP 676461 에 따른 2,2',7,7'-테트라페닐스피로바이플루오렌 또는 디나프틸안트라센), 특히 축합된 방향족기 함유 올리고아릴렌, 올리고아릴렌비닐렌 (예를 들어 EP 676461 에 따른 DPVBi 또는 스피로-DPVBi), 다지 (polyodal) 금속 착물 (예를 들어 WO 2004/081017 에 따름), 정공-전도성 화합물 (예를 들어 WO 2004/058911 에 따름), 전자-전도성 화합물, 특히 케톤, 포스핀 옥시드, 술폭시드 등 (예를 들어 WO 2005/084081 및 WO 2005/084082 에 따름), 아트로프이성질체 (atropisomer) (예를 들어 WO 2006/048268 에 따름), 보론산 유도체 (예를 들어 WO 2006/117052 에 따름) 또는 벤즈안트라센 (예를 들어 WO 2008/145239 에 따름) 의 부류로부터 선택된다. 특히 바람직한 매트릭스 물질은 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센 및/또는 피렌 또는 이러한 화합물들의 아트로프이성질체를 포함하는 올리고아릴렌, 올리고아릴렌비닐렌, 케톤, 포스핀 옥시드 및 술폭시드의 부류로부터 선택된다. 매우 특히 바람직한 매트릭스 물질은 안트라센, 벤즈안트라센, 벤조페난트렌 및/또는 피렌 또는 이러한 화합물들의 아트로프이성질체를 포함하는 올리고아릴렌 부류로부터 선택된다. 본 발명의 의미에서 올리고아릴렌은 3 개 이상의 아릴 또는 아릴렌기가 서로 결합된 화합물을 의미하는 것으로 의도된다.
- [0240] 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자의 정공-주입 또는 정공-수송층 또는 전자-수송층에 사용될 수 있는 적합한 전자-수송 물질은, 예를 들어 [Y. Shirota et al., Chem. Rev. 2007, 107(4), 953-1010] 에 개시된 화합물, 또는 선행 기술에 따라 이러한 층에 이용되는 기타 물질이다.

- [0241] 캐소드는 바람직하게는 낮은 일함수를 갖는 금속, 각종 금속, 예를 들어 알칼리 토금속, 알칼리 금속, 주족 금속 또는 란타노이드 (예를 들어 Ca, Ba, Mg, Al, In, Mg, Yb, Sm 등) 을 포함하는 금속 합금 또는 다중층 구조를 포함한다. 또한, 알칼리 금속 또는 알칼리 토금속 및 은을 포함하는 합금, 예를 들어 마그네슘 및 은을 포함하는 합금이 적합하다. 다중층 구조의 경우, 비교적 높은 일함수를 갖는 추가의 금속, 예를 들어 Ag 또는 Al 이 또한 상기 금속 이외에 사용될 수 있고, 이러한 경우, 금속의 조합, 예를 들어 Ca/Ag, Ba/Ag 또는 Mg/Ag 가 일반적으로 사용된다. 또한, 금속성 캐소드와 유기 반도체 사이에 높은 유전 상수를 갖는 얇은 중간층 물질을 도입하는 것이 바람직할 수 있다. 상기 목적을 위하여, 예를 들어, 알칼리 금속 플루오라이드 또는 알칼리 토금속 플루오라이드 뿐 아니라, 해당 산화물 또는 탄산염 (예를 들어 LiF, Li<sub>2</sub>O, BaF<sub>2</sub>, MgO, NaF, CsF, Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 등) 도 적합하다. 나아가, 리튬 퀴놀리네이트 (LiQ) 가 상기 목적을 위하여 사용될 수 있다. 이러한 층의 층 두께는 바람직하게는 0.5 내지 5 nm 이다.
- [0242] 애노드는 바람직하게는 높은 일함수를 갖는 물질을 포함한다. 애노드는 바람직하게는 진공에 비해 4.5 eV 초과 일함수를 갖는다. 상기 목적을 위하여, 한편으로는 높은 산화환원 전위를 갖는 금속, 예를 들어 Ag, Pt 또는 Au 이 적합하다. 다른 한편으로는, 금속/금속 산화물 전극 (예를 들어 Al/Ni/NiO<sub>x</sub>, Al/PtO<sub>x</sub>) 이 또한 바람직할 수 있다. 일부 적용에 있어서, 하나 이상의 전극은 유기 물질의 조사 (유기 태양 전지) 또는 광의 커플링-아웃 (OLED, O-laser) 을 가능하게 하기 위하여 투명하거나 부분적으로 투명해야 한다. 여기서, 바람직한 애노드 물질은 전도성 혼합 금속 산화물이다. 산화인듐주석 (ITO) 또는 산화인듐아연 (IZO) 이 특히 바람직하다. 나아가 전도성, 도핑된 유기 물질, 특히 전도성, 도핑된 폴리머가 바람직하다.
- [0243] 본 발명에 따른 소자의 수명은 물 및/또는 공기의 존재 하에서 단축되기 때문에, 상기 소자는 적절하게 (적용에 따라) 구조화되고, 접촉부가 제공되고, 최종적으로 밀봉된다.
- [0244] 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자는 하나 이상의 층이 승화 공정에 의해 적용되며, 여기서 상기 물질이 진공 승화 장치 내에서 10<sup>-5</sup> mbar 미만, 바람직하게는 10<sup>-6</sup> mbar 미만의 초기 압력에서 증기 증착에 의해 적용되는 것을 특징으로 한다. 하지만, 또한 여기서 상기 초기 압력은 더 낮아질 수도 있는데, 예를 들어 10<sup>-7</sup> mbar 미만일 수 있다.
- [0245] 마찬가지로, 하나 이상의 층이 OVPD (유기 증기상 증착) 공정에 의해 또는 운반 기체 (carrier-gas) 승화에 의해 적용되며, 여기서 상기 물질이 10<sup>-5</sup> mbar 내지 1 bar 의 압력에서 적용되는 것을 특징으로 하는, 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 상기 공정의 특별한 경우는 OVJP (유기 증기 제트 프린팅) 공정으로, 여기서 상기 물질은 노즐을 통해 직접 적용되어, 구조화된다 (예를 들어 [M. S. Arnold *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **2008**, *92*, 053301]).
- [0246] 나아가, 하나 이상의 층이 용액으로부터, 예를 들어 스핀 코팅에 의해, 또는 임의의 목적하는 프린팅 공정, 예를 들어 스크린 프린팅, 플렉소그래피 프린팅, 노즐 프린팅 또는 오프셋 프린팅, 특히 바람직하게는 LITI (광 유도 열 이미지화 (light induced thermal imaging), 열 전사 프린팅) 또는 잉크젯 프린팅에 의해 제조되는 것을 특징으로 하는, 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 상기 목적을 위하여, 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예의 가용성 화합물이 요구된다. 높은 용해성은 상기 화합물의 적합한 치환을 통해 달성될 수 있다.
- [0247] 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자의 제조를 위하여, 용액으로부터 하나 이상의 층을 적용하고, 승화 공정에 의해 하나 이상의 층을 적용하는 것이 보다 바람직하다.
- [0248] 또한, 예를 들어, 하나 이상의 층이 용액으로부터 적용되고, 하나 이상의 추가 층이 증기 증착에 의해 적용되는 복합 공정도 가능하다. 따라서, 예를 들어, 발광층은 용액으로부터 적용될 수 있고, 전자-수송층은 증기 증착에 의해 적용될 수 있다. 이러한 공정은 일반적으로 당업자에게 공지되어 있고, 당업자에 의해 진보성 없이, 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 유기 전계발광 소자에 적용될 수 있다.
- [0249] 본 발명은 나아가 하나 이상의 화학식 (1) 또는 상기 제시된 바람직한 구현예의 화합물 및 하나 이상의 추가 화합물을 포함하는 혼합물에 관한 것이다. 추가 화합물은, 본 발명에 따른 화합물이 매트릭스 물질로서 사용되는 경우, 예를 들어, 형광 또는 인광 도펀트일 수 있다. 따라서, 혼합물은 또한 부가적으로 부가적인 매트릭스 물질로서 추가의 물질을 포함할 수 있다.
- [0250] 본 발명에 따른 화합물 및 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자는 하기 놀라운 이점에 의해 선행 기술과 구별된다:

- [0251] 1. 본 발명에 따른 화합물은 유기 전계발광 소자에서 정공-수송 또는 정공-주입층에 사용하기에 매우 적합하다. 이는, 특히, 또한 인광 발광층에 바로 인접한 층에 사용하기에 적합한데, 이는 본 발명에 따른 화합물이 발광을 소멸시키지 않기 때문이다.
- [0252] 2. 형광 또는 인광 발광체용 매트릭스 물질로서 이용되는 본 발명에 따른 화합물은, 매우 높은 효율 및 긴 수명을 유도한다. 이는, 특히, 상기 화합물이 추가 매트릭스 물질 및 인광 발광체와 함께 매트릭스 물질로서 이용되는 경우에 그러하다.
- [0253] 3. 유기 전계발광 소자에 이용되는 본 발명에 따른 화합물은, 높은 효율, 및 낮은 작동 전압으로의 가파른 전류/전압 곡선을 유도한다.
- [0254] 4. 본 발명에 따른 화합물은 높은 열 안정성을 갖고, 분해되지 않으면서 잔류물 없이 승화될 수 있다.
- [0255] 5. 본 발명에 따른 화합물은 높은 산화 안정성을 갖는데, 이는 특히, 이러한 화합물의 취급 및 용액에 대한 저장 안정성에 있어서 긍정적인 효과를 갖는다.

[0256] 이러한 상기 언급된 이점들은 기타 전자적 특성의 손상을 동반하지 않는다.

[0257] 본 발명을 하기 실시예로 보다 상세하게 설명하지만, 본 발명을 이로써 제한하고자 하는 것은 아니다. 이러한 설명은, 당업자가 개시된 범위 전반에 걸쳐 본 발명을 수행하고, 진보성 없이 본 발명에 따른 추가의 화합물을 제조 및 이를 전자 소자에 사용하거나 또는 본 발명에 따른 방법을 사용하는 것을 가능하게 한다.

[0258] 본 발명을 하기 사용예로 보다 상세하게 설명하지만, 본 발명이 이러한 예의 범위에 제한되는 것은 아니다.

[0259] **실시예**

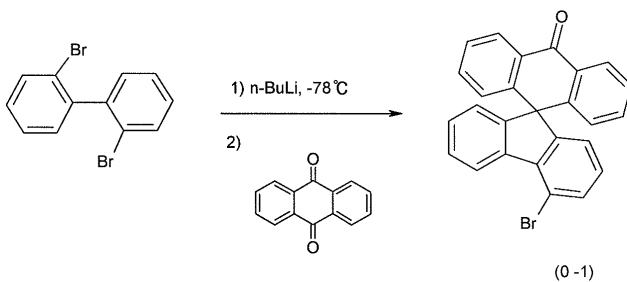
[0260] 달리 언급되지 않는 한, 하기 합성은 보호 기체 분위기 하에서 수행하였다. 출발 물질은 ALDRICH 또는 ABCR 사에서 입수할 수 있었다 (팔라듐(II) 아세테이트, 트리-*o*-톨릴포스핀, 무기 물질, 용매).

[0261] 하기 표에서 \* 로 표시된 화합물은 또한 치환 이성질체의 혼합물 형태로 존재할 수 있다. 이는 또한 사용되는 출발 물질에 이미 적용될 수 있다.

[0262] 또한, 화합물은 임의로 거울상이성질체 또는 부분입체이성질체의 혼합물 형태로 존재할 수 있다.

[0263] **실시예 0**

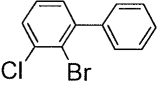
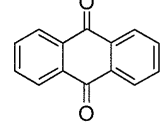
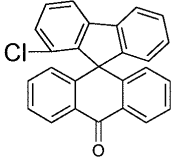
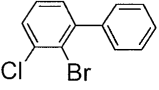
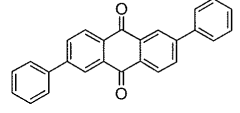
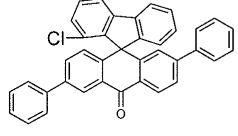
[0264] **화합물 (0-1) 의 합성**



[0265]

[0266] 37.4 g (120 mmol) 의 2,2'-디브로모바이페닐을 가열로 건조시킨 플라스크 내에서 300 ml 의 무수 THF 중에 용해시켰다. 반응 혼합물을 -78°C 까지 냉각시켰다. 상기 온도에서, 75 ml 의 헥산 중 n-BuLi 15% 용액 (119 mmol) 을 서서히 적가하였다. 배치를 -70°C 에서 추가 1 시간 동안 교반하였다. 이어서, 22.9 g 의 안트라퀴논 (CAS No.: 84-65-1) (110 mmol) 을 100 ml 의 THF 중에 용해시키고, -70°C 에서 적가하였다. 첨가가 완결되면, 반응 혼합물을 서서히 실온까지 가온시키고, NH<sub>4</sub>Cl 을 사용하여 켄칭하고, 이어서 회전식 증발기에서 증발시켰다. 500 ml 의 아세트산을 상기 증발시킨 용액에 주의하여 첨가하고, 이어서 90 ml 의 발연 HCl 을 첨가하였다. 배치를 75°C 까지 가열하고, 상기 온도에서 4 시간 동안 유지시켰다. 이러한 기간 중에 백색 고체가 석출되었다. 그 후, 배치를 실온까지 냉각시키고, 석출된 고체를 흡입으로 여과하고, 메탄올로 세정하였다. 잔류물을 진공 하에서 40°C 에서 건조시켰다. 수율은 44.4 g (105 mmol) (이론치의 87.5%) 이었다.

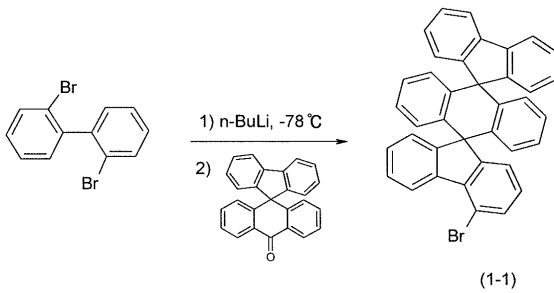
[0267] 하기 화합물 (0-2) 내지 (0-3) 을 유사하게 제조하였다:

	출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
0-2	 1195886-14-9	 84-65-1		50%
0-3	 1195886-14-9	 131268-46-7		43%*

[0268]

[0269] 실시예 1

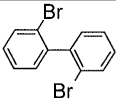
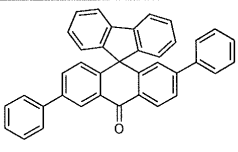
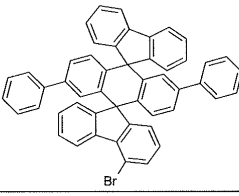
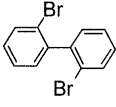
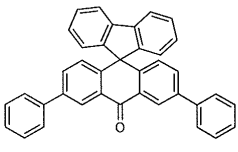
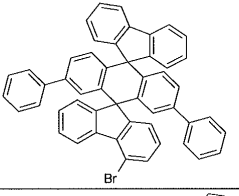
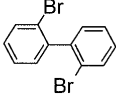
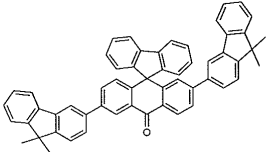
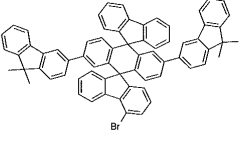
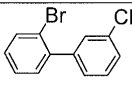
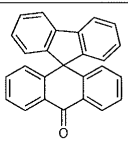
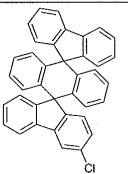
[0270] 화합물 (1-1) 의 합성



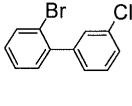
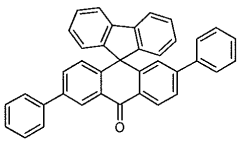
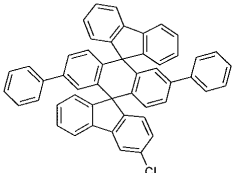
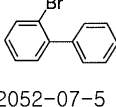
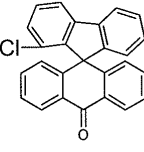
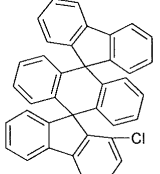
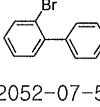
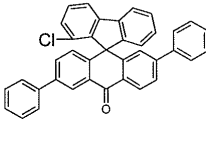
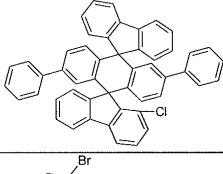
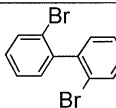
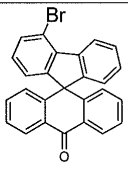
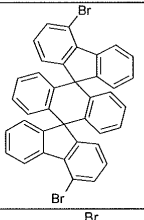
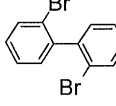
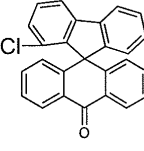
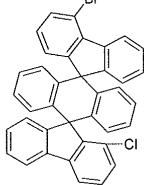
[0271]

[0272] 37.4 g (120 mmol) 의 2,2'-디브로모바이페닐을 가열로 건조시킨 플라스크 내에서 300 ml 의 무수 THF 중에 용해시켰다. 반응 혼합물을 -78°C 까지 냉각시켰다. 상기 온도에서, 75 ml 의 헥산 중 n-BuLi 15% 용액 (119 mmol) 을 서서히 적가하였다. 배치를 -70°C 에서 추가 1 시간 동안 교반하였다. 이어서, 37.8 g 의 케톤 유도체 (CAS No.: 717881-21-5) (110 mmol) 를 100 ml 의 THF 중에 용해시키고, -70°C 에서 적가하였다. 첨가가 완결되면, 반응 혼합물을 서서히 실온까지 가온시키고, NH<sub>4</sub>Cl 을 사용하여 켄칭하고, 이어서 회전식 증발기에서 증발시켰다. 500 ml 의 아세트산을 상기 증발시킨 용액에 주의하여 첨가하고, 이어서 90 ml 의 발연 HCl 을 첨가하였다. 배치를 75°C 까지 가열하고, 상기 온도에서 4 시간 동안 유지시켰다. 이러한 기간 중에 백색 고체가 석출되었다. 그 후, 배치를 실온까지 냉각시키고, 석출된 고체를 흡입으로 여과하고, 메탄올로 세정하였다. 잔류물을 진공 하에서 40°C 에서 건조시켰다. 수율은 61.4 g (이론치의 81%) 이었다.

[0273] 하기 화합물 (1-2) 내지 (1-10) 을 유사하게 제조하였다

	출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
1-2	 13029-09-9	 1355363-51-7		75% *
1-3	 13029-09-9	 1355363-60-8		72%
1-4	 13029-09-9	 1355363-56-2		65% *
1-5	 154407-17-7	 717881-21-5		47%

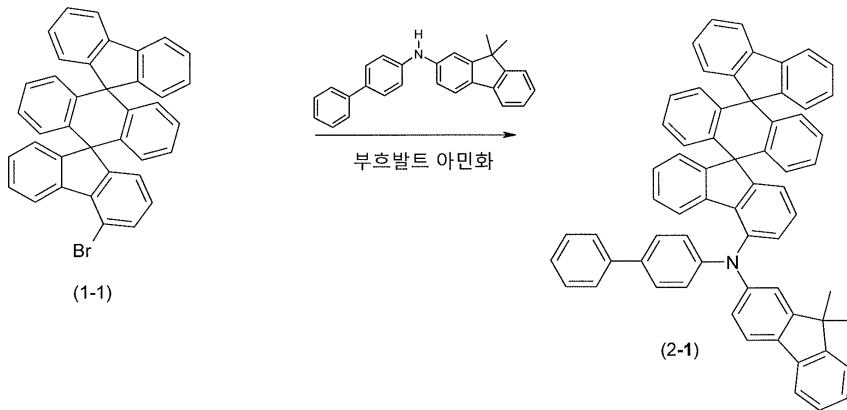
[0274]

1-6	 154407-17-7	 1355363-51-7		43% *
1-7	 2052-07-5	 1355363-51-7		45%
1-8	 2052-07-5	 1355363-51-7		35% *
1-9	 13029-09-9	 1355363-51-7		56%*
1-10	 13029-09-9	 1355363-51-7		48%*

[0275]

[0276] 실시예 2

[0277] 화합물 (2-1) 의 합성



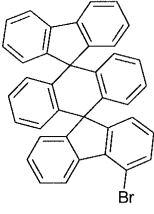
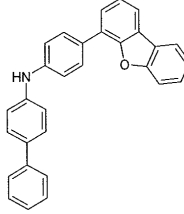
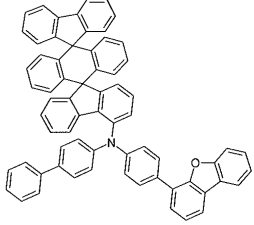
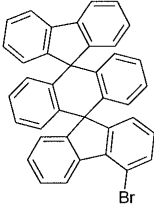
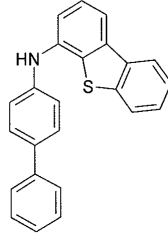
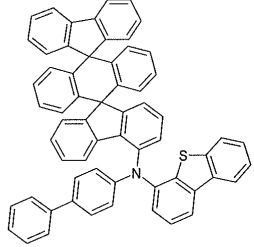
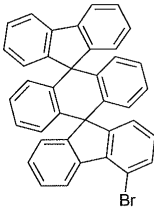
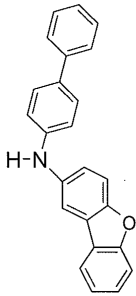
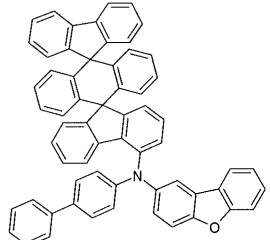
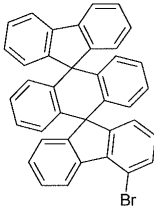
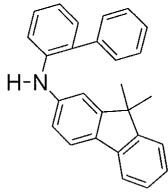
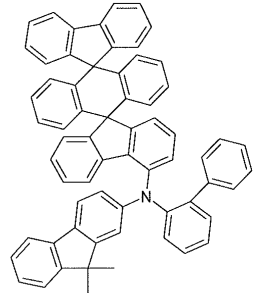
[0278]

[0279] 12.9 g 의 바이페닐-4-일-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)아민 (36 mmol) 및 20 g 의 브롬 유도체 (1-1) (36 mmol) 를 600 ml 의 톨루엔 중에 용해시켰다. 상기 용액을 탈기하고, N<sub>2</sub> 로 포화시켰다. 그 후, 3.6 ml (3.6 mmol) 의 1 M 트리-tert-부틸포스핀 용액 및 0.4 g (1.79 mmol) 의 팔라듐(II) 아세테이트를 첨가하였다. 이어서, 8.59 g 의 나트륨 tert-부톡사이드 (89.4 mmol) 를 첨가하였다. 반응 혼합물을 보호 분위기 하에서 7 시간 동안 비등시키면서 가열하였다. 이어서, 상기 혼합물을 톨루엔과 물 사이에 분배하고, 유기상을 물로 3회 세정하고, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 상에서 건조시키고, 회전식 증발기에서 증발시켰다. 미정제 생성물을 톨루엔을 이용하여 실리카겔을 통해 여과한 후, 남아있는 잔류물을 헵탄/톨루엔으로부터 재결정하고, 최종적으로 고 진공에서 승화시켰다. 순도는 99.9% 였다. 수율은 25 g (이론치의 85%) 이었다.

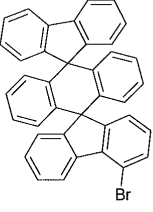
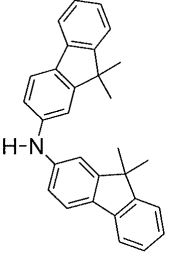
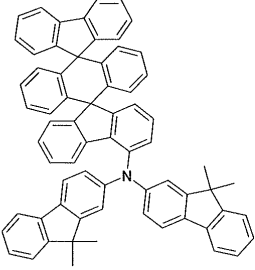
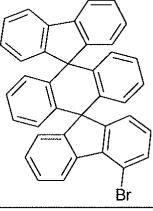
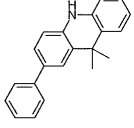
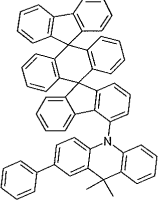
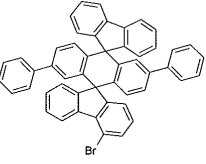
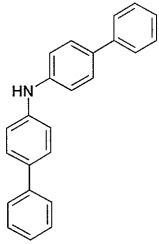
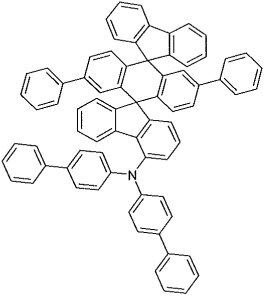
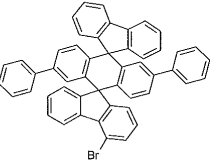
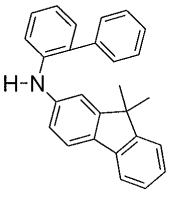
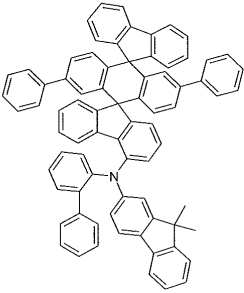
[0280] 하기 화합물 (2-2) 내지 (2-23) 을 유사하게 제조하였다:

	출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
2-2		 897921-59-4		78%
2-3		 32228-99-2		83%
2-4		 102113-98-4		92%

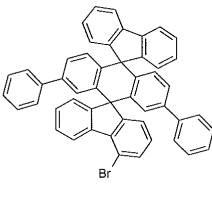
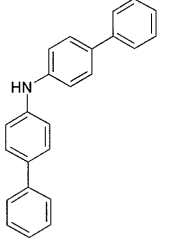
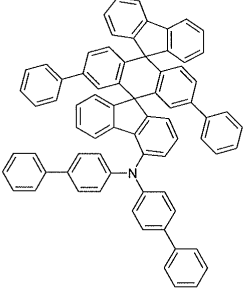
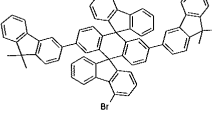
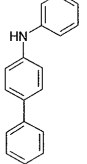
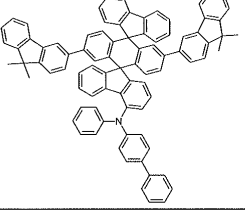
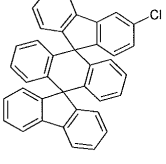
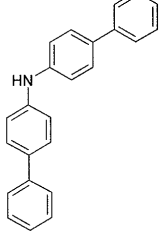
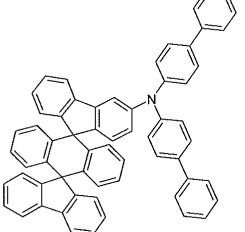
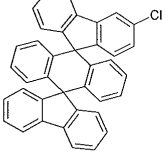
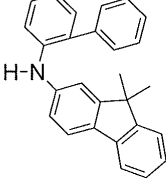
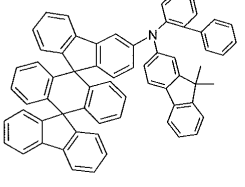
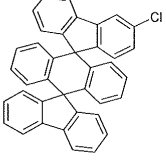
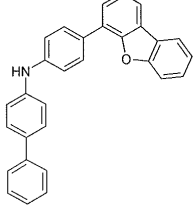
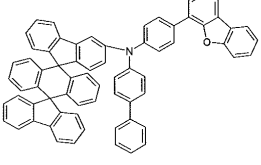
[0281]

2-5		 955959-89-4		88%
2-6		 1448185-87-2		77%
2-7		 1300028-94-7		76%
2-8		 1198395-24-2		69%

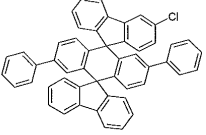
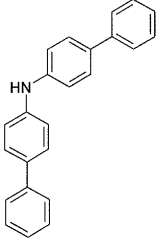
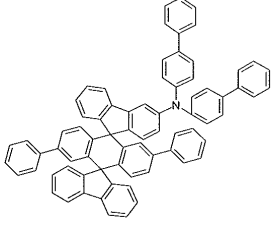
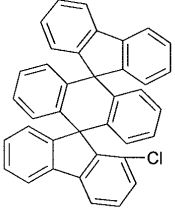
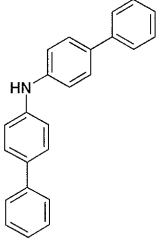
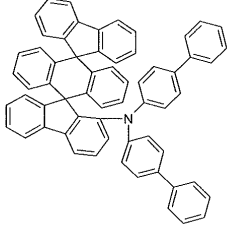
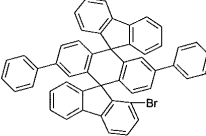
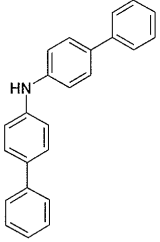
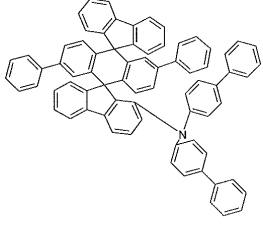
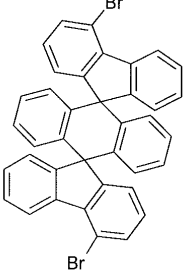
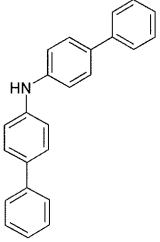
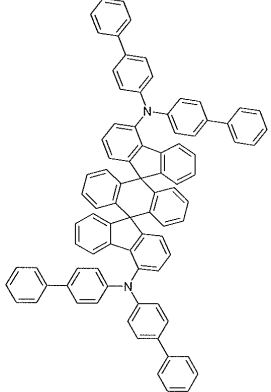
[0282]

2-9		 H-N 500717-23-7		72%
2-10		 H-N		75%
2-11		 HN 102113-98-4		68%*
2-12		 H-N 1198395-24-2		68%*

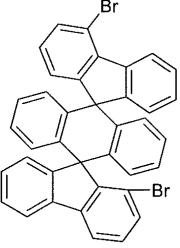
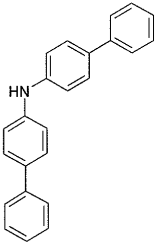
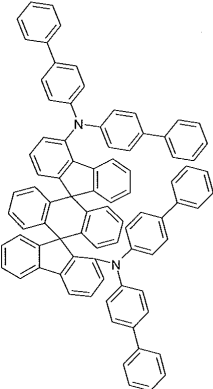
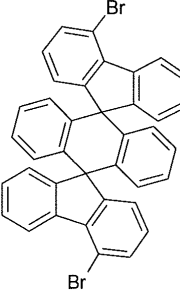
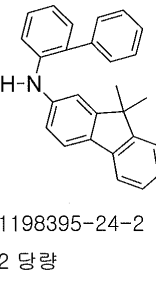
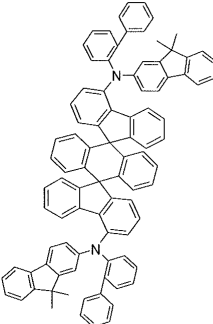
[0283]

2-13		 102113-98-4		70%
2-14		 32228-99-2		65%*
2-15		 102113-98-4		80%
2-16		 1198395-24-2		85%
2-17		 955959-89-4		82%

[0284]

2-18		 102113-98-4		70%*
2-19		 102113-98-4		30%
2-20		 102113-98-4		25%*
2-21		 102113-98-4 2 당량		60%*

[0285]

2-22		 102113-98-4 2 당량		30%*
2-23		 1198395-24-2 2 당량		65%*

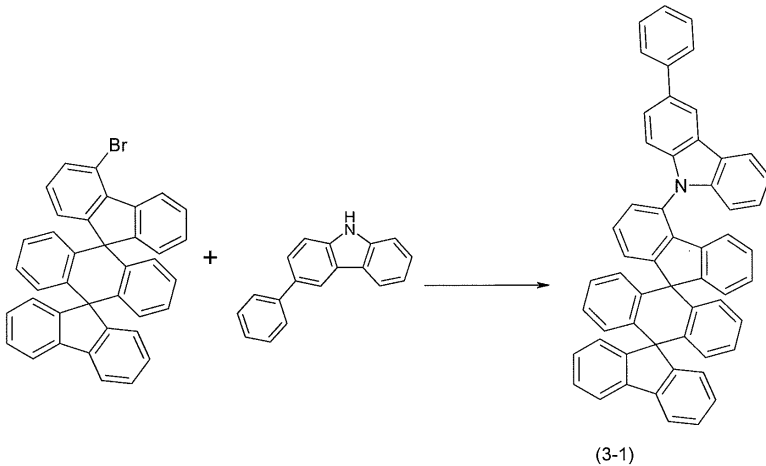
[0286]

[0287]

[0288]

실시예 3

화합물 3-1 의 합성

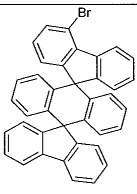
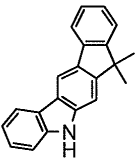
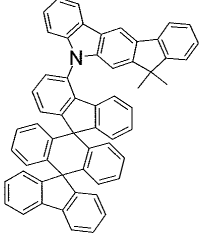
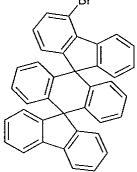
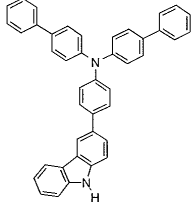
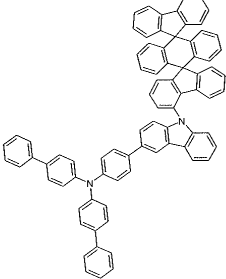


[0289]

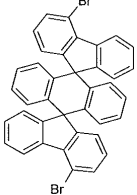
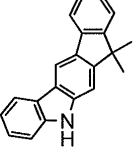
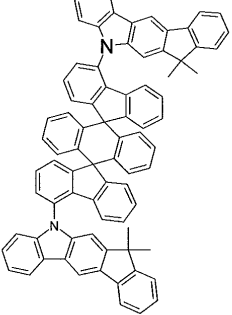
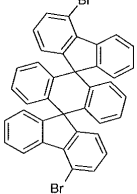
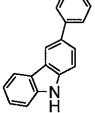
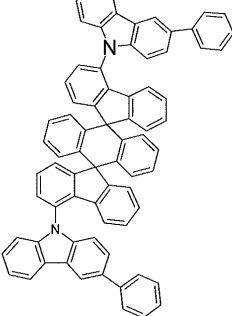
[0290]

26.3 g (47 mmol) 의 화합물 (1-1), 15 g (47 mmol) 의 3,6-디페닐-9H-카르바졸 및 29.2 g 의  $Rb_2CO_3$  를 250 ml 의 p-자일렌 중에 현탁시켰다. 상기 현탁액에, 0.95 g (4.2 mmol) 의  $Pd(OAc)_2$  및 12.6 ml 의 1M tert-부틸포스핀 용액을 첨가하였다. 반응 혼합물을 24 시간 동안 환류 하에서 가열하였다. 냉각시킨 후, 유기상을 분리하고, 150 ml 의 물로 3회 세정하고, 이어서 건조될 때까지 증발시켰다. 잔류물을 고온의 톨루엔으로 추출하고, 톨루엔/헵탄으로부터 3회 재결정하고, 최종적으로 고 진공에서 승화시켜, 이론치의 54.5% 에 해당하는, 18.5 g (25.6 mmol) 을 수득하였다. 순도는 99.9% 였다.

[0291] 하기 화합물 (3-2) 내지 (3-5) 를 유사하게 제조하였다.

	출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
3-2		 1257220-47-5		60%
3-3		 1221495-66-4		40%

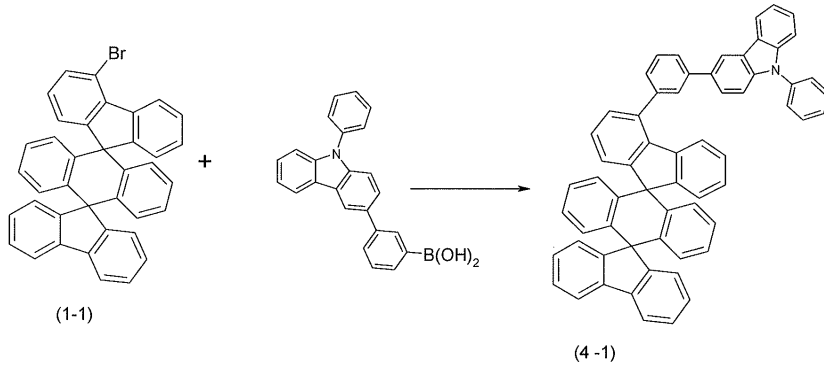
[0292]

3-4		 1257220-47-5 2 당량		35%*
3-5		 103012-26-6 2 당량		35%*

[0293]

[0294] 실시예 4

[0295] 화합물 4-1 의 합성



[0296]

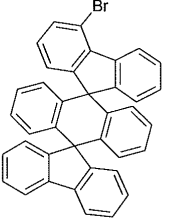
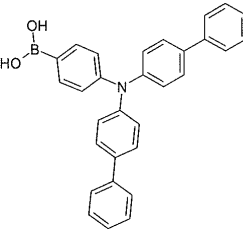
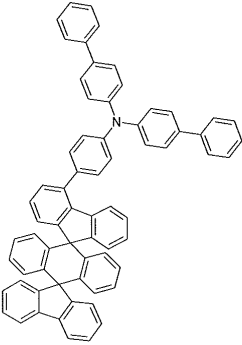
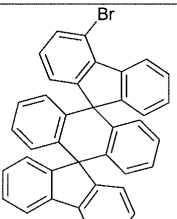
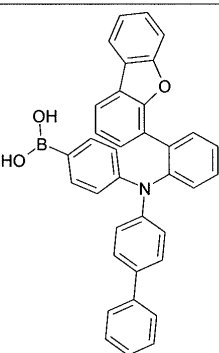
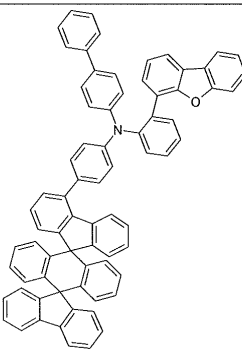
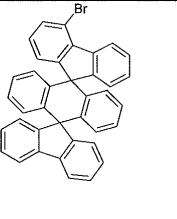
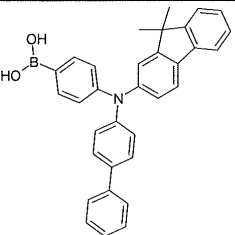
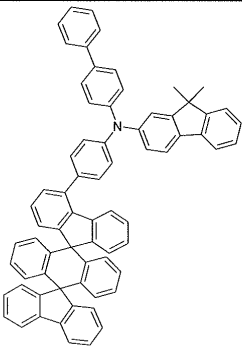
[0297] 16.8 g (30 mmol) 의 화합물 (1-1) 및 10 g (30 mmol) 의 카르바졸보론산을 300 ml 의 디옥산 및 9.1 g 의 세슘 플루오라이드 (60 mmol) 중에 현탁시켰다. 2.2 g (3 mmol) 의 비스(트리시클로헥실포스핀)팔라듐 디클로라이드를 상기 현탁액에 첨가하고, 반응 혼합물을 환류 하에서 18 시간 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 유기상을 분리하고, 실리카겔을 통해 여과하고, 80 ml 의 물로 3회 세정하고, 이어서 건조될 때까지 증발시켰다.

잔류물을 고온의 톨루엔으로 추출하고, 톨루엔/헵탄으로부터 3회 재결정하고, 최종적으로 고 진공에서 승화시켜, 이론치의 66.4% 에 해당하는, 15.9 g 을 수득하였다. 순도는 99.9% 였다.

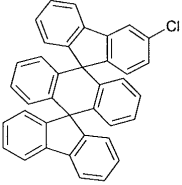
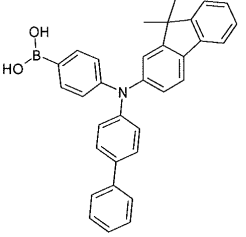
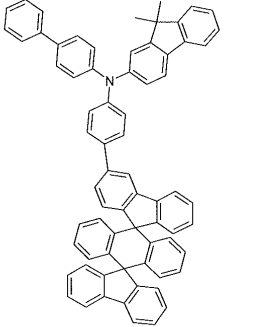
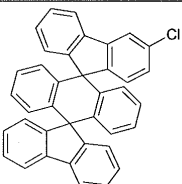
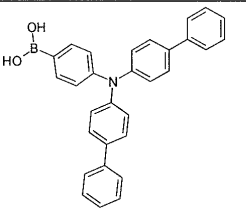
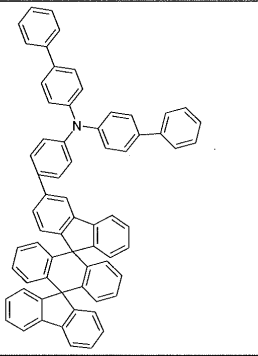
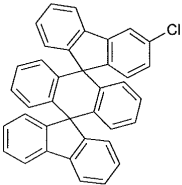
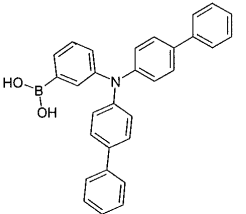
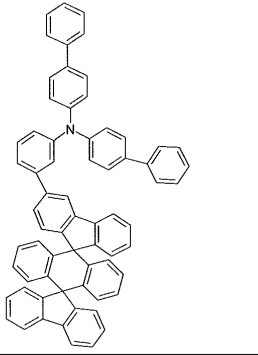
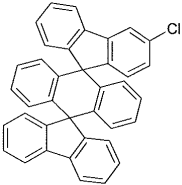
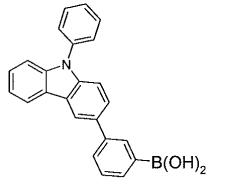
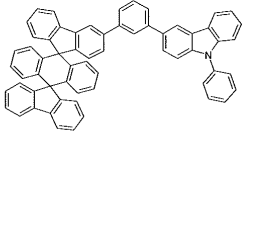
[0298] 하기 화합물 (4-2) 내지 (4-14) 를 유사하게 제조하였다:

	출발 물질 1	출발 물질 2	생성물	수율
4-2				68%
4-3		 40963-55-6		70%
4-4		 1316311-18-8		72%

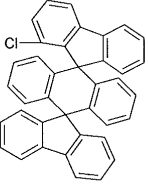
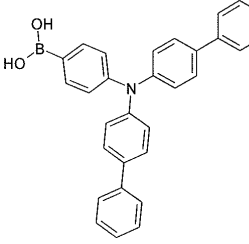
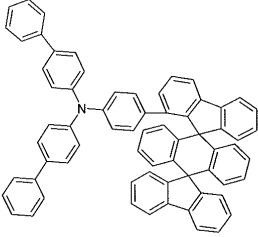
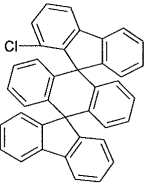
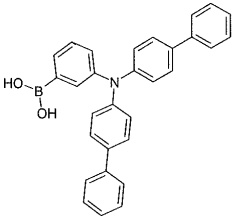
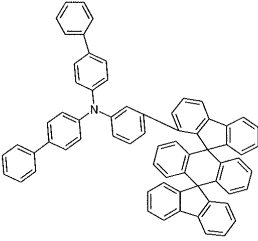
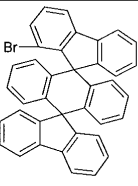
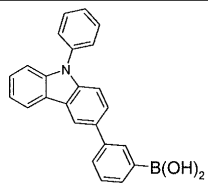
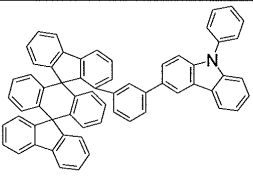
[0299]

<p>4-5</p>		 <p>943836-24-6</p>		<p>75%</p>
<p>4-6</p>				<p>77%</p>
<p>4-7</p>		 <p>1265177-27-2</p>		<p>81%</p>

[0300]

4-8		 <p>1265177-27-2</p>		82%
4-9		 <p>943836-24-6</p>		79%
4-10				75%
4-11		 <p>854952-60-6</p>		81%

[0301]

4-12		 <p>943836-24-6</p>		51%
4-13				46%
4-14		 <p>854952-60-6</p>		48%

[0302]

[0303] **파트 B: OLED 의 제조**

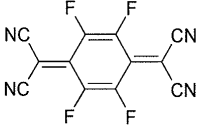
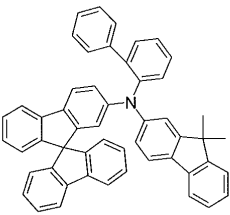
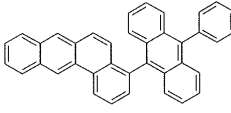
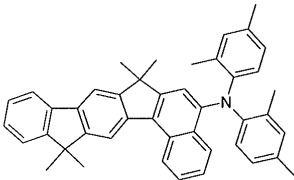
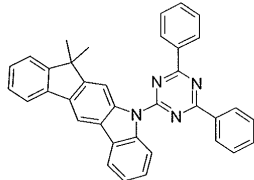
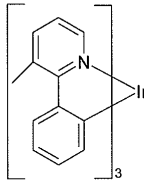
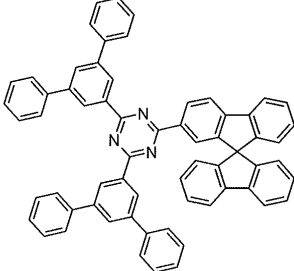
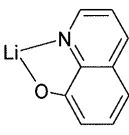
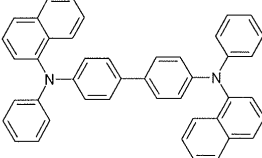
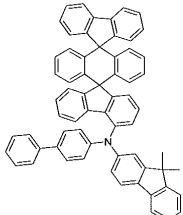
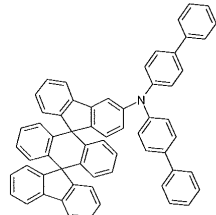
[0304] 본 발명에 따른 OLED 및 선행 기술에 따른 OLED 를, 본원에 기재된 조건 (층 두께 변화, 물질) 에 맞게 조정된, WO 04/058911 에 따른 일반적인 방법으로 제조하였다.

[0305] 하기 본 발명의 실시예 E1 내지 E9 및 참조예 V1 에, 각종 OLED 의 데이터가 제시되어 있다. 두께 50 nm 의 구조화된 ITO (산화인듐주석) 으로 코팅된 유리 플레이트를 기판으로 사용하였다. OLED 는 기본적으로 하기 층 구조를 갖는다: 기판 / p-도핑된 정공 수송층 A' (HIL1) / 정공 수송층 A (HTL) / p-도핑된 정공 수송층 B (HIL2) / 정공 수송층 C (EBL) / 발광층 (EML) / 전자 수송층 (ETL) / 전자 주입층 (EIL) 및 최종적으로 캐소드. 캐소드는 두께 100 nm 의 알루미늄 층으로 형성되어 있다. OLED 의 제조에 필요한 물질들은 표 1 에 제시되어 있고, 제조된 각종 전자 소자의 구조는 표 2 에 제시되어 있다.

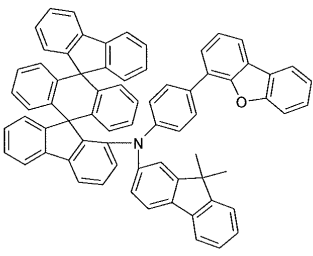
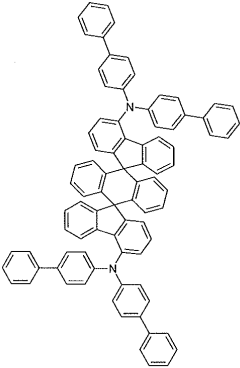
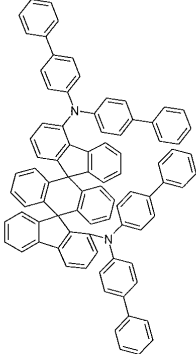
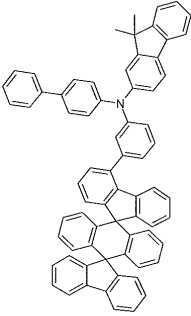
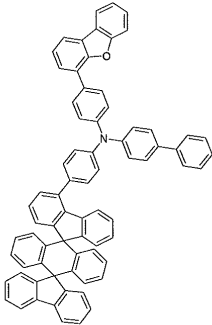
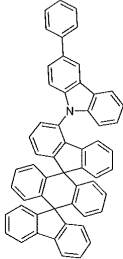
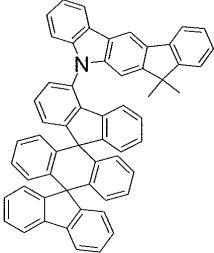
[0306] 모든 물질을 진공 챔버 내에서 열 증기 증착에 의해 적용하였다. 여기서, 발광층은 항상 하나 이상의 매트릭스 물질 (호스트 물질), 및 동시-증발법에 의해 특정 부피비로 매트릭스 물질 또는 매트릭스 물질들과 혼합된 하나의 발광 도펀트 (발광체) 로 이루어진다. 여기서, H1:SEB(5%) 와 같은 표현은, 물질 H1 이 층 내에 95 부피% 로 존재하고, SEB 가 5 부피% 로 존재한다는 것을 의미한다. 유사하게, 전자-수송층 또는 정공-주입층은 또한 2 가지 물질의 혼합물로 이루어질 수 있다. 여기서, H2:H3 (60%):TEG(10%) 와 같은 표현은, 물질 H2 가 층 내에 30 부피% 로 존재하고, H3 이 층 내에 60 부피% 로 존재하고, TEG 가 층 내에 10 부피% 로 존재한다는 것을 의미한다.

[0307] OLED 를 표준 방식으로 특징 분석하였다. 이러한 목적을 위하여, 전계발광 스펙트럼, 시감 농도 (luminous density) 의 함수로서, 람버트 (Lambert) 방사 특성치로 추정하여 전류/전압/시감 농도 특성치 (IUL 특성치) 로부터 산출된 전류 효율 (cd/A 로서 측정됨), 전력 효율 (lm/W 로서 측정됨) 및 외부 양자 효율 (EQE, % 로서 측정됨), 및 수명을 측정하였다. 전계발광 스펙트럼을 1000 cd/m<sup>2</sup> 의 시감 농도에서 측정하고, 이로부터 CIE 1931 x 및 y 색좌표를 산출하였다. 용어 EQE @ 2 mA/cm<sup>2</sup> 는 2 mA/cm<sup>2</sup> 의 전류 밀도에서의 외부 양자 효율을 나타낸다. LT80 @ 50 mA/cm<sup>2</sup> 는, OLED 가 일정한 전류에서 초기 강도의 80% 로 감소될 때까지의 수명이다.

표 1: 사용된 물질의 구조

		
<p>F4TCNQ</p>	<p>HIM</p>	<p>H1</p>
		
<p>SEB</p>	<p>H2</p>	<p>TEG</p>
		
<p>ETM</p>	<p>LiQ</p>	
		
<p>NPB</p>	<p>HTM1</p>	<p>HTM2</p>

[0308]

		
<p>HTM3</p>	<p>HTM4</p>	<p>HTM5</p>
		
<p>HTM6</p>	<p>HTM7</p>	<p>H3</p>
		
<p>H4</p>		

[0309]

표 2: OLED 의 구조							
Ex.	HIL1	HTL	HIL2	EBL	EML	ETL	EIL
	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm	두께/nm	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm
V1	HIM1:F4TCNQ (3%) 20 nm	HIM1 155 nm	NPB:F4TCNQ (3%) 20 nm	NPB 20 nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM(50%):LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1 nm
E1	HIM1:F4TCNQ (3%) 20 nm	HIM1 155 nm	HTM1:F4TCNQ (3%) 20 nm	HTM1 20 nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM(50%):LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1 nm
E2	HIM1:F4TCNQ (3%) 20 nm	HIM1 155 nm	HTM2:F4TCNQ (3%) 20 nm	HTM2 20 nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM(50%):LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1 nm
E3	HIM1:F4TCNQ (3%) 20 nm	HIM1 155 nm	HTM3:F4TCNQ (3%) 20 nm	HTM3 20 nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM(50%):LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1 nm
E4	HIM1:F4TCNQ (3%) 20 nm	HIM1 155 nm	HTM4:F4TCNQ (3%) 20 nm	HTM4 20 nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM(50%):LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1 nm
E5	HIM1:F4TCNQ (3%) 20 nm	HIM1 155 nm	HTM5:F4TCNQ (3%) 20 nm	HTM5 20 nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM(50%):LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1 nm
E6	HIM1:F4TCNQ (3%) 20 nm	HIM1 155 nm	HTM6:F4TCNQ (3%) 20 nm	HTM6 20 nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM(50%):LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1 nm
E7	HIM1:F4TCNQ (3%) 20 nm	HIM1 155 nm	HTM7:F4TCNQ (3%) 20 nm	HTM7 20 nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM(50%):LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1 nm
V2	HIM1:F4TCNQ (3%) 20 nm	HIM1 210 nm	HIM1:F4TCNQ (3%) 20 nm	HIM1 20 nm	H2:TEG(10%) 30 nm	ETM(50%):LiQ (50%) 40 nm	LiQ 1 nm
E8	HIM1:F4TCNQ (3%) 20 nm	HIM1 210 nm	HIM1:F4TCNQ (3%) 20 nm	HIM1 20 nm	H2:H3(60%): TEG(10%) 30 nm	ETM(50%):LiQ (50%) 40 nm	LiQ 1 nm
E9	HIM1:F4TCNQ (3%) 20 nm	HIM1 210 nm	HIM1:F4TCNQ (3%) 20 nm	HIM1 20 nm	H2:H4(60%): TEG(10%) 30 nm	ETM(50%):LiQ (50%) 40 nm	LiQ 1 nm

[0310]

[0311]

**예 1**

[0312]

청색 단일항 발광을 갖는 OLED 에서, 본 발명에 따른 샘플 E1 (6.6%), E2 (7.6%), E3 (8.5%), E4 (7.5%), E5 (7.5%), E6 (7.3%) 및 E7 (7.1%) 은 기준 샘플 V1 (6.2%) 과 비교시, 10 mA/cm<sup>2</sup> 에서 보다 높은 양자 효율을 나타냈다. 50 mA/cm<sup>2</sup> 에서의 수명 LT80 또한, 본 발명에 따른 샘플 E1 (390 시간), E2 (370 시간), E3 (380 시간), E4 (305 시간), E5 (220 시간), E6 (300 시간) 및 E7 (440 시간) 의 경우가 기준 샘플 V1 (135 시간) 의 경우 보다 유의하게 우수하였다.

[0313]

**예 2**

[0314]

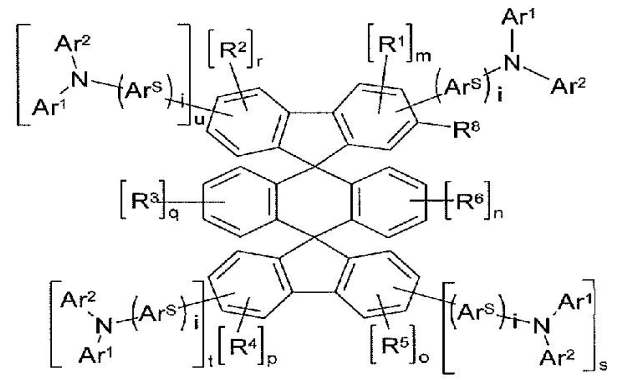
녹색-인광 기준 샘플 V2 를 제조하고, 본 발명에 따른 샘플 E8 및 E9 와 비교하였다. 기준 샘플 V2 는 2 mA/cm<sup>2</sup> 의 전류 밀도에서 19.8% 의 외부 양자 효율 및 135 시간의 수명 (LT80 @ 20 mA/cm<sup>2</sup>) 을 나타냈다. 이와 비교시, 본 발명에 따른 샘플 E8 (19.2%) 및 E9 (19.3%) 는 유사한 양자 효율 및 310 시간 (E8) 및 270 시간 (E9) 의 유의하게 우수한 수명을 나타냈다.

专利名称(译)	电子设备用材料		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020160097298A</a>	公开(公告)日	2016-08-17
申请号	KR1020167018395	申请日	2014-11-18
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	STOESSEL PHILIPP 슈퇴셀필립 MARTYNOVA IRINA 마르티노바이리나 MONTENEGRO ELVIRA 몬테네그로엘비라 MUJICA FERNAUD TERESA 뮤히카페르나우드테레사 VOGES FRANK 포게스프랑크 KROEBER JONAS VALENTIN 크뢰버요나스팔렌틴 STIEBER FRANK 슈티버프랑크		
发明人	슈퇴셀필립 마르티노바이리나 몬테네그로엘비라 뮤히카 페르나우드테레사 포게스프랑크 크뢰버요나스팔렌틴 슈티버프랑크		
IPC分类号	C09K11/06 C07C211/61 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C07C211/61 C07C2103/97 C09K2211/1007 C09K2211/1011 C09K2211/1029 H01L51/0061 H01L51/0072 H01L51/506 H01L51/5064 H01L51/0059 C07C2603/97 C07D209/80 C07D209/86 C07D219/02 C07D307/91 C07D333/76 C09K11/02 C09K2211/1088 C09K2211/1092 H01L51/0073 H01L51/0074 H01L51/5088 Y02E10/549 C07C209/60 C09K2211/1014 H01L51/0056 H01L51/0058 H01L51/006 H01L51/5016 H01L51/5056		
优先权	2013005800 2013-12-12 EP		
其他公开文献	KR101993129B1		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

#### 摘要(译)

本发明涉及适用于电子器件，特别是有机电致发光器件的式(1)化合物。

화학식 (1) 의 화합물:



화학식 (1)