



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

(11) 공개번호 10-2021-0033497  
(43) 공개일자 2021년03월26일

- |  |   |
|--|---|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)<br/> <i>C07D 221/12</i> (2006.01) <i>C07D 405/04</i> (2006.01)<br/> <i>C07D 409/04</i> (2006.01) <i>C07D 409/14</i> (2006.01)<br/> <i>C07D 471/04</i> (2006.01) <i>C07D 513/04</i> (2006.01)<br/> <i>C09K 11/06</i> (2006.01) <i>H01L 51/00</i> (2006.01)</p> <p>(52) CPC특허분류<br/> <i>C07D 221/12</i> (2013.01)<br/> <i>C07D 405/04</i> (2013.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2021-7004456<br/>                 (22) 출원일자(국제) 2019년07월17일<br/>                 심사청구일자 없음<br/>                 (85) 번역문제출일자 2021년02월15일<br/>                 (86) 국제출원번호 PCT/EP2019/069178<br/>                 (87) 국제공개번호 WO 2020/016264<br/>                 국제공개일자 2020년01월23일</p> <p>(30) 우선권주장<br/>                 18184673.4 2018년07월20일<br/>                 유럽특허청(EPO)(EP)</p> | <p>(71) 출원인<br/> <b>메르크 파텐트 게엠베하</b><br/>                 독일 64293 다름스타트 프랑크푸르터 스트라세 250</p> <p>(72) 발명자<br/> <b>파르함 아미르 호싸인</b><br/>                 독일 60486 프랑크푸르트 암 마인 뢰미셔 링 26<br/> <b>크뢰버 요나스 팔렌틴</b><br/>                 독일 60311 프랑크푸르트 암 마인 파르가제 4<br/>                 (뒷면에 계속)</p> <p>(74) 대리인<br/> <b>특허법인코리아나</b></p> |
|--|---|

전체 청구항 수 : 총 17 항

(54) 발명의 명칭 **유기 전계발광 디바이스용 재료**

**(57) 요약**

본 발명은 전자 디바이스, 특히 유기 전계발광 디바이스에서 사용하기에 적합한 화학식 (1) 의 화합물, 및 이들 화합물을 포함하는 혼합물, 및 이들 화합물 및 혼합물을 포함하는 전자 디바이스에 관한 것이다.

(52) CPC특허분류

*C07D 409/04* (2013.01)

*C07D 409/14* (2013.01)

*C07D 471/04* (2013.01)

*C07D 513/04* (2013.01)

*C09K 11/06* (2021.01)

*H01L 51/0071* (2013.01)

*H01L 51/0072* (2013.01)

(72) 발명자

**엔겔하르트 옌스**

독일 64285 다름슈타트 하이델베르거 슈트라쎬 148

**야치 안야**

독일 60489 프랑크푸르트 암 마인 하트슈타이너 슈트라쎬 20

**아이크호프 크리스티안**

독일 68259 만하임 파일크라우트백 12

**에렌라이히 크리스티안**

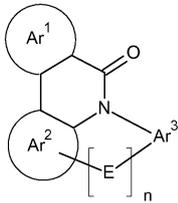
독일 64285 다름슈타트 아이히베르크슈트라쎬 22

명세서

청구범위

청구항 1

화학식 (1)의 화합물로서,



화학식 (1)

식에서 사용한 심볼 및 인덱스에 하기의 것이 적용되고:

Ar<sup>1</sup> 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R<sup>1</sup> 에 의해 치환될 수 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내고;

Ar<sup>2</sup> 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R<sup>2</sup> 에 의해 치환될 수 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내고;

Ar<sup>3</sup> 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R<sup>3</sup> 에 의해 치환될 수 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내고;

-E- 는 단일 결합, -B(R<sup>0</sup>)-, -C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-, -Si(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-, -C(=O)-, -C(=NR<sup>0</sup>)-, -C(=C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>)-, -O-, -S-, -S(=O)-, -S(O<sub>2</sub>)-, -N(R<sup>0</sup>)-, -P(R<sup>0</sup>)- 및 -P((=O)R<sup>0</sup>)- 으로부터 선택되고;

R<sup>0</sup>, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> 은 각각의 경우에, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CHO, CN, N(Ar)<sub>2</sub>, C(=O)Ar, P(=O)(Ar)<sub>2</sub>, S(=O)Ar, S(=O)<sub>2</sub>Ar, NO<sub>2</sub>, Si(R)<sub>3</sub>, B(OR)<sub>2</sub>, OSO<sub>2</sub>R, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있고, 여기서 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH<sub>2</sub> 기는 RC=CR, C≡C, Si(R)<sub>2</sub>, Ge(R)<sub>2</sub>, Sn(R)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, P(=O)(R), SO, SO<sub>2</sub>, O, S 또는 CONR 로 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO<sub>2</sub> 로 대체될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 또는 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 기를 나타내고, 여기서 2 개의 라디칼 R<sup>0</sup>, 2개의 라디칼 R<sup>1</sup>, 2개의 라디칼 R<sup>2</sup> 및/또는 2개의 라디칼 R<sup>3</sup> 은, 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 단환 또는 다환의 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 서로 함께 형성할 수도 있고;

R 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CHO, CN, N(Ar)<sub>2</sub>, C(=O)Ar, P(=O)(Ar)<sub>2</sub>, S(=O)Ar, S(=O)<sub>2</sub>Ar, NO<sub>2</sub>, Si(R')<sub>3</sub>, B(OR')<sub>2</sub>, OSO<sub>2</sub>R', 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기, 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R' 에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH<sub>2</sub> 기는 R'C=CR', C≡C, Si(R')<sub>2</sub>, Ge(R')<sub>2</sub>, Sn(R')<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, P(=O)(R'), SO, SO<sub>2</sub>, O, S 또는 CONR' 에 의해 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO<sub>2</sub>에 의해 대체될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R' 에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로

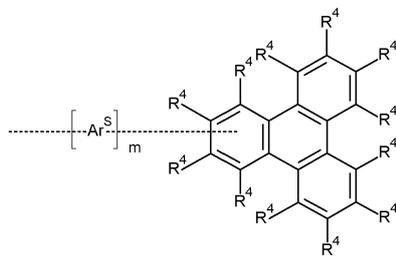
방향족 고리 시스템, 또는 하나 이상의 라디칼 R' 에 의해 치환될 수 있는, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 기를 나타내고, 여기서 2 개의 라디칼 R 은 하나 이상의 라디칼 R' 에 의해 치환될 수도 있는, 고리 시스템을 서로 함께 형성할 수도 있고;

Ar 은, 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R' 에 의해 또한 치환될 수도 있는, 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고;

R' 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기, 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (각 경우에 하나 이상의 비인접 CH<sub>2</sub> 기는 SO, SO<sub>2</sub>, O, S 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br 또는 I 로 대체될 수 있음), 또는 5 내지 24 개의 탄소 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내고;

n 은 0 또는 1이고; n이 0 일 때, 기 -E-는 부재하고;

화학식 (1)의 화합물은 적어도 하나의 기 Ar<sup>3</sup>, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup> 또는 R<sup>3</sup>을 포함하고, 이는 화학식 (T) 의 트리페닐렌 유도체를 나타내고,



화학식 (T)

식에서 점선 결합은 화학식 (1) 의 구조에 대한 결합을 나타내고, 그리고;

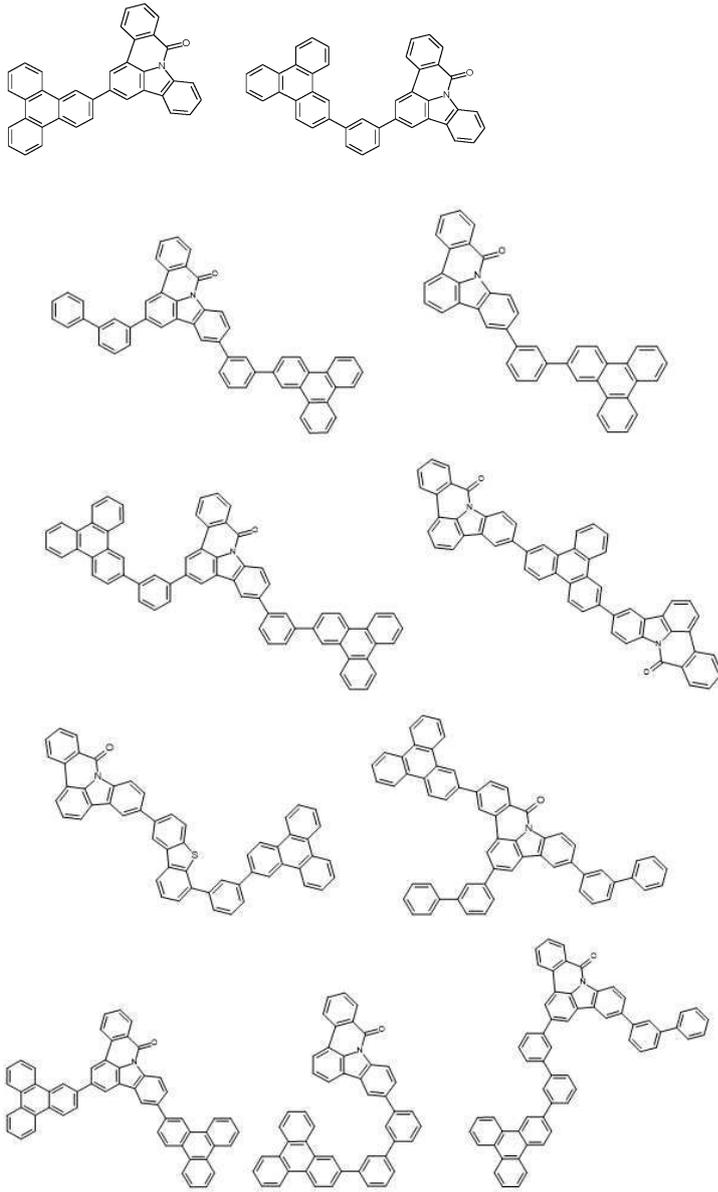
R<sup>4</sup> 는 Ar<sup>S</sup> 에 대한 결합 위치에서 C 이거나 또는 R<sup>4</sup> 는 m이 0 인 경우 화학식 (1)의 구조에 대한 결합 위치에서 C이고;

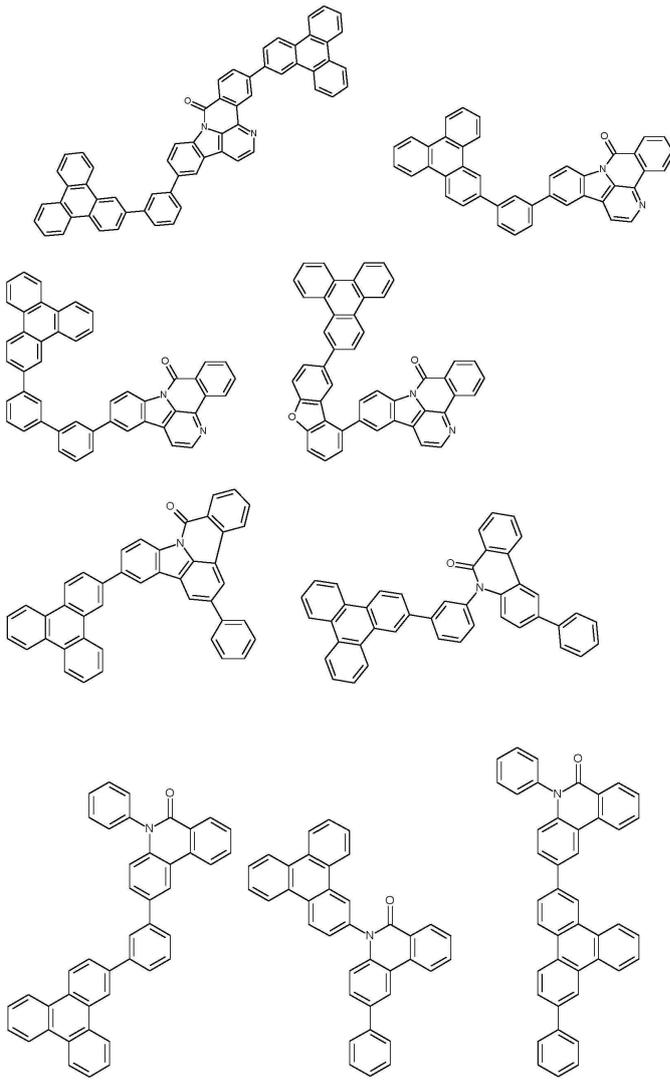
그리고 다른 위치에서, R<sup>4</sup> 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 H, D, F, Cl, Br, I, CHO, CN, N(Ar)<sub>2</sub>, C(=O)Ar, P(=O)(Ar)<sub>2</sub>, S(=O)Ar, S(=O)<sub>2</sub>Ar, NO<sub>2</sub>, Si(R)<sub>3</sub>, B(OR)<sub>2</sub>, OSO<sub>2</sub>R, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있고, 여기서 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH<sub>2</sub> 기는 RC=CR, C≡C, Si(R)<sub>2</sub>, Ge(R)<sub>2</sub>, Sn(R)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, P(=O)(R), SO, SO<sub>2</sub>, O, S 또는 CONR 로 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO<sub>2</sub> 로 대체될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 또는 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기를 나타내고, 여기서 2 개의 라디칼 R<sup>4</sup> 는 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수도 있는, 단환 또는 다환의 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성할 수도 있고;

Ar<sup>S</sup> 는 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 또한 치환될 수도 있는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고; 그리고

m 은 0, 1, 2, 3 또는 4 로부터 선택되는 정수이고;

하기 화합물들



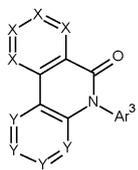


은 제외되는, 화합물.

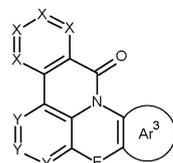
**청구항 2**

제 1 항에 있어서,

화합물은 하기 화학식 (1A) 또는 (1B) 의 화합물에서 선택되고,



화학식 (1A)



화학식 (1B)

식에서

기호 -E- 는 제 1 항에서와 동일한 의미를 갖고;

X 는 CR<sup>1</sup> 또는 N 이고;

Y 는 CR<sup>2</sup> 또는 N 이고;

식에서 기호  $R^1$ ,  $R^2$  는 제 1 항에서와 동일한 의미를 갖고,

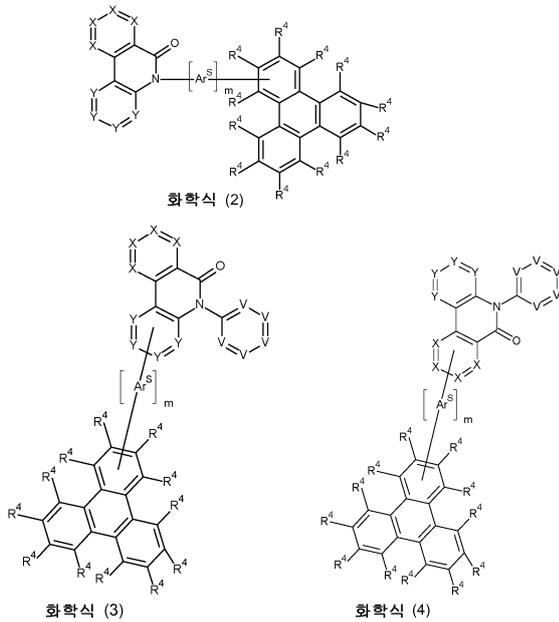
$Ar^3$  은 제 1 항에서와 동일한 의미를 가지며, 다만 화학식 (1B)에서,  $Ar^3$  은 화학식 (1B)에 나타낸 바와 같이 2 개의 인접한 C 원자를 통해 기 -E- 및 원자 N에 연결되고;

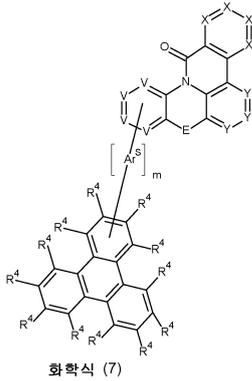
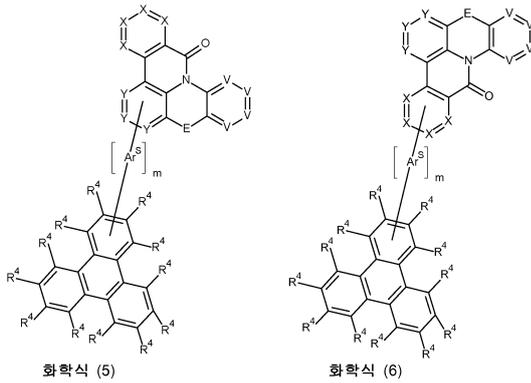
화학식 (1A) 에서, 적어도 하나의 기  $Ar^3$ ,  $R^1$  또는  $R^2$  는 화학식 (T) 의 트리페닐렌 유도체를 나타내고, 화학식 (1B) 에서 적어도 하나의 기  $R^1$  또는  $R^2$  는 화학식 (T)의 트리페닐렌 유도체를 나타내며, 화학식 (T)의 트리페닐렌 유도체는 제 1 항에서 정의된 바와 같은 것을 특징으로 하는 화합물.

### 청구항 3

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서,

화합물은 화학식 (2), (3), (4), (5), (6) 또는 (7) 의 화합물로부터 선택되고,



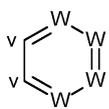


식에서 기호 및 인덱스 E, R<sup>4</sup>, Ar<sup>S</sup> 및 m 은 제 1 항에서와 동일한 의미를 갖고; 그리고

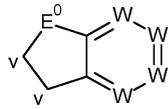
X 는 CR<sup>1</sup> 또는 N이고, 다만 X 는 Ar<sup>S</sup> 에 대한 결합 위치에서, 또는 m이 0이고 Ar<sup>S</sup> 가 부재인 경우 화학식 (4) 및 (6)의 트리페닐렌 기에 대한 결합 위치에서 C 이고;

Y 는 CR<sup>2</sup> 또는 N이고, 다만 Y 는 Ar<sup>S</sup> 에 대한 결합 위치에서, 또는 m이 0이고 Ar<sup>S</sup> 가 부재인 경우 화학식 (3) 및 (5)의 트리페닐렌 기에 대한 결합 위치에서 C 이고;

V 는 CR<sup>3</sup> 또는 N 이고, 다만 V 는 Ar<sup>S</sup> 에 대한 결합 위치에서, 또는 m이 0이고 Ar<sup>S</sup> 가 부재인 경우 화학식 (7)의 트리페닐렌 기에 대한 결합 위치에서 C 이거나; 또는 2 개의 인접한 기 V 는 화학식 (V-1) 또는 (V-2)의 기를 나타내고,



화학식 (V-1)



화학식 (V-2)

식에서 기호 V 는 화학식 (2) 내지 (7)에서 상응하는 인접 기 V를 나타내며;

E<sup>0</sup> 는 -C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-, -Si(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-, -C(=O)-, -C(=NR<sup>0</sup>)-, -C(=C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>)-, -O-, -S-, -S(=O)-, -S(O<sub>2</sub>)-, -N(R<sup>0</sup>)-, -P(R<sup>0</sup>)- 또는 -P((=O)R<sup>0</sup>)- 를 나타내고; 여기서 R<sup>0</sup> 는 제 1 항에서와 동일한 의미를 가지며; 그리고

W 는 CR 또는 N을 나타내는 것을 특징으로 하는 화합물.

**청구항 4**

제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 인덱스 m 은 0 또는 1 과 동일한 것을 특징으로 하는 화합물.

**청구항 5**

제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 있어서,

기 Ar<sup>S</sup> 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 페닐, 비페닐, 플루오렌, 스피로비플루오렌, 나프탈렌, 페난트렌, 안트라센, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 카르바졸, 피리딘, 피리미딘, 피라진, 피리다진, 트리아진, 벤조피리딘, 벤조피리다진, 벤조피리미딘 및 퀴나졸린을 나타내고, 그 각각은 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수 있는 것을 특징으로 하는 화합물.

**청구항 6**

제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 있어서,

기 Ar<sup>S</sup> 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 페닐, 비페닐, 플루오렌, 나프탈렌, 디벤조푸렌, 디벤조티오펜 및 카르바졸을 나타내고, 그 각각은 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수 있는 것을 특징으로 하는 화합물.

**청구항 7**

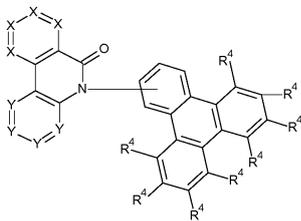
제 2 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 있어서,

기 X 를 포함하는 6 원 고리에서 N을 나타내는 기 X 가 0 또는 1 개 있고, 기 Y 를 포함하는 6 원 고리에서 N을 나타내는 기 Y 가 0 또는 1 개 있으며, 그리고 기 V 를 포함하는 6 원 고리에서 기 V 가 0 또는 1 개 있는 것을 특징으로 하는 화합물.

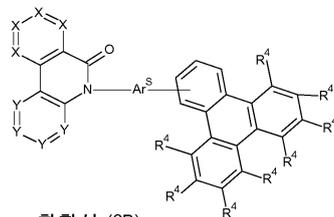
**청구항 8**

제 1 항 내지 제 7 항 중 어느 한 항에 있어서,

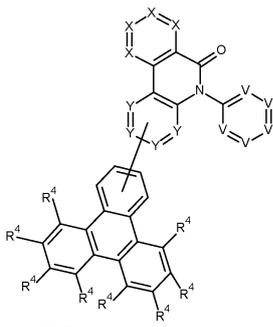
화합물은 화학식 (2A) 내지 (7B) 의 화합물로부터 선택되고:



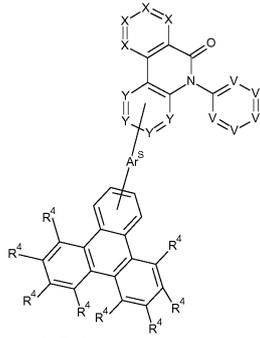
화학식 (2A)



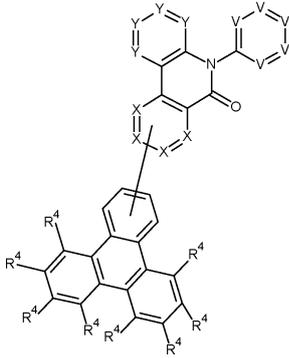
화학식 (2B)



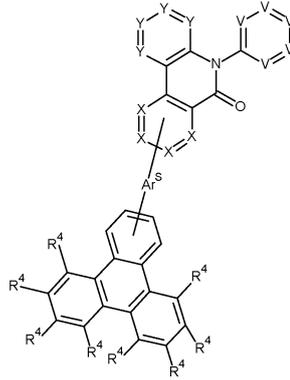
화학식 (3A)



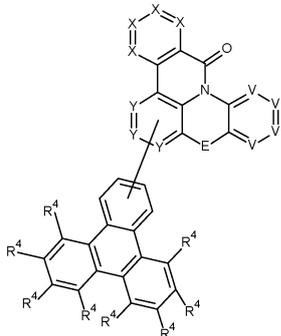
화학식 (3B)



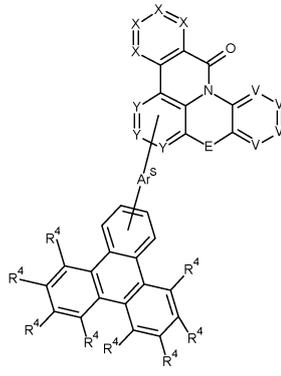
화학식 (4A)



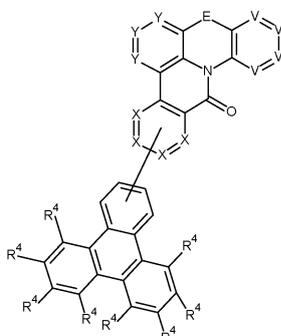
화학식 (4B)



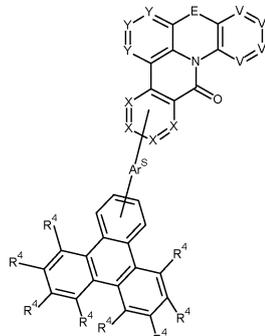
화학식 (5A)



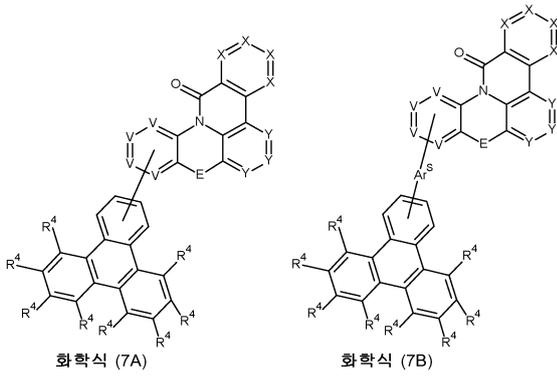
화학식 (5B)



화학식 (6A)



화학식 (6B)

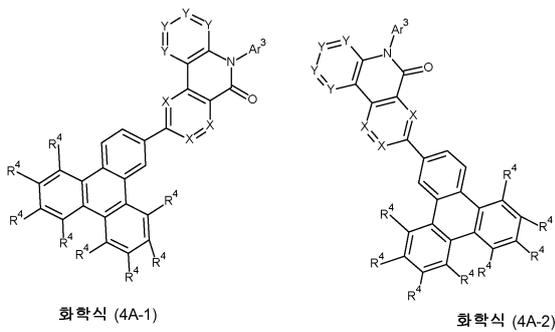
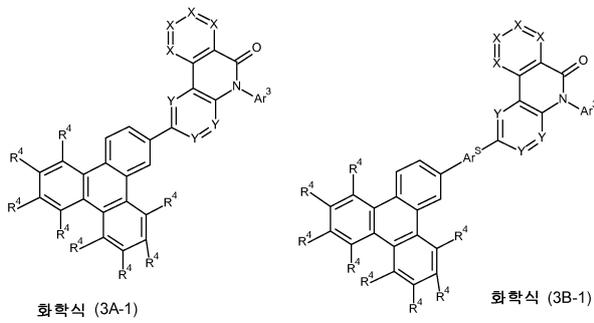
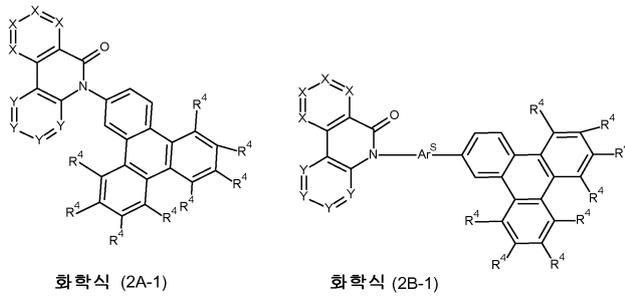


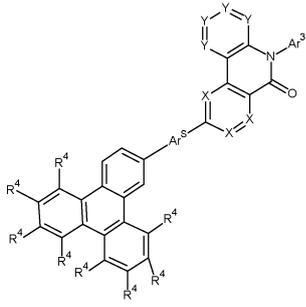
식에서 기호 E, Ar<sup>S</sup> 및 R<sup>4</sup> 는 제 1 항에서와 동일한 의미를 가지며, 기호 X, Y 및 V는 제 3 항에서와 동일한 의미를 갖는 것을 특징으로 하는 화합물.

**청구항 9**

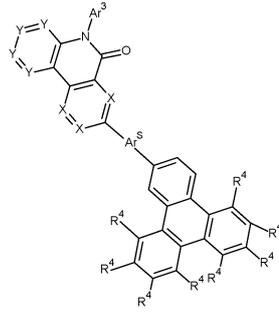
제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 있어서,

화합물은 화합물 (2A-1) 내지 (7B-1) 로부터 선택되고:

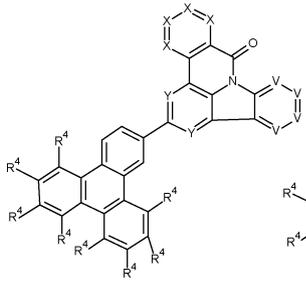




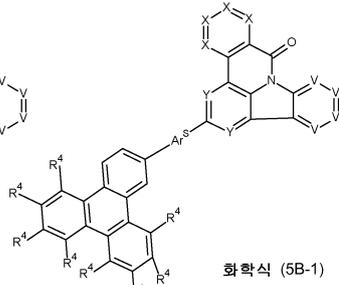
화학식 (4B-1)



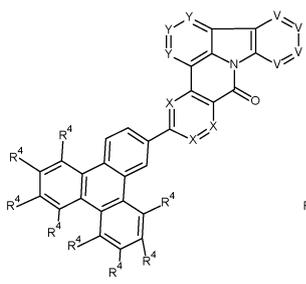
화학식 (4B-2)



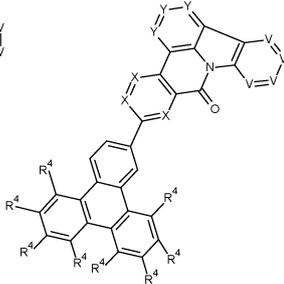
화학식 (5A-1)



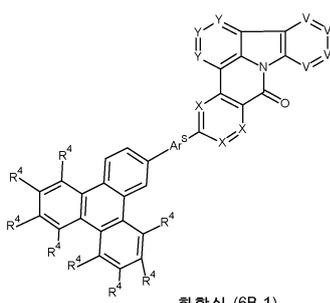
화학식 (5B-1)



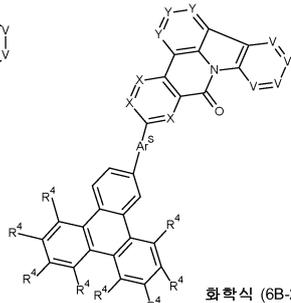
화학식 (6A-1)



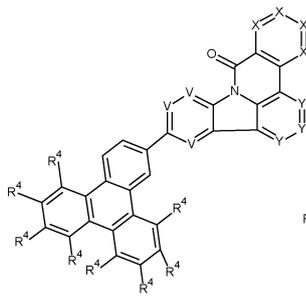
화학식 (6A-2)



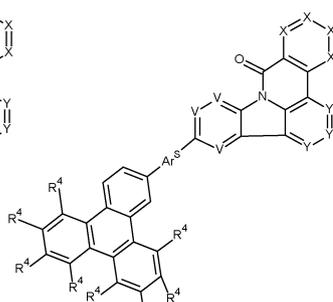
화학식 (6B-1)



화학식 (6B-2)



화학식 (7A-1)



화학식 (7B-1)

식에서 기호  $R^4$  는 제 1 항에서와 동일한 의미를 가지며, 기호 X, Y, V 는 제 3 항에서와 동일한 의미를 갖는 것을 특징으로 하는 화합물.

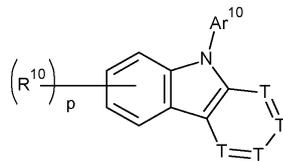
**청구항 10**

제 1 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 있어서,

화합물은 치환기  $R^1$  또는  $R^2$  중 적어도 하나를 포함하고, 이는 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.

**청구항 11**

제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 기재된 적어도 하나의 화합물 및 화학식 (10) 의 적어도 하나의 기를 포함하는 제 2 화합물을 포함하고,



화학식 (10)

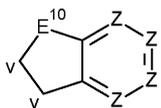
식에서

$R^{10}$  은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 H, D, F, Cl, Br, I, CHO, CN, N(Ar)<sub>2</sub>, C(=O)Ar, P(=O)(Ar)<sub>2</sub>, S(=O)Ar, S(=O)<sub>2</sub>Ar, NO<sub>2</sub>, Si(R)<sub>3</sub>, B(OR)<sub>2</sub>, OSO<sub>2</sub>R, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있고, 여기서 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH<sub>2</sub> 기는 RC=CR, C≡C, Si(R)<sub>2</sub>, Ge(R)<sub>2</sub>, Sn(R)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, P(=O)(R), SO, SO<sub>2</sub>, O, S 또는 CONR 로 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO<sub>2</sub> 로 대체될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 또는 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기를 나타내고, 여기서 2 개의 라디칼  $R^{10}$  는 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있는, 단환 또는 다환의 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 서로 함께 형성할 수도 있고;

Ar<sup>10</sup> 은, 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 또한 치환될 수 있는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고;

p 는 0, 1, 2, 3 및 4 에서 선택되는 정수이고;

T 는 CR<sup>11</sup> 또는 N 이거나; 또는 2 개의 인접한 기 T 는 화학식 (T-1) 의 기를 나타내고,



화학식 (T-1)

식에서 화학식 (T-1)에서의 기호  $V$  는 화학식 (10)에서 상응하는 인접한 기 T 를 나타내며;

$E^{10}$  은  $-C(R^0)_2-$ ,  $-Si(R^0)_2-$ ,  $-C(=O)-$ ,  $-C(=NR^0)-$ ,  $-C(C(R^0)_2)-$ ,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-S(=O)-$ ,  $-S(O_2)-$ ,  $-N(Ar^{10})-$ ,  $-P(R^0)-$  또는  $-P(=O)R^0-$  를 나타내고; 여기서  $R^0$  는 제 1 항에서와 동일한 의미를 가지며;

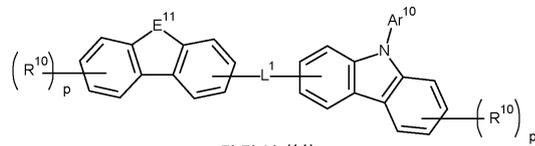
Z 는 CR<sup>10</sup> 또는 N 을 나타내고; 그리고

기 R 및 Ar 은 제 1 항에서와 동일한 의미를 갖는 것을 특징으로 하는 혼합물.

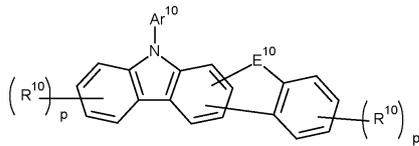
**청구항 12**

제 11 항에 있어서,

화학식 (10) 의 적어도 하나의 기를 포함하는 제 2 화합물이 화학식 (11) 및 (12)의 화합물로부터 선택되고,



화학식 (11)



화학식 (12)

식에서 기호 및 인덱스 Ar<sup>10</sup>, E<sup>10</sup>, R<sup>10</sup> 및 p는 제 11 항에서와 동일한 의미를 갖고;

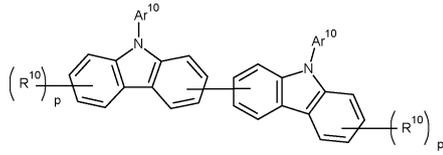
E<sup>11</sup> 은 -C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-, -Si(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-, -C(=O)-, -C(=NR<sup>0</sup>)-, -C(=C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>)-, -O-, -S-, -S(=O)-, -S(O<sub>2</sub>)-, -N(R<sup>0</sup>)-, -P(R<sup>0</sup>)- 또는 -P((=O)R<sup>0</sup>)- 를 나타내고; 여기서 R<sup>0</sup> 는 제 1 항에서와 동일한 의미를 가지며;

L<sup>1</sup> 은 단일 결합 또는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 또한 치환될 수 있음) 이고; 여기서 R 은 제 1 항에서와 동일한 의미를 갖는 것을 특징으로 하는 혼합물.

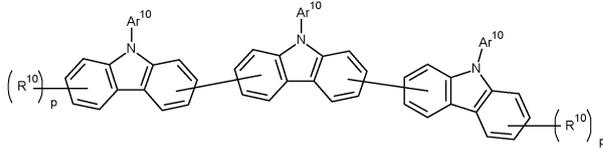
**청구항 13**

제 11 항 또는 제 12 항에 있어서,

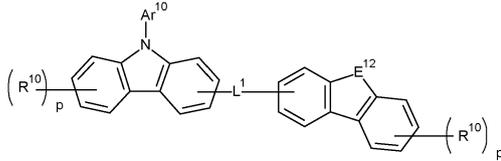
화학식 (10) 의 적어도 하나의 기를 포함하는 제 2 화합물은 화학식 (11-1) 내지 (12-4)의 화합물로부터 선택되고,



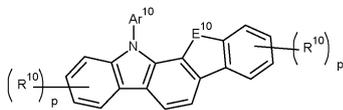
화학식 (11-1)



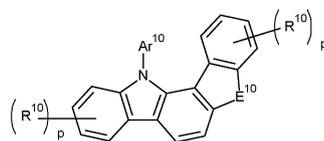
화학식 (11-2)



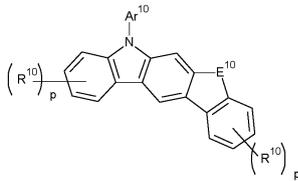
화학식 (11-3)



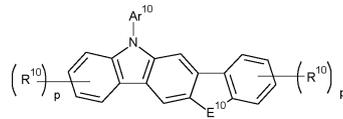
화학식 (12-1)



화학식 (12-2)



화학식 (12-3)



화학식 (12-4)

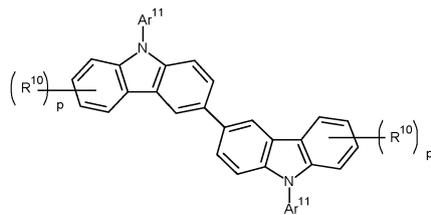
식에서 기호 및 인덱스  $Ar^{10}$ ,  $R^{10}$ ,  $E^{10}$ ,  $L^1$  및  $p$ 는 제 1 항에서와 동일한 의미를 갖고; 그리고

$E^{12}$  는  $-C(R^0)_2-$ ,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-N(Ar^{10})-$  를 나타내고; 여기서  $R^0$  는 제 1 항에서와 동일한 의미를 갖는 것을 특징으로 하는 혼합물.

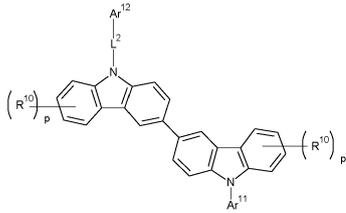
#### 청구항 14

제 11 항 내지 제 13 항 중 어느 한 항에 있어서,

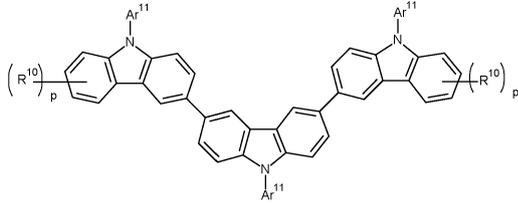
화학식 (10) 의 적어도 하나의 기를 포함하는 제 2 화합물은 화학식 (13-1) 내지 (14-4)의 화합물로부터 선택되고,



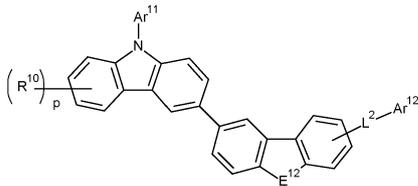
화학식 (13-1)



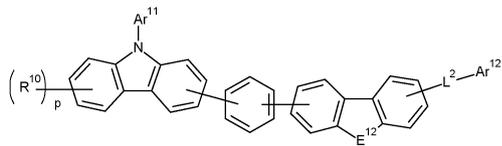
화학식 (13-2)



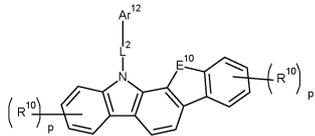
화학식 (13-3)



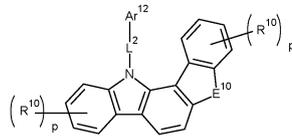
화학식 (13-4)



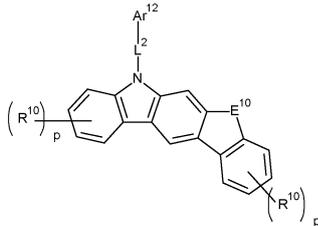
화학식 (13-5)



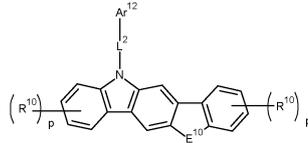
화학식 (14-1)



화학식 (14-2)



화학식 (14-3)



화학식 (14-4)

식에서 기호 및 인덱스  $R^{10}$ ,  $E^{10}$  및  $p$  는 제 11 항에서와 동일한 의미를 가지며, 기호  $E^{12}$  는 제 13 항에서와 동일한 의미를 가지며; 그리고

$Ar^{10}$  은, 하나 이상의 라디칼  $R$  에 의해 치환될 수 있는, 벤젠, 나프탈렌, 피렌, 비페닐, 터페닐, 쿼터페닐, 플루오렌, 스피로비플루오렌, 시스- 또는 트랜스-인데노플루오렌, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 카르바졸, 인돌로카르바졸, 인데노카르바졸; 또는 이들 기의 조합으로부터 선택된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내고;

$L^2$  는 단일 결합 또는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼  $R$  로 치환될 수도 있음) 을 나타내고;

$Ar^{12}$  는, 하나 이상의 라디칼  $R$  로 치환될 수 있는, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 트리아진으로부터 선택된 헤테로방

향족 고리 시스템을 나타내며;

R 은 제 1 항에서와 동일한 의미를 갖는 것을 특징으로 하는 혼합물.

**청구항 15**

제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 따른 화합물 또는 제 11 항 내지 제 14 항 중 어느 한 항에 따른 혼합물, 및 용매를 포함하는, 포물레이션.

**청구항 16**

제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 따른 적어도 하나의 화합물 또는 제 11 항 내지 제 14 항 중 어느 한 항에 따른 혼합물을 포함하는 전자 디바이스로서,

전자 디바이스는 유기 전계발광 디바이스, 유기 집적 회로, 유기 전계효과 트랜지스터, 유기 박막 트랜지스터, 유기 발광 트랜지스터, 유기 태양 전지, 염료-감응 유기 태양 전지, 유기 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 전계 켄치 디바이스, 발광 전기화학 전지, 유기 레이저 다이오드 및 유기 플라즈몬 방출 디바이스로 이루어지는 군에서 선택되는, 전자 디바이스.

**청구항 17**

제 16 항에 있어서,

전자 디바이스는 유기 전계발광 디바이스로부터 선택되고, 제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 따른 화합물 또는 제 11 항 내지 제 14 항 중 어느 한 항에 따른 혼합물이 방출층에서 인광 방출체용 매트릭스 재료로 채택되는 것을 특징으로 하는 전자 디바이스.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 발명은 화학식 (1) 의 화합물, 전자 디바이스에서의 화합물의 용도, 및 화학식 (1) 의 화합물을 포함하는 전자 디바이스에 관한 것이다. 본 발명은 또한 화학식 (1) 의 화합물의 제조 방법 및 화학식 (1) 의 하나 이상의 화합물을 포함하는 포물레이션에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0002] 유기 반도체가 기능적 재료로서 이용되는 유기 전계발광 디바이스 (OLED) 의 구조는 예를 들어 US 4539507 에 기재되어 있다. 여기에 채용된 방출 재료는 매우 자주 인광을 발하는 유기금속 착물이다. 양자 역학적인 이유로, 형광 방출체 대신에 인광 방출체를 사용하여 효율이 4 배까지 증가할 수 있다. 그러나 일반적으로, OLED 의 경우, 특히 또한 삼중항 방출을 발하는 (인광) OLED 의 경우, 예를 들어 효율, 작동 전압 및 수명에 대한 개선이 아직 필요하다.

[0003] 인광 OLED 의 특성은 삼중항 방출체 뿐만 아니라 OLED 에서 삼중항 방출체와 함께 사용되는 다른 재료, 이를테면 호스트 재료라고도 불리는, 매트릭스 재료에 의해서도 결정된다. 따라서, 이들 재료 및 이들의 전하 수송 특성의 개선은 또한 OLED 특성에서의 현저한 개선을 낳을 수 있다.

[0004] 따라서, 인광 방출체를 포함하는 방출 층에서 매트릭스 재료의 선택은 특히 효율면에서 OLED 특성에 큰 영향을 미친다. 매트릭스 재료는 에너지 전달에 의해 방출체 분자의 여기 상태의 켄칭 (quenching) 을 제한한다.

**발명의 내용**

[0005] 본 발명의 목적은 OLED 에서, 특히 인광 방출체를 위한 매트릭스 재료로서 사용하기에 적합한 화합물의 제공이다. 본 발명의 추가 목적은 당업자가 OLED 의 제조를 위한 재료를 더 많이 선택할 수 있도록 유기 전계발광 디바이스용 유기 반도체를 더 제공하는 것이다.

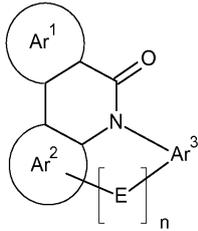
[0006] 락탐 유도체를 포함하는 화합물 및 OLED에서의 이들의 용도는 선행 기술로부터 알려져 있다 (예를 들어 WO 2011/137951 및 WO 2013/064206).

[0007] 놀랍게도, 트리페닐렌 유도체와 결합된 락탐 유도체를 함유하는 특정 화합물은 OLED에 채용될 때, 특히 인광 방

출체용 매트릭스 재료로 채용될 때 우수한 특성을 나타낸다는 것이 이제 밝혀졌다. 사실은, 이들 화합물은 수명 및/또는 효율 및/또는 전계발광 방출 측면에서 OLED 가 매우 우수한 특성을 나타내게 한다. 또한, 이들 화합물은 높은 유리 전이 온도 및 우수한 열 안정성을 갖는데, 이는 특히 재료가 진공 공정을 통해 증착 (vapor-deposit) 될 때 OLED 재료에 중요한 특성이다. 또한, 하기 기재된 트리페닐렌 유도체 및 화합물과 조합된 락탐 유도체를 함유하는 화합물의 특정 혼합물이 OLED 제조에 특히 적합한 혼합물을 생성한다는 것이 밝혀졌다.

[0008] 따라서 본 발명은 이러한 화합물 및 이러한 유형의 화합물을 포함하는 전자 디바이스, 특히 유기 전계발광 디바이스에 관한 것이다. 본 발명은 또한 이 혼합물을 포함하는 혼합물 및 포물레이션에 관한 것이다.

[0009] 본 발명은 하기 화학식 (1) 의 화합물에 관한 것이고,



화학식 (1)

[0010]

식에서 사용한 심볼 및 인덱스에 하기의 것이 적용되고:

[0011]

[0012] Ar<sup>1</sup> 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R<sup>1</sup> 에 의해 치환될 수 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내고;

[0012]

[0013] Ar<sup>2</sup> 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R<sup>2</sup> 에 의해 치환될 수 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내고;

[0013]

[0014] Ar<sup>3</sup> 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R<sup>3</sup> 에 의해 치환될 수 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내고;

[0014]

[0015] -E- 는 단일 결합, -B(R<sup>0</sup>)-, -C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-, -Si(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-, -C(=O)-, -C(=NR<sup>0</sup>)-, -C(=C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>)-, -O-, -S-, -S(=O)-, -S(O<sub>2</sub>)-, -N(R<sup>0</sup>)-, -P(R<sup>0</sup>)- 및 -P(=O)R<sup>0</sup>- 으로부터 선택되고;

[0015]

[0016] R<sup>0</sup>, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CHO, CN, N(Ar)<sub>2</sub>, C(=O)Ar, P(=O)(Ar)<sub>2</sub>, S(=O)Ar, S(=O)<sub>2</sub>Ar, NO<sub>2</sub>, Si(R)<sub>3</sub>, B(OR)<sub>2</sub>, OSO<sub>2</sub>R, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있고, 여기서 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH<sub>2</sub> 기는 RC=CR, C≡C, Si(R)<sub>2</sub>, Ge(R)<sub>2</sub>, Sn(R)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, P(=O)(R), SO, SO<sub>2</sub>, O, S 또는 CONR 로 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO<sub>2</sub> 로 대체될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 기를 나타내고; 여기서 2 개의 라디칼 R<sup>0</sup>, 2개의 라디칼 R<sup>1</sup>, 2개의 라디칼 R<sup>2</sup> 및/또는 2개의 라디칼 R<sup>3</sup> 은, 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 단환 또는 다환의 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 함께 형성할 수도 있고;

[0016]

[0017] R 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CHO, CN, N(Ar)<sub>2</sub>, C(=O)Ar, P(=O)(Ar)<sub>2</sub>, S(=O)Ar, S(=O)<sub>2</sub>Ar, NO<sub>2</sub>, Si(R')<sub>3</sub>, B(OR')<sub>2</sub>, OSO<sub>2</sub>R', 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기, 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R' 에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH<sub>2</sub> 기는

[0017]

$R'C=CR'$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R')_2$ ,  $Ge(R')_2$ ,  $Sn(R')_2$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=Se$ ,  $P(=O)(R')$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $CONR'$  에 의해 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는  $NO_2$ 에 의해 대체될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R' 에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로 방향족 고리 시스템, 또는 하나 이상의 라디칼 R' 에 의해 치환될 수 있는, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 기를 나타내고, 여기서 2 개의 라디칼 R 은 하나 이상의 라디칼 R' 에 의해 치환될 수도 있는, 고리 시스템을 함께 형성할 수도 있고;

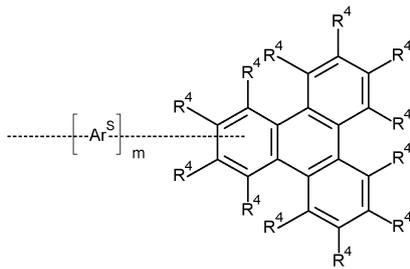
[0018] Ar 은 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R' 에 의해 또한 치환될 수도 있는, 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고;

[0019] R' 은 각각의 경우, 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기, 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (각 경우에 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는 SO,  $SO_2$ , O, S 로 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br 또는 I 로 대체될 수도 있음), 또는 5 내지 24 개의 탄소 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내고;

[0020] n 은 0 또는 1이고; n 이 0 일 때, 기 -E-는 부재하고;

[0021] 적어도 하나의 기  $Ar^3$ ,  $R^1$ ,  $R^2$  또는  $R^3$  은

[0022] 화학식 (T) 의 트리페닐렌 유도체를 나타내고,



화학식 (T)

[0023] 식에서 점선 결합은 화학식 (1) 의 구조에 대한 결합을 나타내고;

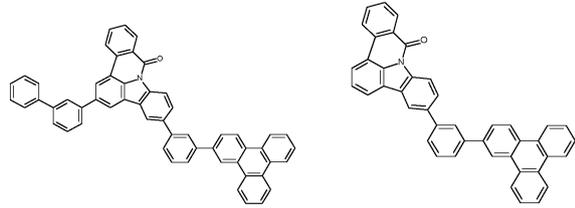
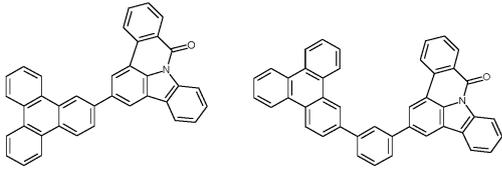
[0025]  $R^4$  는  $Ar^S$  에 대한 결합 위치에서 C 이거나 또는  $R^4$  는 m이 0 인 경우 화학식 (1)의 구조에 대한 결합 위치에서 C 이고;

[0026] 그리고 다른 위치에서,  $R^4$  는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 H, D, F, Cl, Br, I, CHO, CN,  $N(Ar)_2$ ,  $C(=O)Ar$ ,  $P(=O)(Ar)_2$ ,  $S(=O)Ar$ ,  $S(=O)_2Ar$ ,  $NO_2$ ,  $Si(R)_3$ ,  $B(OR)_2$ ,  $OSO_2R$ , 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있고, 여기서 각 경우에 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는  $RC=CR$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R)_2$ ,  $Ge(R)_2$ ,  $Sn(R)_2$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=Se$ ,  $P(=O)(R)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ , O, S 또는  $CONR$  로 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는  $NO_2$  로 대체될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 또는 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기를 나타내고, 여기서 2 개의 라디칼  $R^4$  는 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수도 있는, 단환 또는 다환의 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성할 수도 있고;

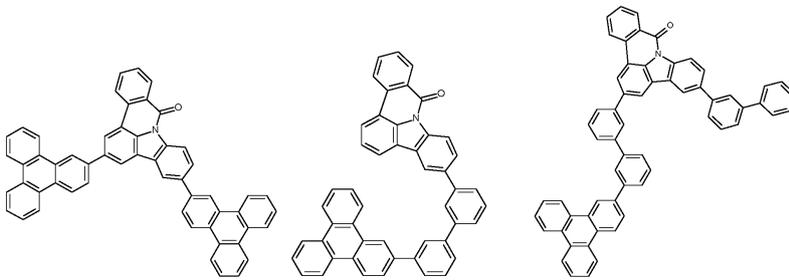
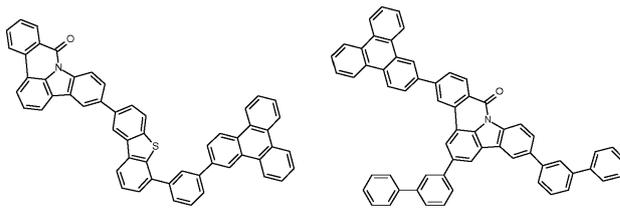
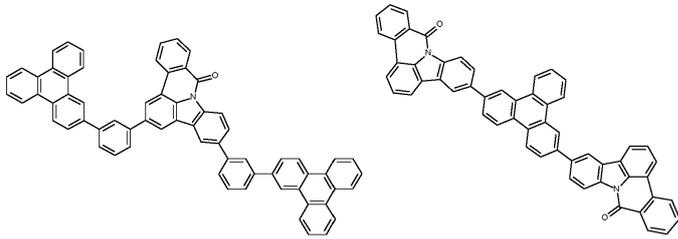
[0027]  $Ar^S$  는 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 또한 치환될 수도 있는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고;

[0028] m 은 0, 1, 2, 3 또는 4 로부터 선택되는 정수이고;

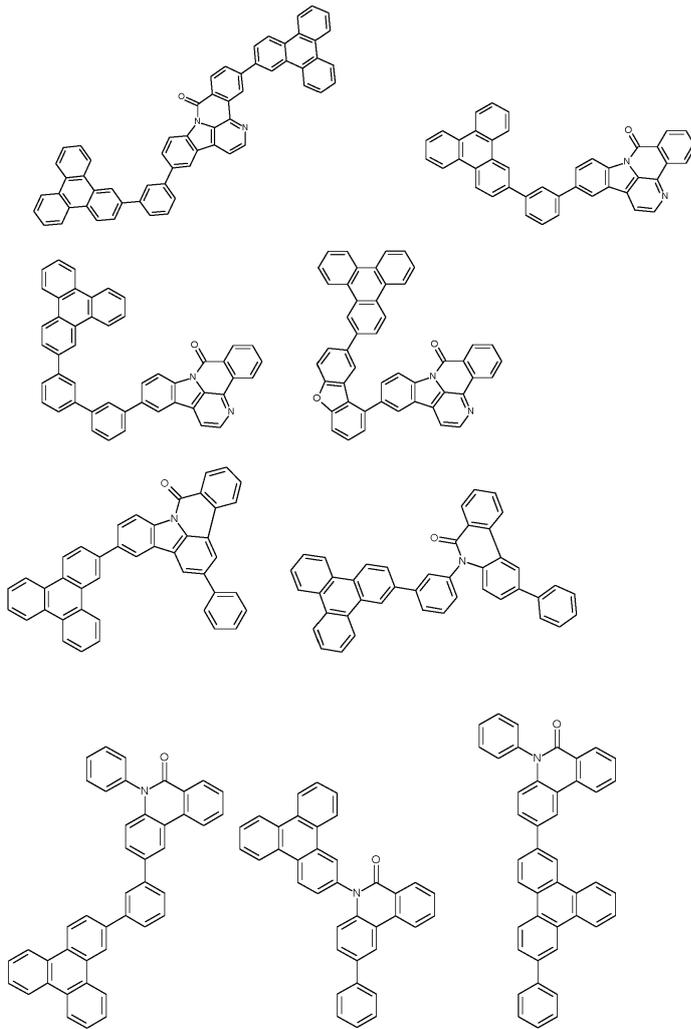
[0029] 하기 화합물들은 제외된다:



[0030]



[0031]



[0032]

[0033] 본 발명의 의미에서 인접 치환기는 서로에 직접 연결된 탄소 원자에 결합되거나 동일한 탄소 원자에 결합되는 치환기이다.

[0034] 더욱이, 본 출원의 목적에 하기 화학 기의 정의가 적용된다:

[0035] 본 발명의 의미에서 아릴 기는 6 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 함유하며; 본 발명의 의미에서 헤테로아릴 기는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 함유하며, 방향족 고리 원자의 적어도 하나는 헤테로원자이다. 헤테로원자는 바람직하게 N, O 및 S 에서 선택된다. 이는 기본 정의를 나타낸다. 다른 바람직한 것이 본 발명의 설명에 표시되는 경우, 예를 들어 존재하는 방향족 고리 원자 또는 헤테로원자의 수와 관련하여, 이들을 적용한다.

[0036] 여기서 아릴기 또는 헤테로아릴기는 단순 방향족 고리, 즉 벤젠, 또는 단순 헤테로방향족 고리, 예를 들어 피리딘, 피리미딘 또는 티오펜, 또는 축합 (어닐레이트된 (annellated)) 방향족 또는 헤테로방향족 다환, 예를 들어 나프탈렌, 페난트렌, 퀴놀린 또는 카르바졸을 의미하는 것으로 이해된다. 축합된 (어닐레이트된) 방향족 또는 헤테로방향족 다환은 본 출원의 의미에서 서로 축합된 2 개 이상의 단순 방향족 또는 헤테로방향족 고리로 이루어진다.

[0037] 각각의 경우에 상기 언급된 라디칼에 의해 치환될 수 있고 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템에 임의의 원하는 위치를 통해 연결될 수 있는 아릴 또는 헤테로아릴 기는, 특히 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 피렌, 디히드로피렌, 크리센, 페릴렌, 트리페닐렌, 플루오란텐, 벤즈안트라센, 벤조페난트렌, 테트라센, 펜타센, 벤조피렌, 푸란, 벤조푸란, 이소벤조푸란, 디벤조푸란, 티오펜, 벤조티오펜, 이소벤조티오펜, 디벤조티오펜, 피롤, 인돌, 이소인돌, 카르바졸, 피리딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 아크리딘, 페난트리딘, 벤조-5,6-퀴놀린, 벤조-6,7-퀴놀린, 벤조-7,8-퀴놀린, 페노티아진, 페녹사진, 피라졸, 인다졸, 이미다졸, 벤즈이미다졸, 나프티미다졸, 페난트리미다졸, 피리디미다졸, 피라진이미다졸, 퀴녹살린이미다졸, 옥사졸, 벤족사졸, 나프톡사졸, 안

트록사졸, 페난트록사졸, 이속사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴녹살린, 피라진, 페나진, 나프티리딘, 아자카르바졸, 벤조카르볼린, 페난트롤린, 1,2,3-트리아졸, 1,2,4-트리아졸, 벤조트리아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아졸, 1,2,5-옥사디아졸, 1,3,4-옥사디아졸, 1,2,3-티아디아졸, 1,2,4-티아디아졸, 1,2,5-티아디아졸, 1,3,4-티아디아졸, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 1,2,3-트리아진, 테트라졸, 1,2,4,5-테트라진, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,3,5-테트라진, 퓨린, 프테리딘, 인돌리진 및 벤조티아디아졸로부터 유도되는 기를 의미하는 것으로 이해된다.

[0038] 본 발명의 정의에 따른 아릴옥시기는 산소 원자를 통해 결합되는, 위에 정의된 바와 같은, 아릴기를 의미하는 것으로 이해된다. 유사한 정의는 헤테로아릴옥시 기에도 적용된다.

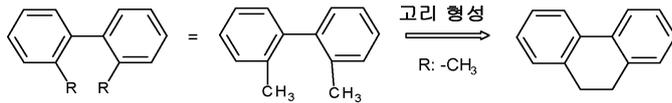
[0039] 본 발명의 의미에서 방향족 고리 시스템은 고리 시스템 내에 6 내지 60 개의 탄소 원자를 함유한다. 본 발명의 의미에서 헤테로방향족 고리 시스템은 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 함유하고, 방향족 고리 원자의 적어도 하나는 헤테로원자이다. 헤테로원자는 바람직하게는 N, O 및/또는 S 에서 선택된다. 본 발명의 맥락에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은, 반드시 아릴 또는 헤테로아릴기만을 함유하지 않고, 대신에, 추가로, 복수의 아릴 또는 헤테로아릴 기가 비방향족 단위 (바람직하게는 H 이외의 10% 미만의 원자), 이를테면 예를 들어,  $sp^3$ -혼성화된 C, Si, N 또는 O 원자,  $sp^2$ -혼성화된 C 또는 N 원자 또는  $sp$ -혼성화된 탄소 원자에 의해 연결될 수 있는 시스템을 의미하는 것으로 의도된다. 따라서, 예를 들어 9,9'-스피로비플루오렌, 9,9'-디아릴플루오렌, 트리아릴아민, 디아릴 에테르, 스틸벤 등과 같은 시스템은 또한, 2 개 이상의 아릴기가 예를 들어 선형 또는 환형 알킬, 알케닐 또는 알킬닐기에 의해, 또는 실릴기에 의해 연결되는 시스템과 같이, 본 발명의 맥락에서 방향족 고리 시스템으로 받아들여지도록 의도된다. 또한, 2개 이상의 아릴 또는 헤테로아릴기가 단일 결합을 통해 서로 연결되는 시스템은 또한 본 발명의 맥락에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 이를테면 예를 들어, 비페닐, 테르페닐 또는 디페닐트리아진과 같은 시스템인 것으로 받아들여진다.

[0040] 또한 각각의 경우에 위에 정의된 바와 같은 라디칼에 의해 치환될 수도 있으며 임의의 원하는 위치를 통해 방향족 또는 헤테로방향족기에 연결될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 특히, 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센, 페난트렌, 벤조페난트렌, 피렌, 크리센, 페릴렌, 플루오란텐, 나프다센, 펜타센, 벤조피렌, 비페닐, 비페닐렌, 테르페닐, 테르페닐렌, 쿼터페닐, 플루오렌, 스피로비플루오렌, 디히드로페난트렌, 디히드로피렌, 테트라히드로피렌, 시스-또는 트랜스-인덴노플루오렌, 트록센, 이소트록센, 스피로트록센, 스피로이소트록센, 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, 나프트이미다졸, 페난트르이미다졸, 피리디미다졸, 피라진이미다졸, 퀴녹살린이미다졸, 옥사졸, 벤즈옥사졸, 나프트옥사졸, 안트르옥사졸, 페난트르옥사졸, 이소옥사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴녹살린, 1,5-디아자안트라센, 2,7-디아자피렌, 2,3-디아자피렌, 1,6-디아자피렌, 1,8-디아자피렌, 4,5-디아자피렌, 4,5,9,10-테트라아자페틸렌, 피라진, 페나진, 페녹사진, 페노티아진, 플루오루빈, 나프티리딘, 아자카르바졸, 벤조카르볼린, 페난트롤린, 1,2,3-트리아졸, 1,2,4-트리아졸, 벤조트리아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아졸, 1,2,5-옥사디아졸, 1,3,4-옥사디아졸, 1,2,3-티아디아졸, 1,2,4-티아디아졸, 1,2,5-티아디아졸, 1,3,4-티아디아졸, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 1,2,3-트리아진, 테트라졸, 1,2,4,5-테트라진, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,3,5-테트라진, 퓨린, 프테리딘, 인돌리진 및 벤조티아디아졸에서 유래된 기, 또는 이들 기의 조합을 의미한다.

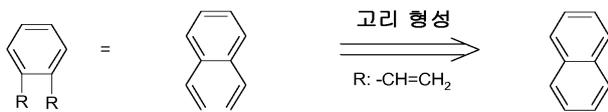
[0041] 본 발명의 목적을 위해, 또한 개개의 H 원자 또는  $CH_2$  기가 라디칼의 정의하에 위에 언급된 기에 의해 치환될 수도 있는, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기, 또는 2 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알킬닐기는 바람직하게는, 라디칼 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, s-부틸, t-부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, s-펜틸, 시클로펜틸, 네오펀틸, n-헥실, 시클로헥실, 네오헥실, n-헵틸, 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 옥티닐을 의미하는 것으로 받아들여진다. 1 내지 40 개의 탄소 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, 시클로

옥틸티오, 2-에틸헥실티오, 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 의미한다.

[0042] 2 개의 라디칼이 함께 고리를 형성할 수도 있는 포물레이션은, 본 출원의 목적을 위해, 특히 2 개의 라디칼이 화학 결합에 의해 서로 연결된다는 것을 의미하는 것으로 이해된다. 이것은 다음 스킴으로 설명된다:

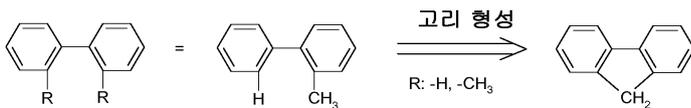


[0043]



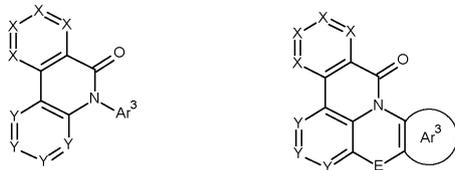
[0044]

[0045] 더욱이, 상술된 포물레이션은 또한, 2 개의 라디칼 중 하나가 수소를 나타내는 경우에, 수소 원자가 결합된 위치에 제 2 라디칼이 결합되어 고리를 형성하는 것을 의미하는 것으로 의도된다. 이것은 다음 스킴으로 설명된다:



[0046]

[0047] 바람직하게, 화학식 (1)의 화합물은 화학식 (1A) 또는 (1B)의 화합물로부터 선택되며,



[0048]

[0049] 식에서

[0050] 기호 -E- 는 상기와 동일한 의미를 가지며;

[0051] X 는 CR<sup>1</sup> 또는 N 이고;

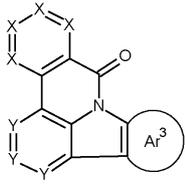
[0052] Y 는 CR<sup>2</sup> 또는 N 이고;

[0053] 식에서 기호 R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup> 는 상기와 동일한 의미를 가지며; 그리고

[0054] Ar<sup>3</sup> 은 상기와 동일한 의미를 가지며, 다만 화학식 (1B)에서, Ar<sup>3</sup> 은 화학식 (1B)에 나타난 바와 같이 2 개의 인접한 탄소 원자를 통해 기 -E- 및 원자 N에 연결되고;

[0055] 화학식 (1A)의 화합물에서, 적어도 하나의 기 Ar<sup>3</sup>, R<sup>1</sup> 또는 R<sup>2</sup> 는 화학식 (T)의 트리페닐렌 유도체를 나타내고, 화학식 (1B)의 화합물에서 적어도 하나의 기 R<sup>1</sup> 또는 R<sup>2</sup> 는 화학식 (T)의 트리페닐렌 유도체를 나타내는 것을 특징으로 한다.

[0056] 본 발명에 따르면, 기 -E- 가 단일 결합인 경우, 화학식 (1B)의 화합물은 화학식 (1B-E)의 화합물에 상응하고,



화학식 (1B-E)

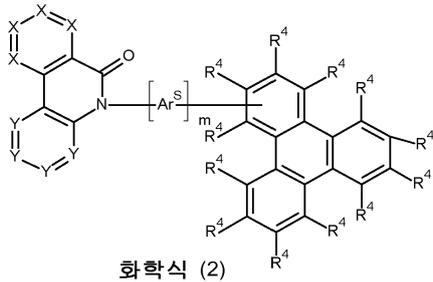
[0057]

[0058]

여기서 기호 및 인덱스는 상기와 동일한 의미를 갖는다.

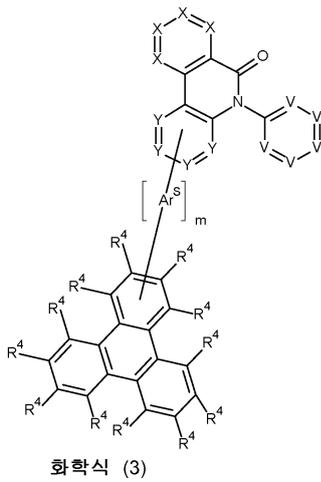
[0059]

보다 바람직하게, 화학식 (1)의 화합물은 화학식 (2), (3), (4), (5), (6) 또는 (7)의 화합물로부터 선택되며,

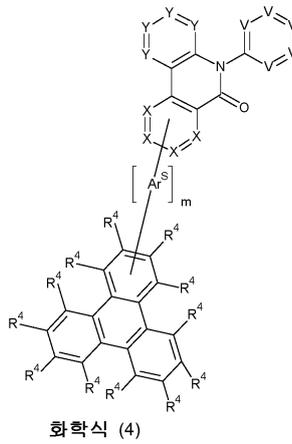


화학식 (2)

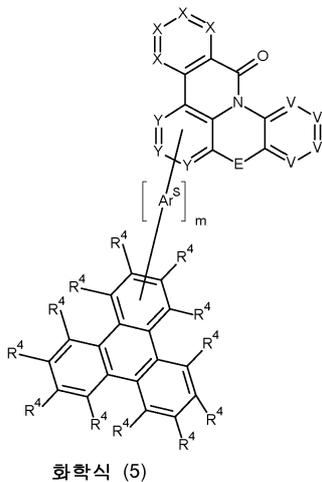
[0060]



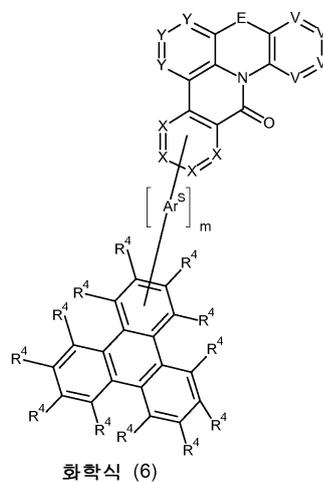
화학식 (3)



화학식 (4)

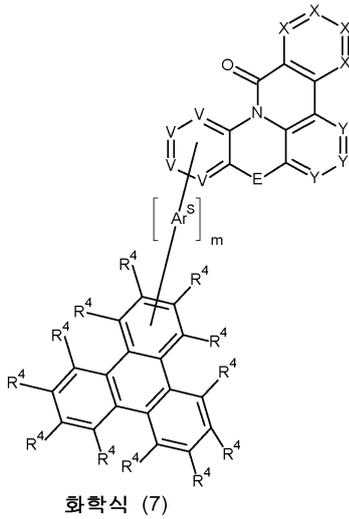


화학식 (5)



화학식 (6)

[0061]



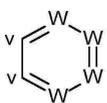
[0062]

[0063] 식에서 기호 및 인덱스 E, R<sup>4</sup>, Ar<sup>S</sup> 및 m 은 상기와 동일한 의미를 갖고; 그리고

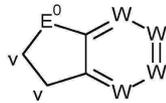
[0064] X 는 CR<sup>1</sup> 또는 N이고, 다만 X 는 Ar<sup>S</sup> 에 대한 결합 위치에서, 또는 m이 0이고 Ar<sup>S</sup> 가 부재인 경우 화학식 (4) 및 (6)의 트리페닐렌 기에 대한 결합 위치에서 C 이고;

[0065] Y 는 CR<sup>2</sup> 또는 N이고, 다만 Y 는 Ar<sup>S</sup> 에 대한 결합 위치에서, 또는 m이 0이고 Ar<sup>S</sup> 가 부재인 경우 화학식 (3) 및 (5)의 트리페닐렌 기에 대한 결합 위치에서 C 이고;

[0066] V 는 CR<sup>3</sup> 또는 N 이고, 다만 V 는 Ar<sup>S</sup> 에 대한 결합 위치에서, 또는 m이 0이고 Ar<sup>S</sup> 가 부재인 경우 화학식 (7)의 트리페닐렌 기에 대한 결합 위치에서 C 이거나; 또는 2 개의 인접한 기 V 는 화학식 (V-1) 또는 (V-2)의 기를 나타내고,



**화학식 (V-1)**



**화학식 (V-2)**

[0067]

[0068] 식에서 기호 V 는 화학식 (2) 내지 (7)에서 상응하는 인접 기 V를 나타내며;

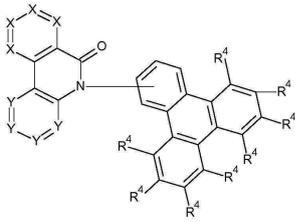
[0069] E<sup>0</sup> 는 -C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-, -Si(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-, -C(=O)-, -C(=NR<sup>0</sup>)-, -C(=C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>)-, -O-, -S-, -S(=O)-, -S(O<sub>2</sub>)-, -N(R<sup>0</sup>)-, -P(R<sup>0</sup>)- 또는 -P((=O)R<sup>0</sup>)- 를 나타내고, 바람직하게는 -C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-, -O-, -S-, 또는 -N(R<sup>0</sup>)- 를 나타내며; 여기서 R<sup>0</sup> 는 상기와 동일한 의미를 가지며;

[0070] W 는 CR 또는 N을 나타낸다.

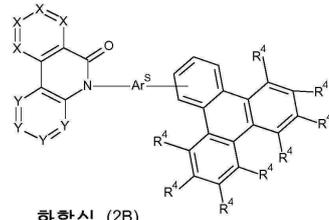
[0071] 바람직한 실시형태에 따라, 인덱스 m 은 0 또는 1 이다. m 이 0 인 경우, 기 Ar<sup>S</sup> 는 부재하고 기 -(Ar<sup>S</sup>)<sub>0</sub>- 는 단일 결합에 상응한다.

[0072] 바람직한 실시형태에 따르면, 기 X 를 포함하는 6 원 고리에서 N을 나타내는 기 X 는 0 또는 1 개 있고, 기 Y 를 포함하는 6 원 고리에서 N을 나타내는 기 Y 는 0 또는 1 개 있으며, 그리고 기 V 를 포함하는 6 원 고리에서 기 V 는 0 또는 1 개 있다.

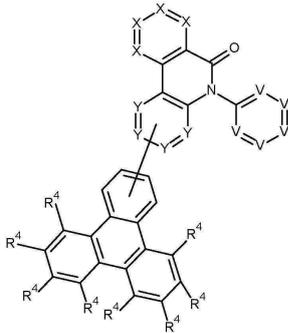
[0073] 특히 바람직하게, 화학식 (1) 의 화합물은 화학식 (2A) 내지 (7B) 의 화합물로부터 선택되며,



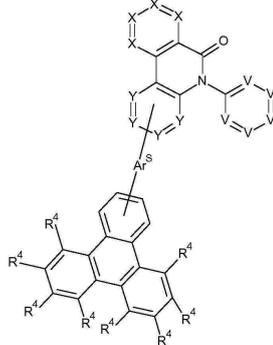
화학식 (2A)



화학식 (2B)

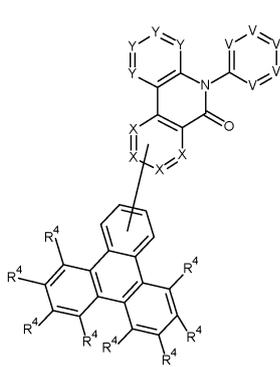


화학식 (3A)

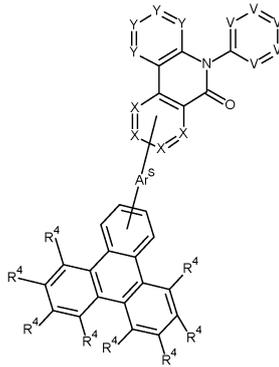


화학식 (3B)

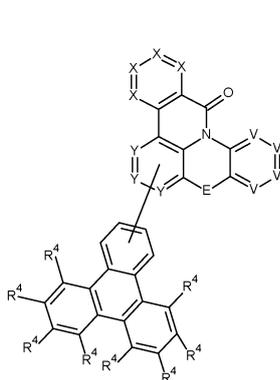
[0074]



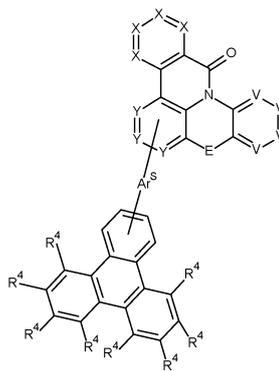
화학식 (4A)



화학식 (4B)

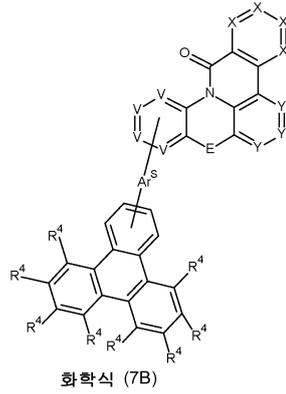
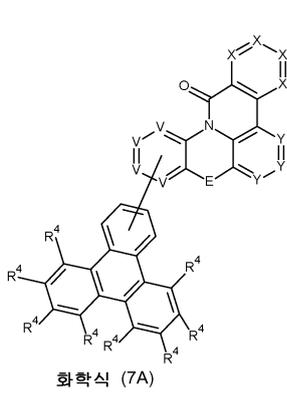
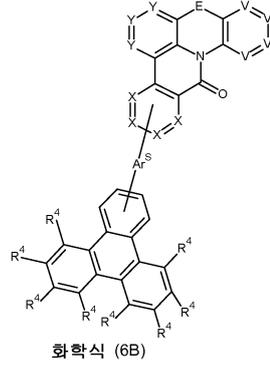
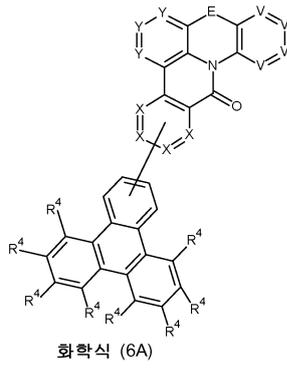


화학식 (5A)



화학식 (5B)

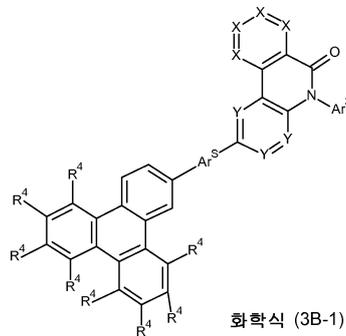
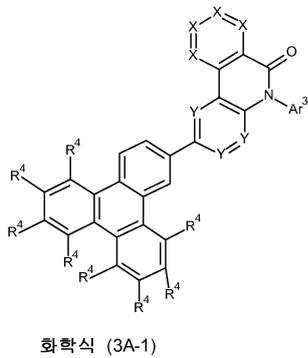
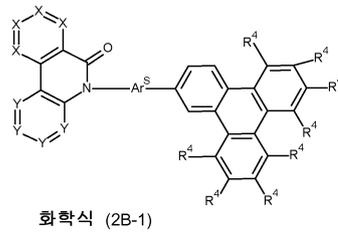
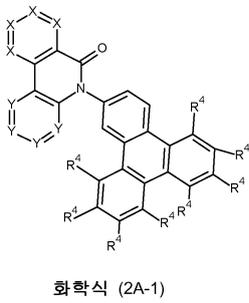
[0075]



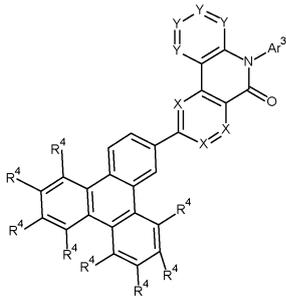
[0076]

[0077] 식에서 기호 -E-, Ar<sup>S</sup>, R<sup>4</sup>, X, Y 및 V 는 상기와 동일한 의미를 갖는다.

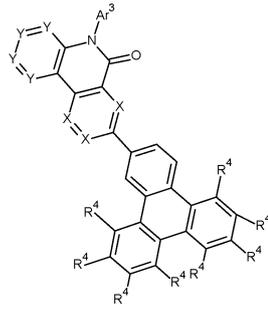
[0078] 매우 특히 바람직하게, 화학식 (1) 의 화합물은 화학식 (2A-1) 내지 (7B-1) 의 화합물로부터 선택되고,



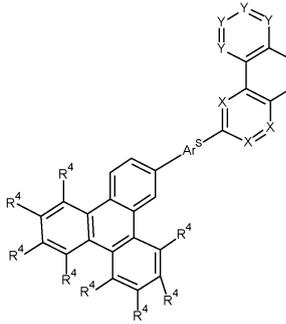
[0079]



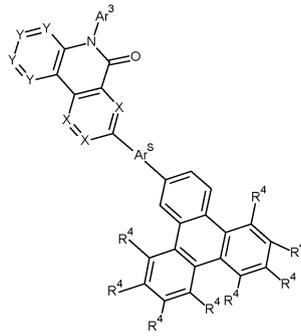
화학식 (4A-1)



화학식 (4A-2)

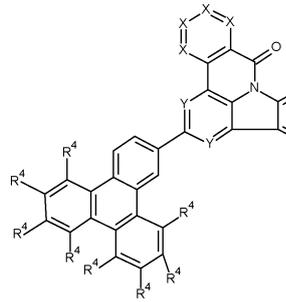


화학식 (4B-1)

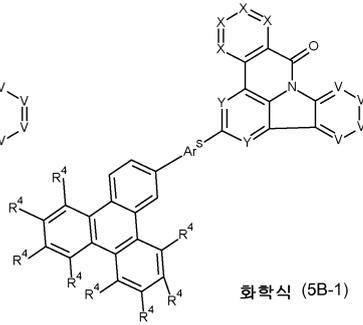


화학식 (4B-2)

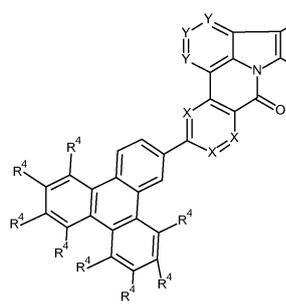
[0080]



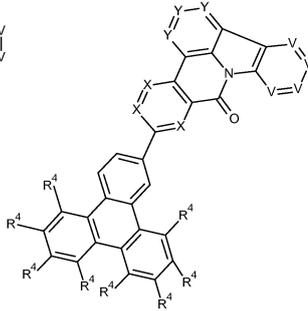
화학식 (5A-1)



화학식 (5B-1)

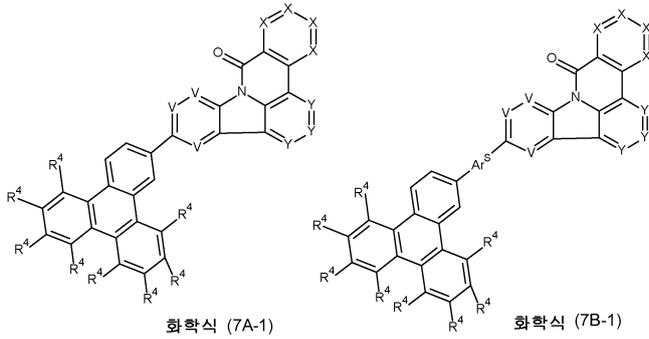
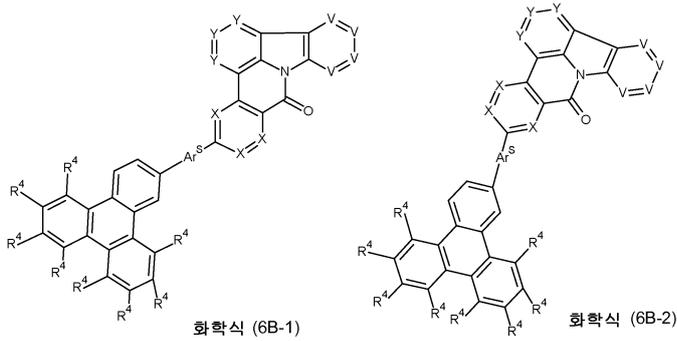


화학식 (6A-1)



화학식 (6A-2)

[0081]



[0082]

[0083]

[0084]

[0085]

[0086]

[0087]

[0088]

식에서 기호 E, X, Y 및 V 는 상기와 동일한 의미를 갖는다.

바람직한 실시형태에 따라, -E- 는 단일 결합,  $-C(R^0)_2-$ ,  $-O-$ ,  $-S-$  및  $-N(R^0)-$  로부터 선택된다. 보다 바람직하게는, -E-는 단일 결합,  $-O-$  또는  $-S-$ 에서 선택된다. 특히 바람직하게는, -E- 는 단일 결합이다.

바람직하게,  $Ar^S$  는 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 또한 치환될 수도 있는, 5 내지 40 개, 보다 바람직하게는 5 내지 30 개, 특히 바람직하게는 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고; 그리고

더 바람직하게는, 기  $Ar^S$  는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 페닐, 비페닐, 플루오렌, 스피로비플루오렌, 나프탈렌, 페난트렌, 안트라센, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 카르바졸, 피리딘, 피리미딘, 피라진, 피리다진, 트리아진, 벤조피리딘, 벤조피리다진, 벤조피리미딘 및 퀴나졸린을 나타내고, 그 각각은 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수 있다.

매우 바람직한 실시형태에 따르면, 기  $Ar^S$  는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 페닐, 비페닐, 플루오렌, 나프탈렌, 디벤조푸렌, 디벤조티오펜 및 카르바졸을 나타내고, 그 각각은 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수 있다.

적합한 기  $Ar^S$  의 예는 하기 표에 나타난 화학식 ( $Ar^S$ -1) 내지 ( $Ar^S$ -22) 의 기이고:

Ar <sup>S</sup> -1	Ar <sup>S</sup> -2	Ar <sup>S</sup> -3
Ar <sup>S</sup> -4	Ar <sup>S</sup> -5	Ar <sup>S</sup> -6

[0089]

Ar <sup>S</sup> -7	Ar <sup>S</sup> -8	Ar <sup>S</sup> -9
Ar <sup>S</sup> -10	Ar <sup>S</sup> -11	Ar <sup>S</sup> -12
Ar <sup>S</sup> -13	Ar <sup>S</sup> -14	Ar <sup>S</sup> -15
Ar <sup>S</sup> -16	Ar <sup>S</sup> -17	Ar <sup>S</sup> -18
Ar <sup>S</sup> -19	Ar <sup>S</sup> -20	Ar <sup>S</sup> -21

[0090]

Ar <sup>S</sup> -22		

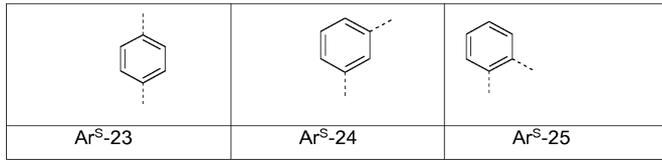
[0091]

[0092] 식에서, 점선 결합은 화학식 (1) 의 구조에 대한 결합 및 트리페닐렌 유도체에 대한 결합을 나타내고, 기 (Ar<sup>S</sup>-1) 내지 (Ar<sup>S</sup>-22) 는 기 R 에 의해 각각의 자유 위치에서 치환될 수 있고;

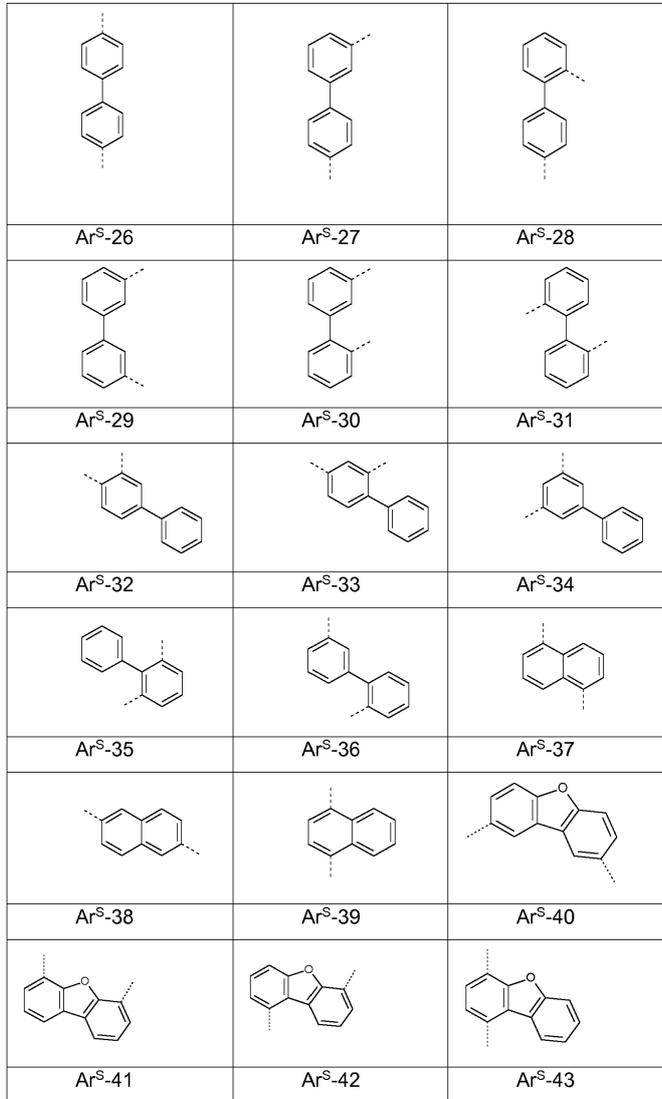
[0093]

R<sup>N</sup>, R<sup>C</sup> 는 화학식 (Ar<sup>S</sup>-13) 내지 (Ar<sup>S</sup>-16) 에서, 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CN, 1 내지 40 개, 바람직하게는 1 내지 20 개, 보다 바람직하게는 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시기, 또는 3 내지 40 개, 바람직하게는 3 내지 20 개, 더욱 바람직하게는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R로 치환될 수 있으며, 여기서 하나 이상의 비인접 CH<sub>2</sub> 기는 (R)C=C(R), C≡C, O 또는 S로 대체될 수 있으며, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO<sub>2</sub> 로 대체될 수 있음), 또는 5 내지 60 개, 바람직하게는 5 내지 40 개, 더욱 바람직하게는 5 내지 30 개, 매우 더 바람직하게는 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이들은 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R로 치환될 수 있으며, 여기서 임의로 2 개의 인접한 치환기 R<sup>C</sup> 는 단환 또는 다환의 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 함께 형성할 수 있음) 이다.

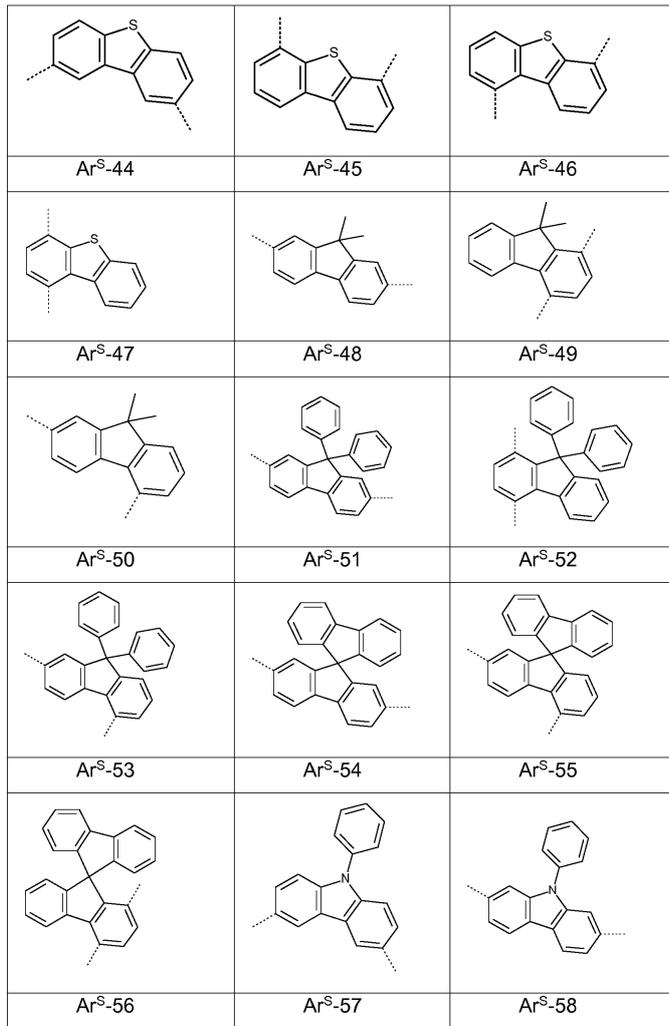
[0094] 매우 적합한 기  $Ar^S$  의 예는 하기 표에 나타낸 화학식 ( $Ar^S$ -23) 내지 ( $Ar^S$ -67) 의 기이고:



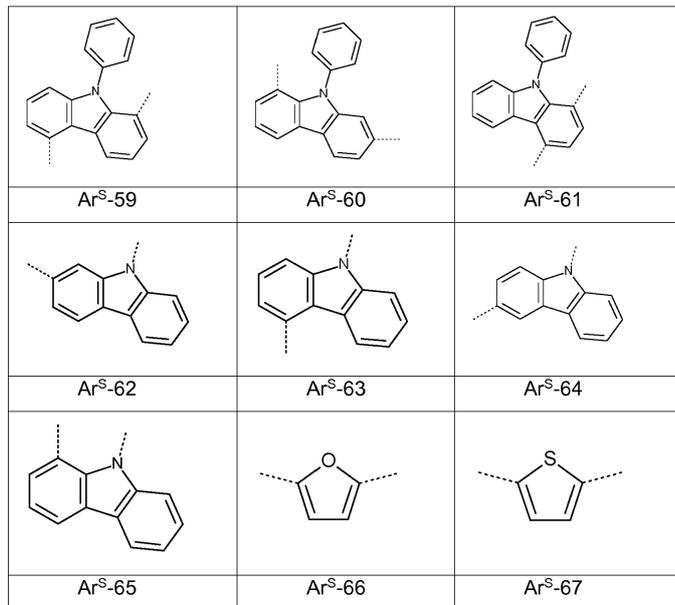
[0095]



[0096]



[0097]



[0098]

[0099]

식에서 점선 결합은 화학식 (1) 의 구조에 대한 결합 및 트리페닐렌 유도체에 대한 결합을 나타내고, 기 (Ar<sup>S</sup>-23) 내지 (Ar<sup>S</sup>-67) 는 기 R 에 의해 각각의 자유 위치에서 치환될 수 있다.

[0100]

바람직하게, R<sup>0</sup> 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알

킬기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수 있고, 여기서 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH<sub>2</sub> 기는 RC=CR, C≡C, O 또는 S로 대체될 수 있으며, 여기서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO<sub>2</sub> 로 대체될 수 있음), 5 내지 40 개, 바람직하게는 5 내지 30 개, 더욱 바람직하게는 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이들은 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수 있음), 또는 5 내지 40 개, 바람직하게는 5 내지 30 개, 보다 바람직하게는 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기 (이들은 하나 이상의 라디칼 R로 치환될 수 있음) 이고, 여기서 2 개의 라디칼 R<sup>0</sup> 는 하나 이상의 라디칼 R로 치환될 수 있는 단환 또는 다환의 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 함께 형성할 수 있다. 보다 바람직하게, R<sup>0</sup> 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수 있음), 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수 있음) 이고, 여기서 2 개의 라디칼 R<sup>0</sup> 은 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수도 있는 단환 또는 다환의 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 함께 형성할 수도 있다.

[0101] 바람직하게, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> 은 각각의 경우에, 동일하거나 상이하게, H, D, F, CN, Si(R)<sub>3</sub>, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼들 R로 치환될 수 있고, 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH<sub>2</sub> 기는 RC=CR, C≡C, O 또는 S로 대체될 수 있으며, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO<sub>2</sub> 로 대체될 수 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R로 치환될 수 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 또는 하나 이상의 라디칼 R로 치환될 수 있는, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기를 나타내고, 여기서 2 개의 라디칼 R<sup>1</sup>, 2 개의 라디칼 R<sup>2</sup> 및/또는 2 개의 라디칼 R<sup>3</sup> 은 하나 이상의 라디칼 R로 치환될 수 있는 단환 또는 다환의 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성할 수 있다. 보다 바람직하게, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, CN, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수 있음), 또는 5 내지 60 개, 바람직하게는 5 내지 40 개, 보다 바람직하게는 5 내지 30 개, 매우 바람직하게는 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수 있음) 이고, 여기서 2 개의 라디칼 R<sup>1</sup>, 2 개의 라디칼 R<sup>2</sup> 및/또는 2 개의 라디칼 R<sup>3</sup> 은 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수도 있는 단환 또는 다환의 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 함께 형성할 수도 있다.

[0102] 기 R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup> 또는 R<sup>3</sup> 이 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내는 경우, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 바람직하게는 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센, 페난트렌, 트리페닐렌 (벤조페난트렌이라고도 함), 피렌, 크리센, 페릴렌, 플루오란텐, 나프타센, 펜타센, 벤조피렌, 비페닐, 비페닐렌, 터페닐, 터페닐렌, 쿼터페닐, 플루오렌, 스피로비플루오렌, 인데노플루오렌, 푸란, 벤조푸란, 디벤조푸란, 티오펜, 벤조티오펜, 디벤조티오펜, 피롤, 인돌, 이소인돌, 카르바졸, 인돌로카르바졸, 인데노카르바졸, 피리딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 아크리딘, 페난트리딘, 벤조퀴놀린, 페노티아진, 페녹사진, 이미다졸, 벤즈이미다졸, 나프티미다졸, 페난트리미다졸, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴놀살린, 피라진, 페나진, 페녹사진, 페노티아진, 아자카르바졸, 트리아진, 또는 이들 기의 조합으로부터 선택된다. 보다 바람직하게는, 기 R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup> 또는 R<sup>3</sup> 은 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내며, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 벤젠, 나프탈렌, 페난트렌, 트리페닐렌, 플루오란텐, 비페닐, 터페닐, 쿼터페닐, 플루오렌, 스피로비플루오렌, 인데노플루오렌, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 카르바졸, 인돌로카르바졸, 인데노카르바졸, 피리딘, 퀴놀린, 벤조퀴놀린, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴놀살린, 페녹사진, 페노티아진, 아자카르바졸, 트리아진 또는 이들 기의 조합을 나타낸다.

[0103] 바람직하게, R<sup>4</sup> 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, Si(R)<sub>3</sub>, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수 있고, 여기서 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH<sub>2</sub> 기는 RC=CR, C

=C, O 또는 S로 대체될 수 있으며, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO<sub>2</sub> 로 대체될 수 있음), 5 내지 60 개, 바람직하게는 5 내지 40 개, 더욱 바람직하게는 5 내지 30 개, 매우 보다 바람직하게는 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R에 의해 치환될 수 있음) 이고, 여기서 2 개의 라디칼 R<sup>4</sup> 는 하나 이상의 라디칼 R' 에 치환될 수 있는 단환 또는 다환의 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성할 수 있다. 보다 바람직하게, R<sup>4</sup> 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수 있음), 5 내지 60 개, 바람직하게는 5 내지 40 개, 보다 바람직하게는 5 내지 30 개, 매우 바람직하게는 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수 있음) 이고, 여기서 2 개의 라디칼 R<sup>4</sup> 은 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있는 단환 또는 다환의 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성할 수도 있다. 특히 바람직하게, R<sup>4</sup> 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 기, 또는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있음), 또는 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타낸다.

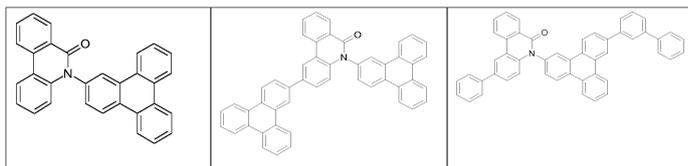
[0104] 바람직하게, R 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 기, 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R' 에 의해 치환될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R' 에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 40 개, 바람직하게는 5 내지 30 개, 보다 바람직하게는 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내며, 여기서 2 개의 라디칼은 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있는 고리 시스템을 함께 형성할 수 있다. 바람직하게, R 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, CN, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 기, 또는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R' 에 의해 치환될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R' 에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타낸다.

[0105] 바람직하게, Ar 은 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R' 에 의해 또한 치환될 수도 있는, 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이다.

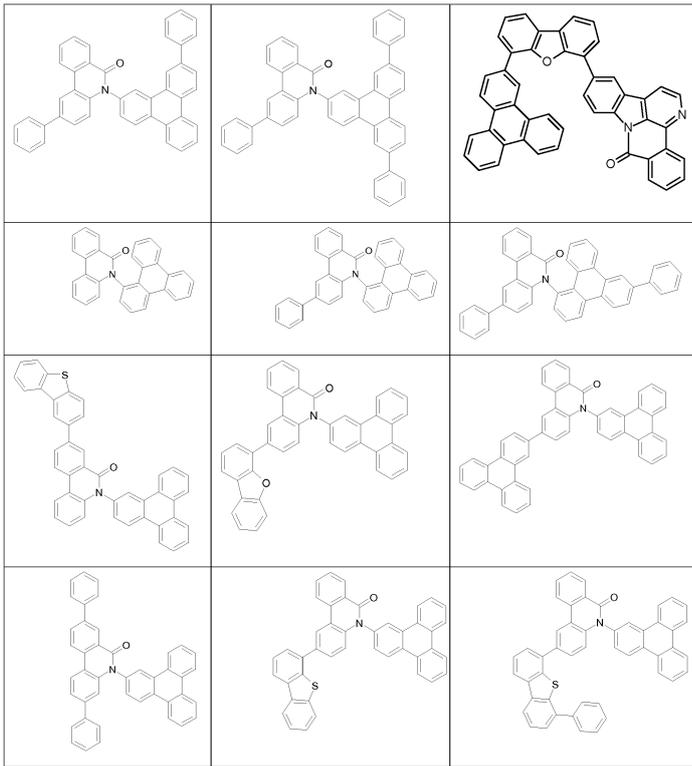
[0106] 바람직하게, R' 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, Cl, Br, I, CN, 1 내지 20 개, 바람직하게는 1 내지 10 개, 보다 바람직하게는 1 내지 5 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시기, 또는 3 내지 20 개, 바람직하게는 1 내지 10 개, 보다 바람직하게는 1 내지 5 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시기 (여기서 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br 또는 I 로 대체될 수 있음), 또는 5 내지 24 개, 바람직하게는 5 내지 18 개의 탄소 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타낸다.

[0107] 바람직한 실시형태에 따르면, 화학식 (1) 의 화합물은 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되는 적어도 하나의 치환기 R<sup>1</sup> 또는 R<sup>2</sup> 를 포함한다.

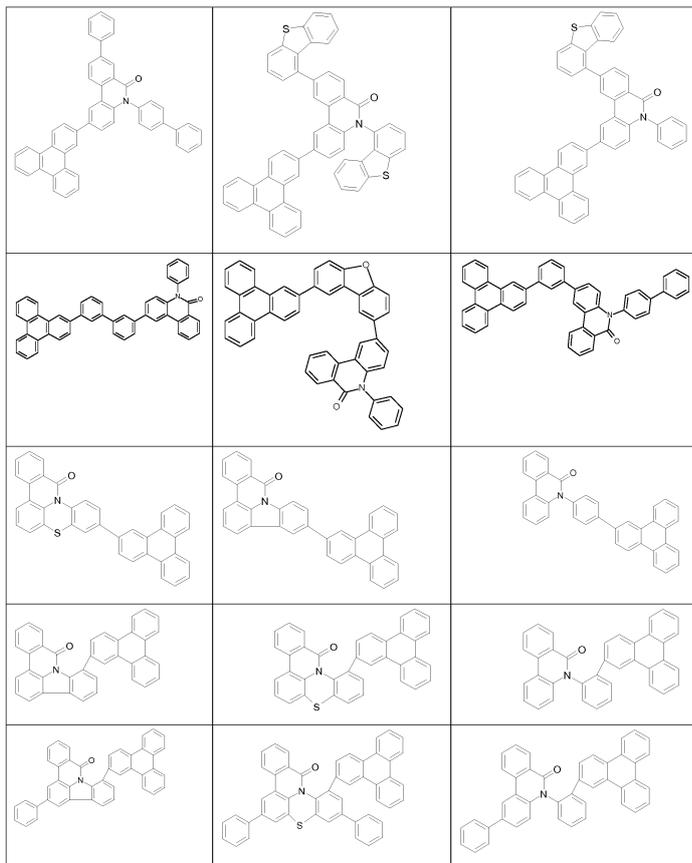
[0108] 본 발명에 따른 적합한 화합물의 예는 아래 표에 나타난 구조들이다:



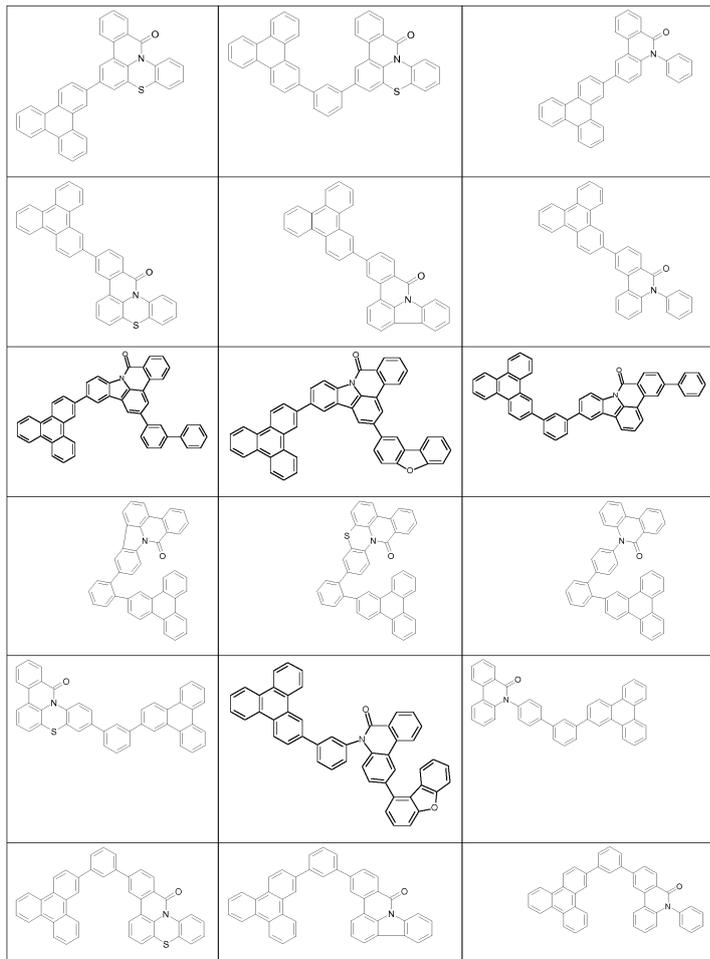
[0109]



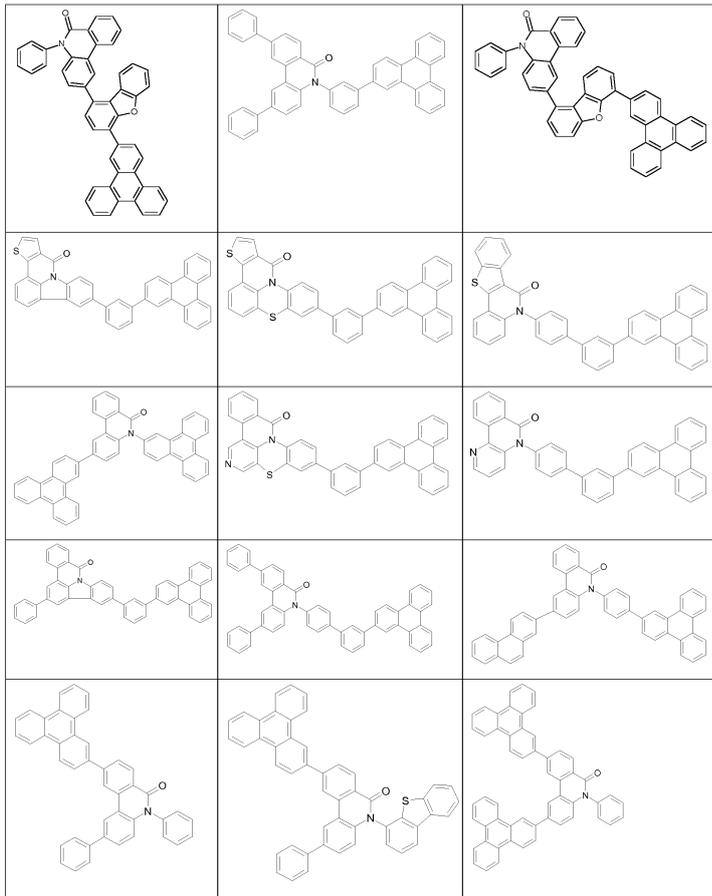
[0110]



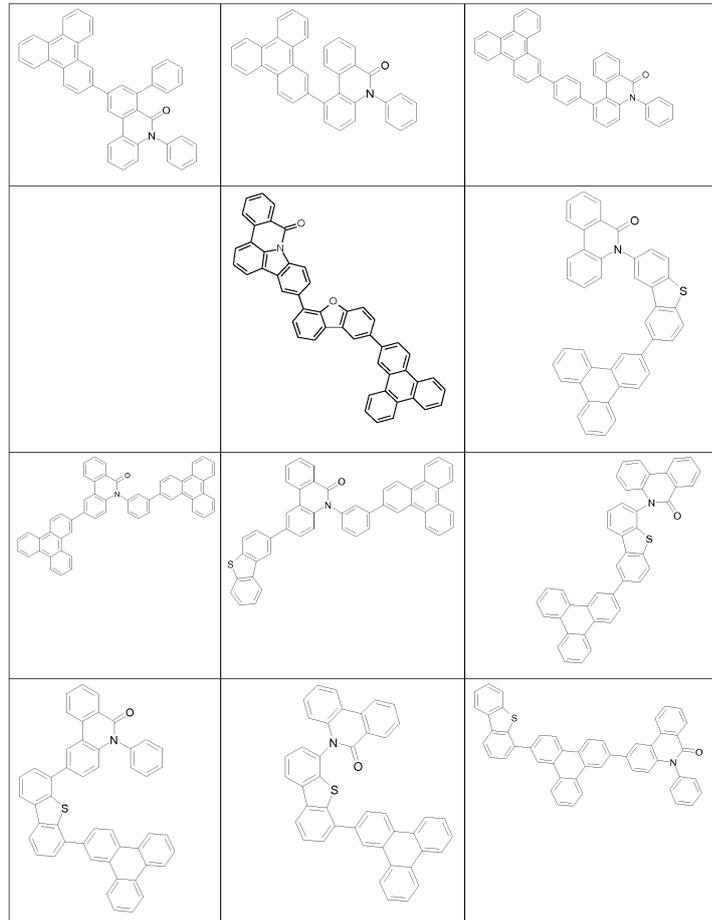
[0111]



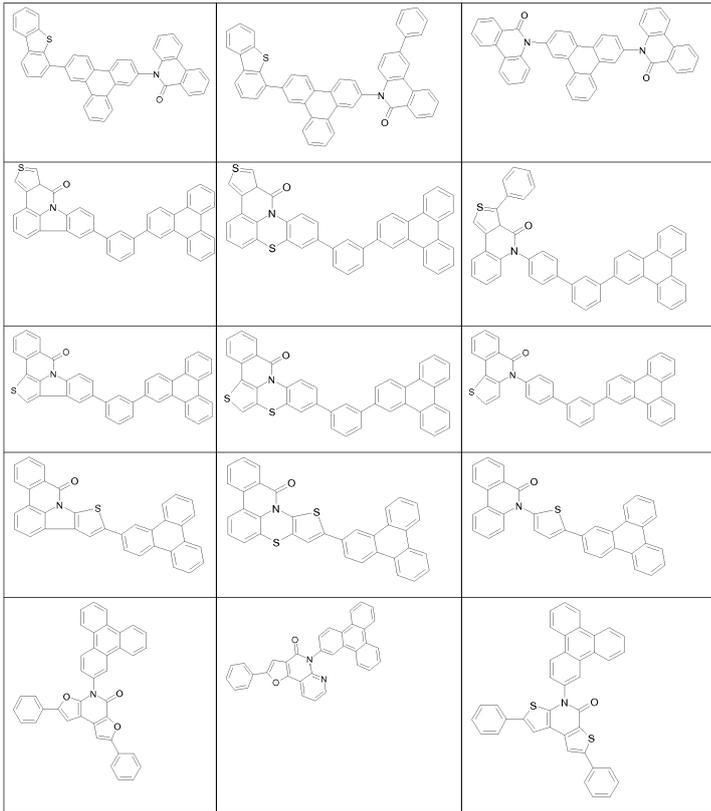
[0112]



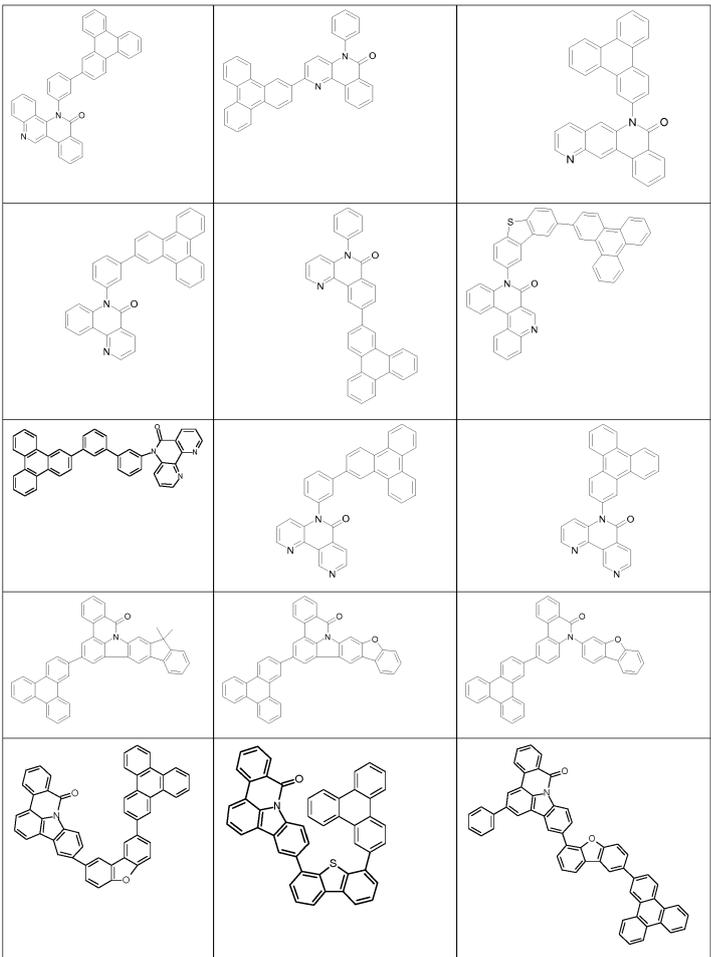
[0113]



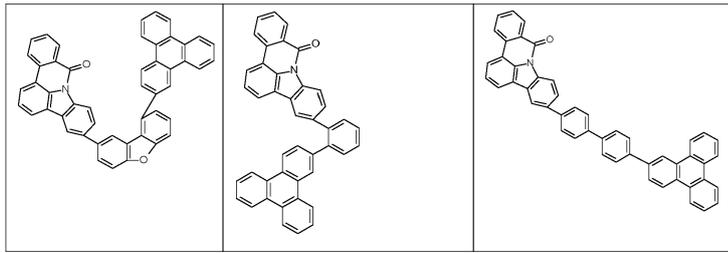
[0114]



[0115]



[0116]



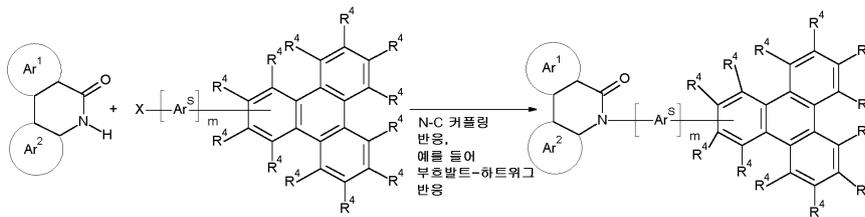
[0117]

[0118]

본 발명에 따른 화합물은 예를 들어 브롬화, 스즈키 커플링, 울만 (Ullmann) 커플링, 하트위그-부흐발트 (Hartwig-Buchwald) 커플링 등과 같이 당업자에게 공지된 합성 단계에 의해 제조될 수 있다. 적합한 합성 방법의 예는 아래 스킴 1 및 2 에서 일반적인 용어로 도시된다.

[0119]

**스킴 1 - 락탐에 의한 트리페닐렌 아민화**



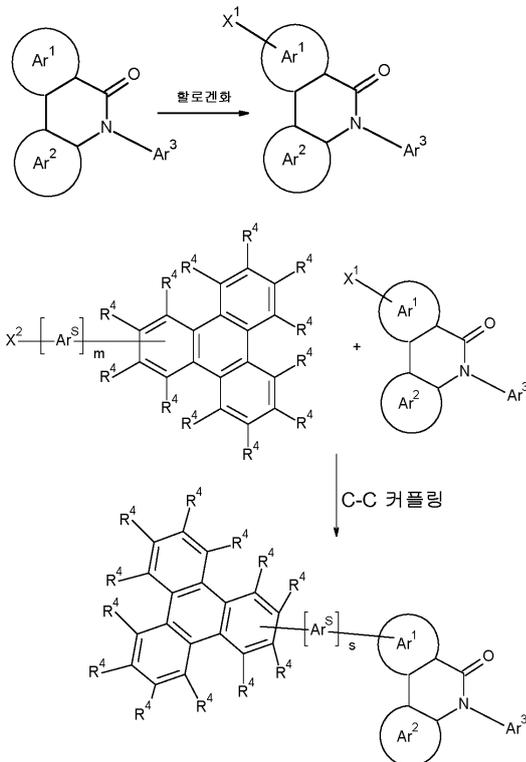
[0120]

[0121]

스킴 1에서 X는 바람직하게는 할로젠 (예컨대 Br, Cl, I), 보론산 및 트리플레이트로부터 선택된 이탈기이고, 다른 기호 및 인덱스는 상기와 동일한 의미를 갖는다.

[0122]

**스킴 2 - 락탐에 의한 트리페닐렌의 C-C 커플링**



[0123]

[0124]

스킴 2에서 X<sup>1</sup> 및 X<sup>2</sup> 는 바람직하게는 할로젠 (예컨대 Br, Cl, I), 보론산 및 트리플레이트로부터 선택된 이탈기 이고, 다른 기호 및 인덱스는 상기와 동일한 의미를 갖는다.

[0125]

예를 들어 스핀 코팅에 의해 또는 인쇄 공정에 의해, 액상으로부터 본 발명에 따른 화합물을 처리하기 위해, 본 발명에 따른 화합물의 포물레이션 (formulation) 이 필요하다. 이들 포물레이션은, 예를 들어, 용액, 분산액 또는 에멀전일 수 있다. 이 목적을 위해, 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, 베라트롤, THF, 메틸-THF, THP, 클로로벤젠, 디옥산, 페녹시톨루엔, 특히 3-페녹시톨루엔, (-)-펜톤, 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, α-테르피네올, 벤조티아졸, 부틸 벤조에이트, 큐멘, 시클로헥산올, 시클로헥산논, 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 이들 용매의 혼합물이다.

- [0126] 따라서, 본 발명은 또한 본 발명에 따른 화합물 및 적어도 하나의 추가 화합물을 포함하는 포물레이션에 관한 것이다. 추가 화합물은, 예를 들어, 용매, 특히 위에 언급된 용매 중 하나, 또는 이러한 용매의 혼합물일 수도 있다. 하지만, 추가 화합물은 또한, 전자 디바이스에서 마찬가지로 채용되는 적어도 하나의 추가의 유기 또는 무기 화합물, 예를 들어, 방출 화합물, 특히 인광 도펀트 및/또는 추가의 매트릭스 재료일 수도 있다. 적합한 방출 화합물 및 추가 매트릭스 재료를 유기 전계발광 디바이스와 관련하여 이하에 나타낸다. 이러한 추가 화합물은 또한 폴리머일 수 있다.
- [0127] 본 발명에 따른 화합물 및 혼합물은 전자 디바이스에서 사용하기에 적합하다. 전자 디바이스는 여기서 적어도 하나의 유기 화합물을 포함하는 적어도 하나의 층을 포함하는 디바이스를 의미하는 것으로 이해된다. 그러나, 컴포넌트는 여기서 또한 무기 재료나 또한 무기 재료로부터 전적으로 구축된 층을 포함할 수 있다.
- [0128] 따라서, 본 발명은 또한 전자 디바이스, 특히 유기 전계발광 디바이스에서의 본 발명에 따른 화합물 또는 혼합물의 용도에 관한 것이다.
- [0129] 본 발명은 또한 더 나아가, 위에 언급된 본 발명에 따른 화합물 또는 혼합물 중 적어도 하나를 포함하는 전자 디바이스에 관한 것이다. 위에서 화합물에 관해 언급된 선호도는 또한 전자 디바이스에 적용된다.
- [0130] 전자 디바이스는 바람직하게는 유기 전계발광 디바이스 (OLED, PLED), 유기 집적회로 (O-IC), 유기 전계효과 트랜지스터 (O-FET), 유기 박막 트랜지스터 (O-TFT), 유기 발광 트랜지스터 (O-LET), 유기 태양 전지 (O-SC), 유기 염료-감응형 태양 전지, 유기 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 필드-켄치 디바이스 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 "유기 플라즈몬 방출 디바이스" (D. M. Koller *et al.*, *Nature Photonics* **2008**, 1-4) 로 이루어지는 군으로부터 선택되며, 바람직하게는 유기 전계발광 디바이스 (OLED, PLED), 특히 인광 OLED 이다.
- [0131] 유기 전계발광 디바이스는 캐소드, 애노드 및 적어도 하나의 방출 층을 포함한다. 이들 층 외에도, 이는 또한 추가의 층, 예를 들어 각 경우에 하나 이상의 정공-주입층, 정공-수송층, 정공-차단층, 전자-수송층, 전자-주입층, 여기자-차단층, 전자-차단층 및/또는 전하-생성층을 포함할 수 있다. 예를 들어, 여기자-차단 기능을 갖는 중간층이, 2 개의 방출층 사이에 도입되는 것이 가능하다. 그러나, 이들 층 각각이 반드시 존재할 필요는 없다는 것이 지적되어야만 한다. 유기 전계발광 디바이스는 여기서 하나의 방출층 또는 복수의 방출층을 포함할 수 있다. 복수의 방출 층이 존재하는 경우, 이들은 바람직하게는 전체로서 380 nm 내지 750 nm 의 복수의 방출 최대를 가져서, 전체적으로 백색 방출을 초래하며, 즉 형광 또는 인광을 낼 수 있는 다양한 방출 화합물이 방출층에서 사용된다. 3 개의 방출층을 갖는 시스템이 특히 바람직하며, 여기서 3 개의 층은 청색, 녹색 및 주황색 또는 적색 방출을 나타낸다 (기본 구조에 관해, 예를 들어 WO 2005/011013 참조). 이들은 형광 또는 인광 방출층이거나 또는 형광 및 인광 방출 층이 서로 조합된 혼성 시스템일 수 있다.
- [0132] 위에 기재된 실시형태에 따른 본 발명에 따른 화합물은 정밀 구조에 따라 다양한 층에 이용될 수 있다. 정밀 치환에 따라 전자-수송층에 및/또는 전자-차단 또는 여기자-차단층에 및/또는 정공-수송층에, 및/또는 형광 방출체, 인광 방출체 또는 TADF (Thermally Activated Delayed Fluorescence) 를 나타내는 방출체, 특히 인광 방출체용 매트릭스 재료로서, 화학식 (1) 의 또는 바람직한 실시형태에 따른 화합물을 포함하는 유기 전계발광 디바이스가 바람직하다. 위에 나타낸 바람직한 실시형태들은 유기 전자 디바이스에서 재료의 사용에도 적용된다.
- [0133] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, 화학식 (1) 의 화합물 또는 바람직한 실시형태에 따른 화합물은 방출 층 중의 형광 또는 인광 화합물을 위한, 특히 인광 화합물을 위한 매트릭스 재료로서 채용된다. 여기서 유기 전

계발광 디바이스는 하나의 방출 층 또는 복수의 방출 층을 포함할 수도 있고, 적어도 하나의 방출 층은 매트릭스 재료로서 본 발명에 따른 적어도 하나의 화합물을 포함한다.

[0134] 화학식 (1)의 화합물 또는 바람직한 실시형태에 따른 화합물이 방출 화합물을 위한 매트릭스 재료로서 방출 층에 채용되는 경우, 그것은 바람직하게는 하나 이상의 인광 재료 (삼중항 방출체)와 조합으로 채용된다. 인광은 본 발명의 의미에서 스핀 다중도 > 1을 갖는 여기된 상태에서부터, 특히 여기된 삼중항 상태에서부터의 발광을 의미하는 것으로 받아들여진다. 본 출원의 목적을 위해, 모든 발광 전이-금속 착물 및 발광 란탄계열 착물, 특히 모든 이리듐, 백금 및 구리 착물이 인광 화합물로 여겨질 수 있다.

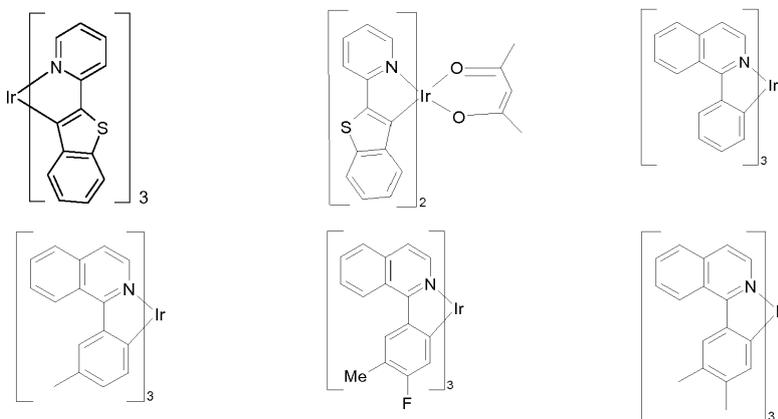
[0135] 바람직하게는, 화학식 (1)의 화합물 또는 바람직한 실시형태에 따른 화합물이 방출 화합물을 위한 매트릭스 재료로서 방출 층에 채용되는 경우, 그것은 바람직하게는 하나 이상의 인광 재료 (삼중항 방출체)와 조합으로 채용된다.

[0136] 화학식 (1)의 화합물 또는 바람직한 실시형태에 따른 화합물 및 방출 화합물을 포함하는 혼합물은, 방출체와 매트릭스 재료를 포함하는 전체 혼합물에 기초하여, 99 내지 1 부피%, 바람직하게는 98 내지 10 부피%, 특히 바람직하게는 97 내지 60 부피%, 특히 95 내지 80 부피%의 화학식 (1)의 화합물 또는 바람직한 실시형태에 따른 화합물을 포함한다. 이와 대응하여, 혼합물은 방출체 및 매트릭스 재료를 포함하는 전체 혼합물을 기준으로, 1 내지 99 부피%, 바람직하게는 2 내지 90 부피%, 특히 바람직하게는 3 내지 40 부피%, 특히 5 내지 20 부피%의 방출체를 포함한다.

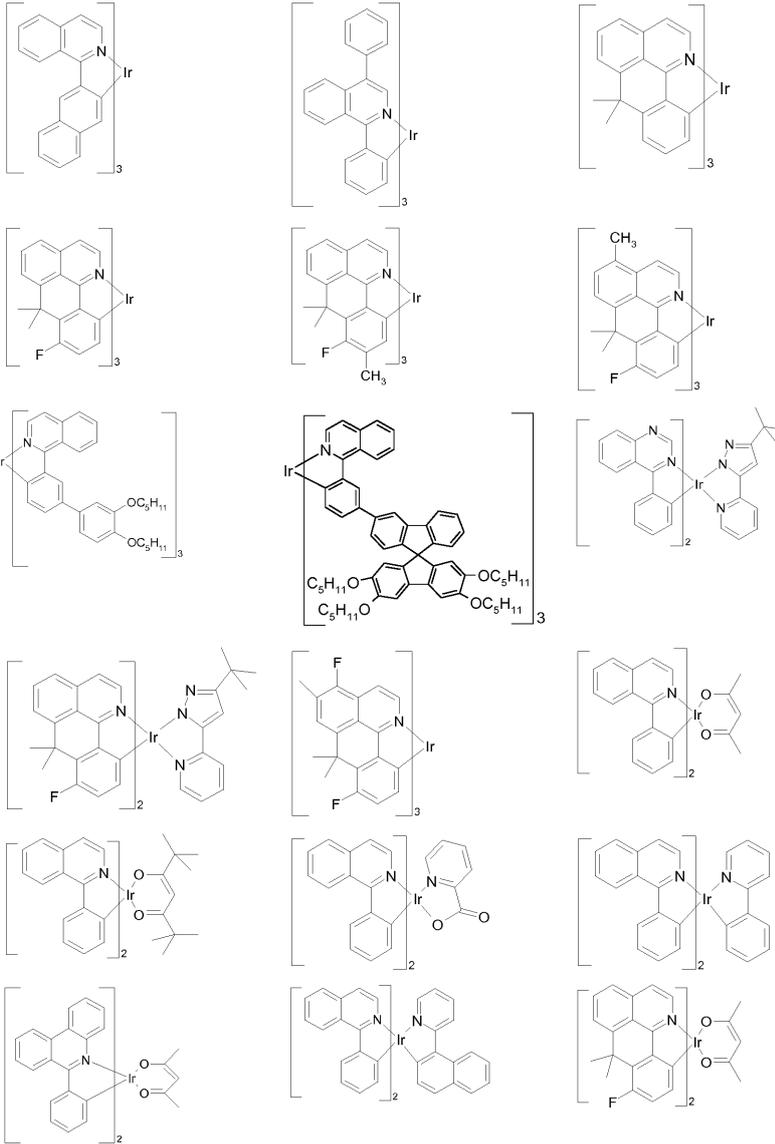
[0137] 적합한 인광 화합물 (= 삼중항 방출체)은 바람직하게는 가시 영역에서, 적합한 여기서 발광하는 화합물이고, 또한 20 초과, 바람직하게는 38 초과 및 84 미만, 특히 바람직하게는 56 초과 및 80 미만의 원자 번호를 갖는 적어도 하나의 원자, 특히 이 원자 번호를 갖는 금속을 함유한다. 사용된 인광 방출체는 바람직하게는 구리, 몰리브덴, 텅스텐, 레늄, 루테튬, 오스뮴, 로듐, 이리듐, 팔라듐, 백금, 은, 금 또는 유로퓸을 함유하는 화합물, 특히 이리듐 또는 백금을 함유하는 화합물이다. 본 발명의 목적을 위해, 위에서 언급된 금속을 함유하는 모든 발광 화합물이 인광 화합물로서 여겨진다.

[0138] 위에 기재된 방출체의 예는 출원 WO 00/70655, WO 2001/41512, WO 2002/02714, WO 2002/15645, EP 1191613, EP 1191612, EP 1191614, WO 05/033244, WO 05/019373, US 2005/0258742, WO 2009/146770, WO 2010/015307, WO 2010/031485, WO 2010/054731, WO 2010/054728, WO 2010/086089, WO 2010/099852, WO 2010/102709, WO 2011/032626, WO 2011/066898, WO 2011/157339, WO 2012/007086, WO 2014/008982, WO 2014/023377, WO 2014/094962, WO 2014/094961, WO 2014/094960, WO 2016/124304, WO 2016/125715, WO 2017/03243, 그리고 미공개 출원 WO 2018/011186 및 WO 2018/041769에 의해 드러난다. 일반적으로, 인광 OLED에 대한 선행 기술에 따라 사용되고 유기 전계발광 분야의 당업자에게 공지된 바와 같은 모든 인광 착물이 적합하며, 당업자는 진보성 없이 추가의 인광 착물을 사용할 수 있을 것이다.

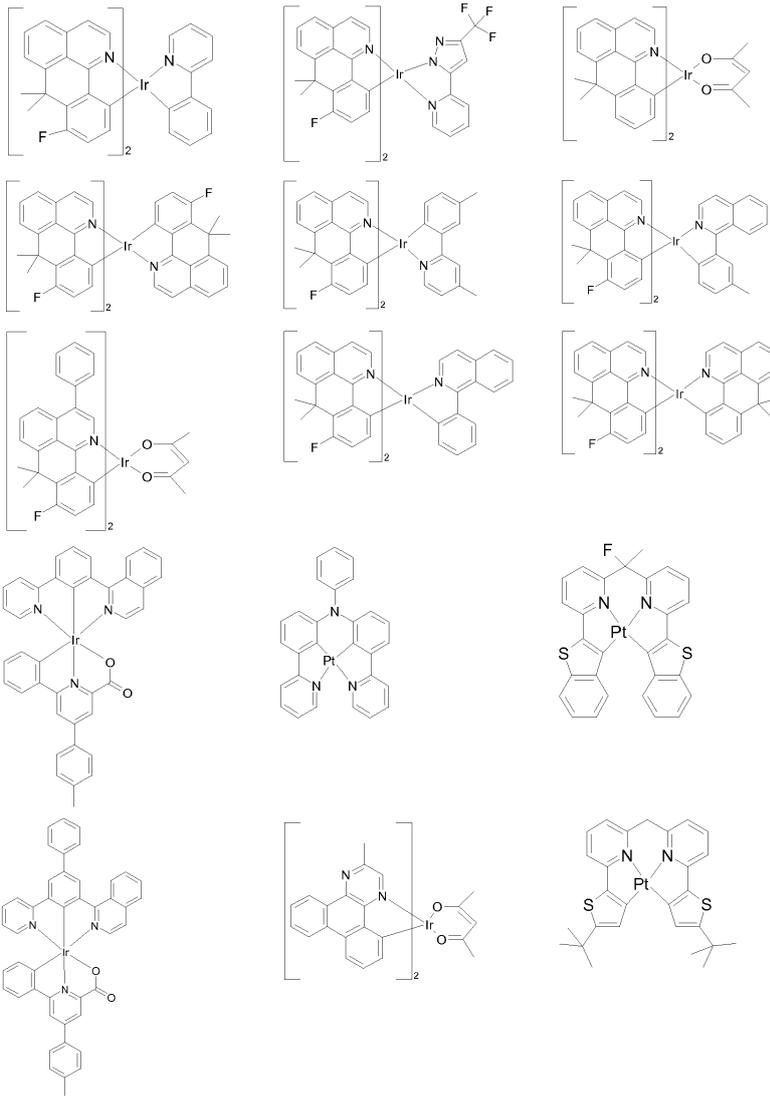
[0139] 적합한 인광 방출체의 예는 아래 표에 열거된 인광 방출체이다:



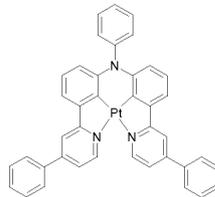
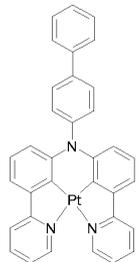
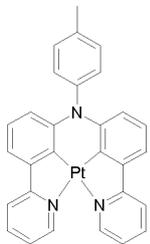
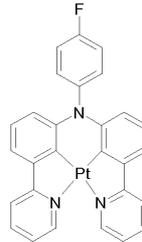
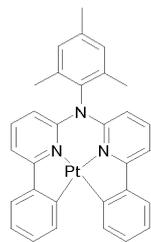
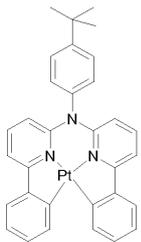
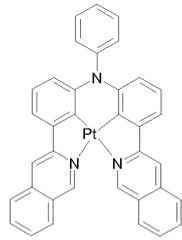
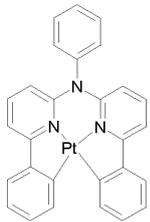
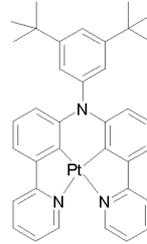
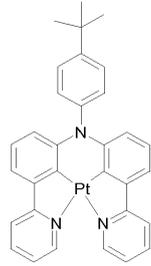
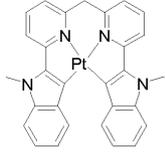
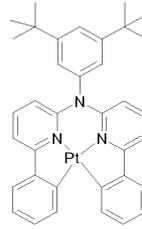
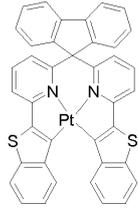
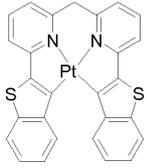
[0140]



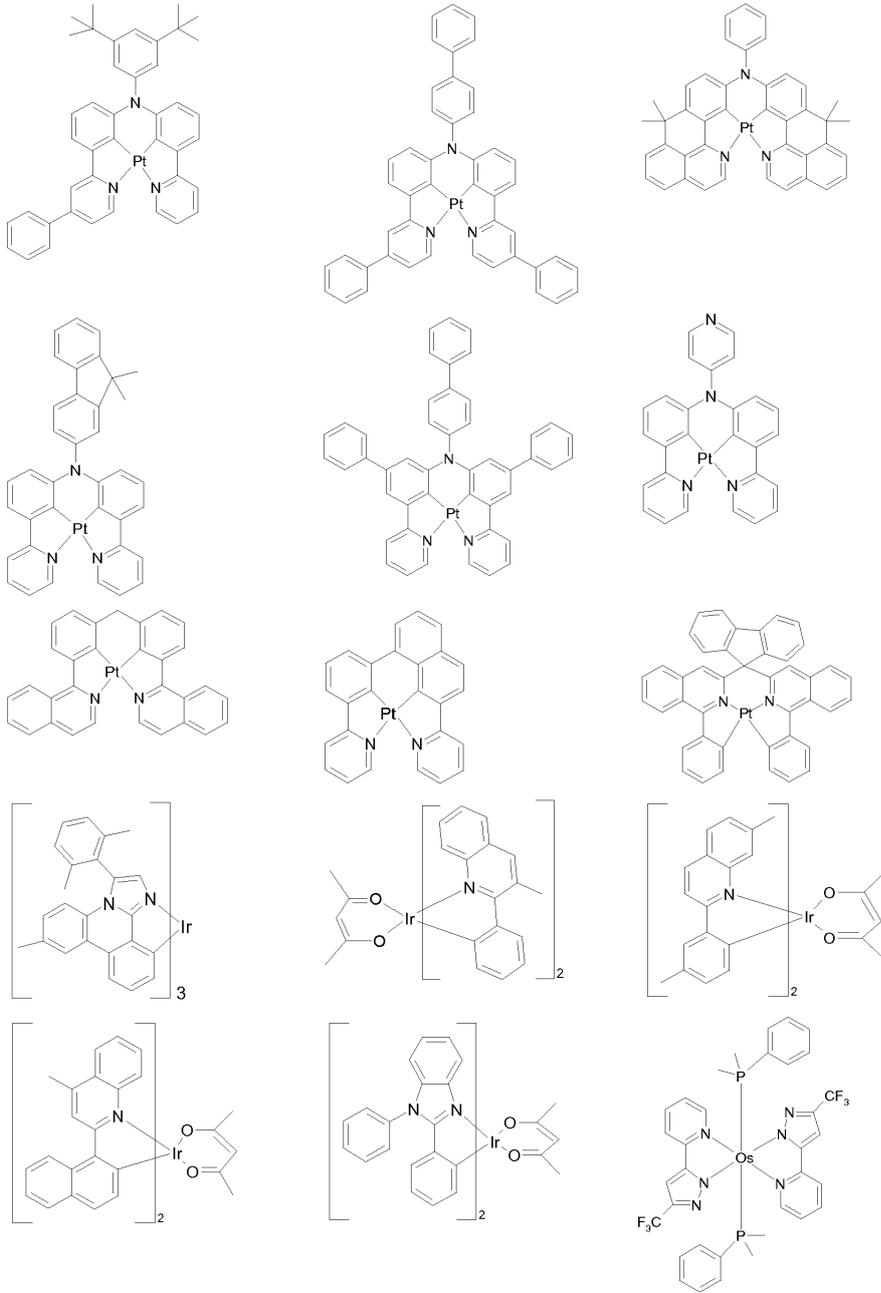
[0141]



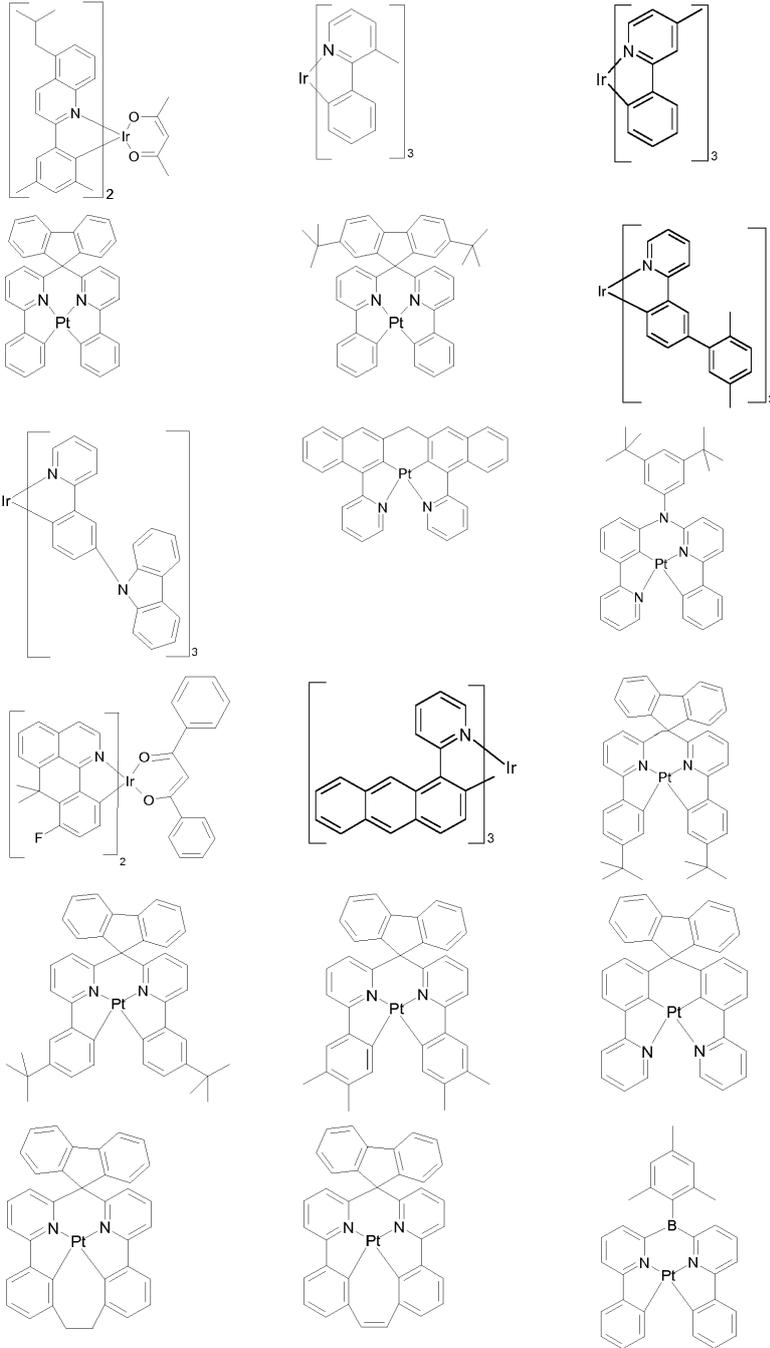
[0142]



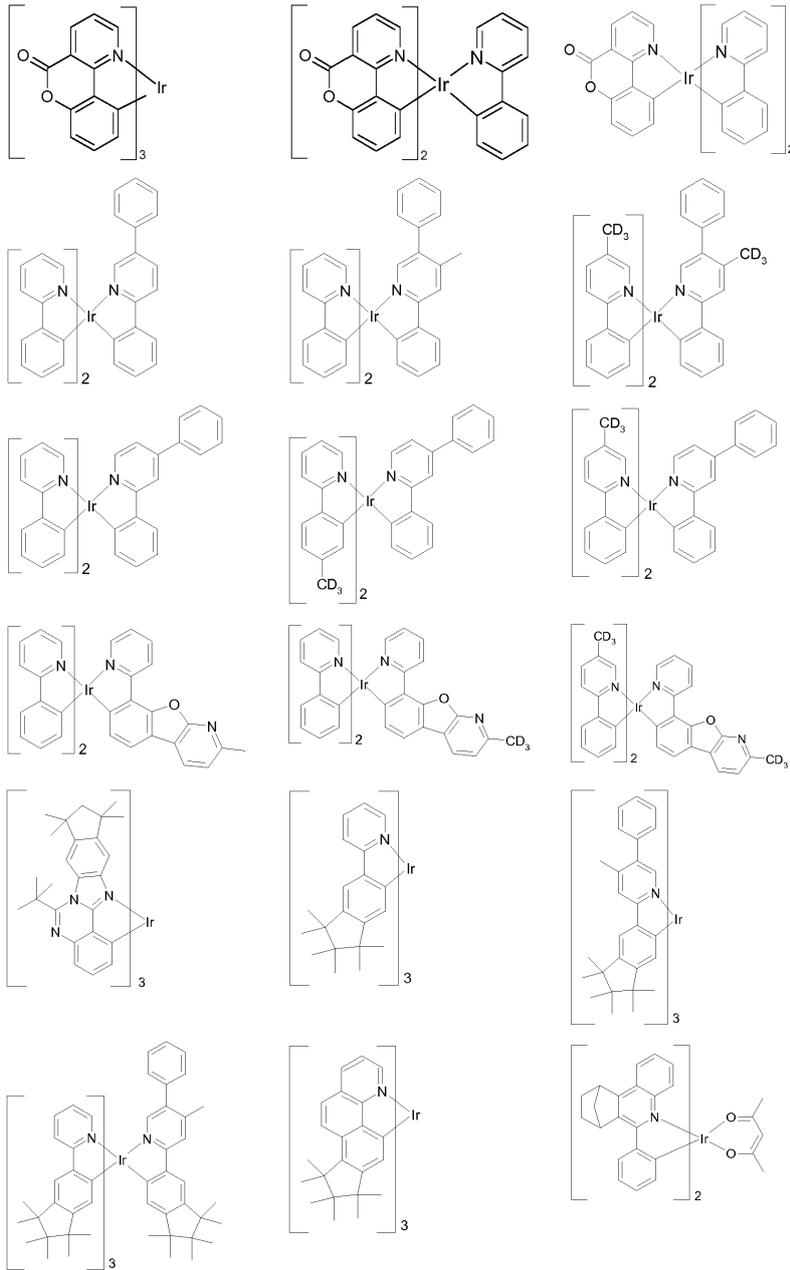
[0143]



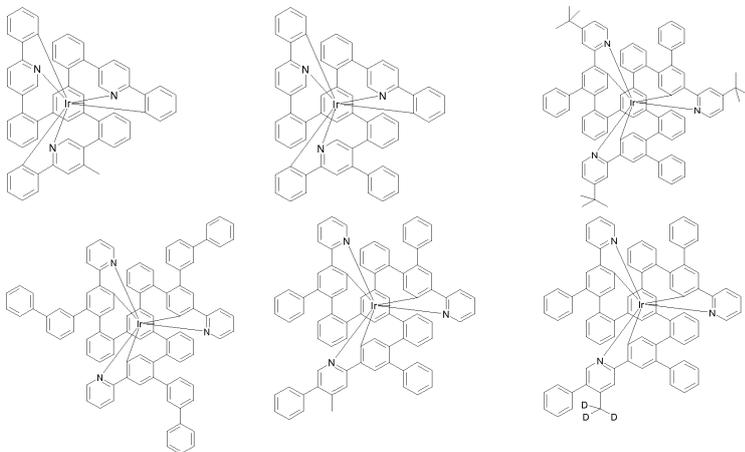
[0144]



[0145]



[0146]



[0147]

[0148]

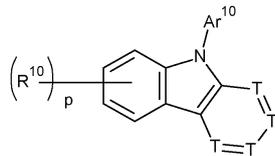
화학식 (1)의 화합물과 유리하게 조합될 수 있는 적합한 인광 재료 (= 삼중항 방출체)는, 위에 언급된 바와 같이, 적합한 여기시 적색광을 방출하는 화합물이며, 이는 550 내지 680 nm 사이에 포함되는 여기 삼중항 상태

수준 (T1) 을 갖는 인광 재료를 의미한다.

[0149] 본 발명의 추가의 바람직한 실시형태는 추가의 매트릭스 재료와 조합으로 인광 방출체를 위한 매트릭스 재료로서 화학식 (1) 의 화합물 또는 바람직한 실시형태에 따른 화합물의 용도이다. 화학식 (1) 의 또는 바람직한 실시형태에 따른 화합물과의 조합으로 채용될 수도 있는 특히 적합한 매트릭스 재료는 방향족 케톤, 방향족 포스핀 산화물 또는 방향족 술폰사이드 또는 술폰 (예를 들어 WO 2004/013080, WO 2004/093207, WO 2006/005627 또는 WO 2010/006680 에 따름), 트리아릴아민, 카르바졸 유도체, 예를 들어 CBP (N,N-비스카르바졸틸비페닐) 또는 카르바졸 유도체 (WO 2005/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527 또는 WO 2008/086851 에 개시됨), 인돌로카르바졸 유도체 (예를 들어 WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따름), 인데노카르바졸 유도체 (예를 들어 WO 2010/136109 및 WO 2011/000455 에 따름), 아자카르바졸 유도체 (예를 들어 EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160 에 따름), 이극성 매트릭스 재료 (예를 들어 WO 2007/137725 에 따름), 실란 (예를 들어 WO 005/111172 에 따름), 아자보롤 또는 보론산 에스테르 (예를 들어 WO 2006/117052 에 따름), 트리아진 유도체 (예를 들어 WO 2010/015306, WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따름), 아연 착물 (예를 들어 EP 652273 또는 WO 2009/062578 에 따름), 디아자실롤 또는 테트라아자실롤 유도체 (예를 들어 WO 2010/054729 에 따름), 디아자포스폴 유도체 (예를 들어 WO 2010/054730 에 따름), 가교된 카르바졸 유도체 (예를 들어 US 2009/0136779, WO 2010/050778, WO 2011/042107, WO 2011/088877 에 따름 또는 EP 11003232.3 에 따름), 트리페닐렌 유도체 (예를 들어 WO 2012/048781 에 따름), 또는 락탐 (예를 들어 WO 2011/116865 또는 WO 2011/137951 에 따름). 실제의 방출체보다 짧은 파장에서 방출하는 추가의 인광 방출체가 마찬가지로 혼합물에 코-호스트로서 존재할 수도 있다.

[0150] 바람직한 코-호스트 재료는 트리아릴아민 유도체, 락탐, 카르바졸 유도체 및 인데노카르바졸 유도체이다. 바람직한 코-호스트 재료는 매우 특히 카르바졸 유도체 및 인데노카르바졸 유도체이다.

[0151] 따라서, 본 발명은 또한 화학식 (1) 의 또는 바람직한 실시형태에 따른 적어도 하나의 화합물 및 화학식 (10) 의 적어도 하나의 기를 포함하는 제 2 화합물을 포함하는 혼합물에 관한 것으로,



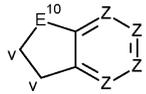
[0152] 식에서

[0153] R<sup>10</sup> 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 H, D, F, Cl, Br, I, CHO, CN, N(Ar)<sub>2</sub>, C(=O)Ar, P(=O)(Ar)<sub>2</sub>, S(=O)Ar, S(=O)<sub>2</sub>Ar, NO<sub>2</sub>, Si(R)<sub>3</sub>, B(OR)<sub>2</sub>, OSO<sub>2</sub>R, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있고, 여기서 각 경우에 하나 이상의 비인접 CH<sub>2</sub> 기는 RC=CR, C≡C, Si(R)<sub>2</sub>, Ge(R)<sub>2</sub>, Sn(R)<sub>2</sub>, C=O, C=S, C=Se, P(=O)(R), SO, SO<sub>2</sub>, O, S 또는 CONR 로 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO<sub>2</sub> 로 대체될 수도 있음), 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 또는 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있는, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시기를 나타내고, 여기서 2 개의 라디칼 R<sup>10</sup> 은 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수도 있는, 단환 또는 다환의 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성할 수도 있고;

[0155] Ar<sup>10</sup> 은, 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 또한 치환될 수 있는 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고;

[0156] p 는 0, 1, 2, 3 및 4 에서 선택되는 정수이고;

[0157] T 는 CR<sup>11</sup> 또는 N 이거나; 또는 2 개의 인접한 기 T 는 화학식 (T-1) 의 기를 나타내고,



화학식 (T-1)

[0158] 식에서 기호 V 는 화학식 (10) 에서 상응하는 인접 기 V를 나타내며;

[0159] E<sup>10</sup> 은 -C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-, -Si(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-, -C(=O)-, -C(=NR<sup>0</sup>)-, -C(=C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>)-, -O-, -S-, -S(=O)-, -S(O<sub>2</sub>)-, -N(R<sup>0</sup>)-, -P(R<sup>0</sup>)- 또는 -P((=O)R<sup>0</sup>)- 를 나타내고; 여기서 R<sup>0</sup> 는 상기와 동일한 의미를 가지며;

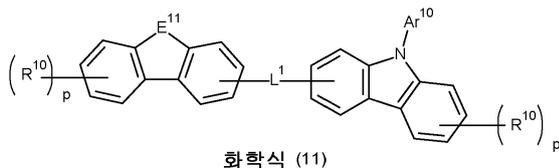
[0161] Z 는 CR<sup>10</sup> 또는 N 을 나타내고; 그리고

[0162] R 은 화학식 (1) 에서 기 R 에 대해 상기에 주어진 정의와 동일하고;

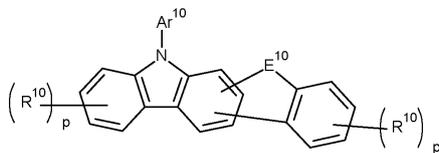
[0163] Ar 은 화학식 (1) 에서 기 Ar 에 대해 상기에 주어진 정의와 동일하고;

[0164] R' 는 화학식 (1)에서 기 R에 대해 상기에 주어진 정의와 동일하다.

[0165] 바람직하게는, 화학식 (10) 의 적어도 하나의 기를 포함하는 제 2 화합물은 화학식 (11) 및 (12) 의 화합물로부터 선택되고,



화학식 (11)



화학식 (12)

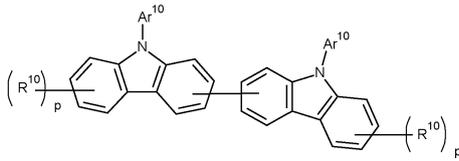
[0166] 식에서 기호 및 인덱스 Ar<sup>10</sup>, E<sup>10</sup>, R<sup>10</sup> 및 p는 상기와 동일한 의미를 갖고; 그리고

[0168] E<sup>11</sup> 은 -C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-, -Si(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>-, -C(=O)-, -C(=NR<sup>0</sup>)-, -C(=C(R<sup>0</sup>)<sub>2</sub>)-, -O-, -S-, -S(=O)-, -S(O<sub>2</sub>)-, -N(R<sup>0</sup>)-, -P(R<sup>0</sup>)- 또는 -P((=O)R<sup>0</sup>)- 를 나타내고;

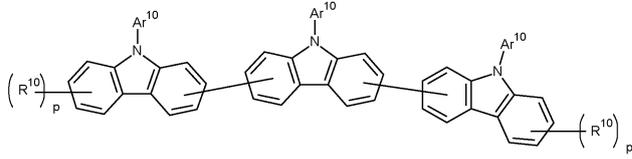
[0169] R<sup>0</sup> 는 화학식 (1) 에서 기 R<sup>0</sup> 에 대해 상기에 주어진 정의와 동일하고;

[0170] L<sup>1</sup> 은, 각 경우에 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 또한 치환될 수 있는, 단일 결합 또는 5 내지 6 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고; 여기서 R 의 정의는 상기와 동일하다.

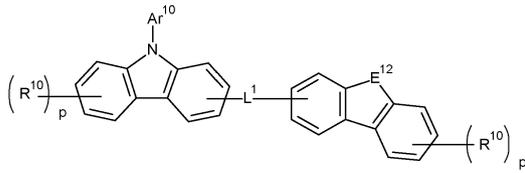
[0171] 보다 바람직하게는, 화학식 (10)의 적어도 하나의 기를 포함하는 제 2 화합물은 화학식 (11-1) 내지 (12-4)의 화합물로부터 선택되고,



화학식 (11-1)

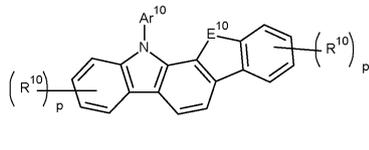


화학식 (11-2)

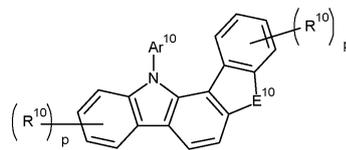


화학식 (11-3)

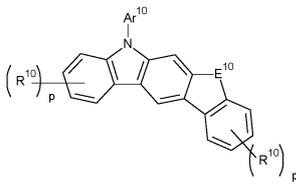
[0172]



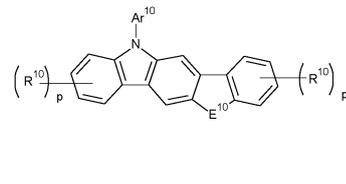
화학식 (12-1)



화학식 (12-2)



화학식 (12-3)



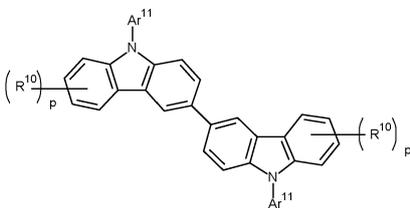
화학식 (12-4)

[0173]

[0174] 식에서 기호 및 인덱스  $Ar^{10}$ ,  $R^{10}$ ,  $E^{10}$ ,  $L^1$  및  $p$  는 상기와 동일한 의미를 가지며; 그리고

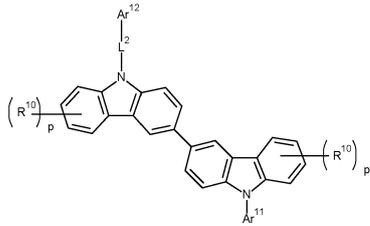
[0175]  $E^{12}$  는  $-C(R^0)_2-$ ,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-N(Ar^0)-$  를 나타내고; 여기서  $R^0$  는 상기와 같은 의미를 갖는다.

[0176] 특히 바람직하게는, 화학식 (10)의 적어도 하나의 기를 포함하는 제 2 화합물은 화학식 (13-1) 내지 (14-4)의 화합물로부터 선택되고,

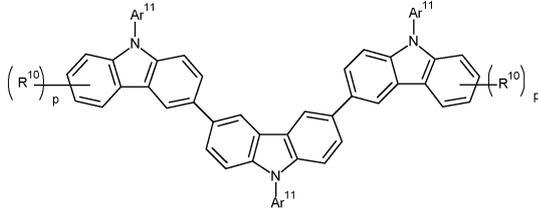


화학식 (13-1)

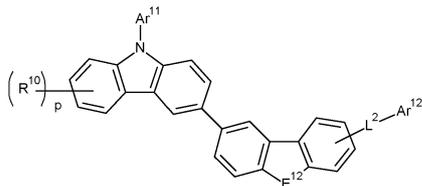
[0177]



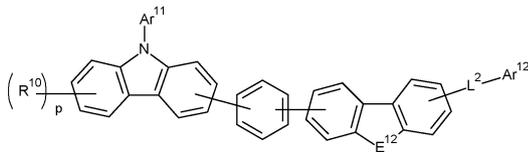
화학식 (13-2)



화학식 (13-3)

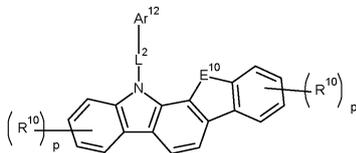


화학식 (13-4)

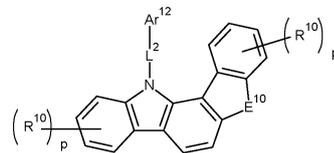


화학식 (13-5)

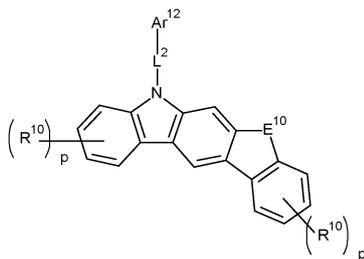
[0178]



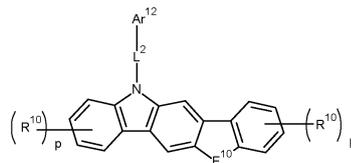
화학식 (14-1)



화학식 (14-2)



화학식 (14-3)



화학식 (14-4)

[0179]

[0180]

식에서 기호 및 인덱스  $R^{10}$ ,  $E^{10}$ ,  $E^{12}$  및  $p$ 는 상기와 동일한 의미를 갖고; 그리고 식에서:

[0181]

$Ar^{10}$  은 벤젠, 나프탈렌, 피렌, 비페닐, 터페닐, 퀴터페닐, 플루오렌, 스피로비플루오렌, 시스- 또는 트랜스-인 데노플루오렌, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 카르바졸, 인돌로카르바졸, 인데노카르바졸 (이들은 더 많은 라디칼 R에 의해 치환될 수 있음); 또는 이들 기의 조합으로부터 선택되는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내고;

[0182]

$L^2$  는 단일 결합 또는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (이는 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수도 있음) 을 나타내고;

- [0183] Ar<sup>12</sup> 는, 하나 이상의 라디칼 R로 치환될 수 있는, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 트리아진으로부터 선택된 헤테로 방향족 고리 시스템을 나타내며; 그리고
- [0184] R 은 상기와 동일한 의미를 갖는다.
- [0185] 본 발명의 추가의 실시형태에서, 본 발명에 따른 유기 전계발광 디바이스는 분리된 정공 주입층 및/또는 정공 수송층 및/또는 정공 차단층 및/또는 전자 수송층을 포함하지 않으며, 즉 방출 층은 정공 주입층 또는 애노드에 바로 인접해 있고, 및/또는 방출 층은 전자 수송층 또는 전자 주입층 또는 캐소드에 바로 인접해 있으며, 이는 예를 들어 WO 2005/053051 에 기재된 바와 같다. 또한, 예를 들어 WO 2009/030981 에 기재된 바와 같이, 방출 층에 직접 인접하는 정공 수송 또는 정공 주입 재료로서, 방출 층에서의 금속 착물과 동일하거나 또는 유사한 금속 착물을 사용하는 것이 가능하다.
- [0186] 또한 정공 차단 또는 전자 수송 층에 본 발명에 따른 화합물을 채용하는 것이 가능하다. 이것은, 특히, 카르바졸 구조를 갖지 않는 본 발명에 따른 화합물에 적용된다. 이들은 또한 바람직하게는 하나 이상의 추가 전자-수송기, 예를 들어 벤즈이미다졸기에 의해 치환될 수 있다.
- [0187] 본 발명에 따른 유기 전계발광 디바이스의 추가 층에서는, 종래 기술에 따라서 통상적으로 사용되는 모든 재료를 사용하는 것이 가능하다. 따라서, 당업자는 진보적인 단계없이, 유기 전계발광 디바이스에 대해 공지된 모든 재료를 화학식 (1) 의 또는 바람직한 실시형태에 따른 화합물과 조합하여 사용할 수 있을 것이다.
- [0188] 예를 들면, 본 발명에 따른 화합물은 또한 반도체성 발광 나노입자의 매트릭스로서 사용될 수 있다. 본 발명의 문맥에서, 용어 "나노"는 0.1 내지 999 nm, 바람직하게는 1 내지 150 nm 범위의 크기를 나타낸다. 바람직한 실시형태에서, 반도체성 발광 나노입자는 양자 재료 ("양자 크기의 재료") 이다. 본 발명의 의미에서 용어 "양자 재료"는 예를 들어 ISBN:978-3-662-44822-9에 기재된 바와 같이, 양자 구속 효과라 불리는 것을 나타내는, 추가 연결 또는 추가 표면 개질이 없는 반도체 재료 자체의 크기에 관한 것이다. 본 발명의 일 실시형태에서, 양자 재료의 전체 크기는 1 nm 내지 100 nm, 바람직하게는 1 nm 내지 30 nm, 더 바람직하게는 5 nm 내지 15 nm 범위이다. 이 경우, 반도체 발광 나노 입자의 코어는 다양할 수 있다. 적합한 예는 CdS, CdSe, CdTe, ZnS, ZnSe, ZnSeS, ZnTe, ZnO, GaAs, GaP, GaSb, HgS, HgSe, HgTe, InAs, InP, InPS, InPZnS, InPZn, InPGa, InSb, AlAs, AlP, AlSb, Cu<sub>2</sub>S, Cu<sub>2</sub>Se, CuInS<sub>2</sub>, CuInSe<sub>2</sub>, Cu<sub>2</sub>(ZnSn)S<sub>4</sub>, Cu<sub>2</sub>(InGa)S<sub>4</sub>, TiO<sub>2</sub>, 또는 상기 재료의 조합물을 포함한다. 바람직한 실시형태에서, 반도체 발광 입자의 코어는 원소 주기율표의 13 족 원소의 하나 이상 및 15 족 원소의 하나 이상을 포함하며, 예를 들어 GaAs, GaP, GaSb, InAs, InP, InPS, InPZnS, InPZn, InPGa, InSb, AlAs, AlP, AlSb, CuInS<sub>2</sub>, CuInSe<sub>2</sub>, Cu<sub>2</sub>(InGa)S<sub>4</sub> 또는 언급된 재료의 조합물을 포함한다. 특히 바람직하게는 코어는 In- 및 P-원자, z. InP, InPS, InPZnS, InPZn 또는 InPGa 를 포함한다. 본 발명의 추가 실시형태에서, 나노입자는 주기율표의 12 족, 13 족 또는 14 족으로부터의 제 1 원소 및 주기율표 15 족 또는 16 족으로부터의 제 2 원소를 함유하는 하나 이상의 셸 층을 함유한다. 바람직하게는, 모든 셸 층은 주기율표의 12 족, 13 족 또는 14 족으로부터의 제 1 원소 및 주기율표의 15 족 또는 16 족으로부터의 제 2 원소를 포함한다. 본 발명의 바람직한 실시형태에서, 셸 층 중 적어도 하나는 주기율표의 12 족으로부터의 제 1 원소 및 제 16 족으로부터의 제 2 원소, 예를 들어 CdS, CdZnS, ZnS, ZnSe, ZnSSe, ZnSSeTe, CdS/ZnS, ZnSe/ZnS 또는 ZnS/ZnSe를 함유한다. 특히 바람직하게는, 모든 셸 층은 주기율표의 12 족으로부터의 제 1 원소 및 16 족으로부터의 제 2 원소를 함유한다.
- [0189] 나아가, 하나 이상의 층이 승화 공정에 의해 적용되고, 여기서 재료들이 진공 승화 장치 내에서 10<sup>-5</sup> mbar 미만, 바람직하게는 10<sup>-6</sup> mbar 미만의 초기 압력에서 증착되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 디바이스가 바람직하다. 그러나, 또한 초기 압력이 훨씬 더 낮거나 또는 더 높은, 예를 들어 10<sup>-7</sup> mbar 미만인 것이 가능하다.
- [0190] 마찬가지로, 하나 이상의 층이 OVPD (organic vapour phase deposition) 방법에 의해 또는 캐리어 기체 승화의 도움으로 적용되고 재료들이 10<sup>-5</sup> mbar 내지 1 bar 의 압력에서 적용되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 디바이스가 바람직하다. 이러한 공정의 특정 경우는 OVJP (유기 증기 제트 프린팅) 공정인데, 여기서 재료는 노즐을 통해 직접 적용되고 그에 따라 구조화된다 (예를 들어, M. S. Arnold *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **2008**, *92*, 053301).
- [0191] 게다가 하나 이상의 층이 용액으로부터, 예를 들어 스핀 코팅에 의해, 또는 예를 들어 잉크-젯 인쇄, LITI (광 유도 열 이미징, 열 전자 인쇄), 스크린 인쇄, 플렉소그래픽 인쇄, 오프셋 인쇄 또는 노즐 인쇄와 같은 임의의

원하는 인쇄 공정에 의해 생성되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 디바이스가 바람직하다. 이러한 목적을 위해서는 예를 들어 적합한 치환에 의해 수득되는 가용성 화합물이 필요하다.

[0192] 부가적으로, 예를 들어, 하나 이상의 층이 용액으로부터 도포되고, 하나 이상의 추가의 층이 증착에 의해 적용되는 혼성 방법이 가능하다. 따라서, 예를 들어, 방출층을 용액으로부터 도포하고 전자-수송층을 증착에 의해 적용하는 것이 가능하다.

[0193] 이들 공정은 일반적으로 당업자에게 알려져 있고, 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 유기 전계발광 디바이스에 진보성 없이 당업자에 의해 적용될 수 있다.

[0194] 본 발명에 따른 화합물은 일반적으로 유기 전계발광 디바이스에서의 사용시 매우 양호한 성질을 갖는다. 특히, 유기 전계발광 디바이스에서 본 발명에 따른 화합물의 사용시 수명은 종래 기술에 따른 유사한 화합물과 비교하여 현저히 더 낫다. 유기 전계발광 디바이스의 다른 특성, 특히 효율 및 전압이 마찬가지로 더 낮거나 또는 적어도 비슷하다. 또한, 화합물은 높은 유리 전이 온도 및 높은 열 안정성을 갖는다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

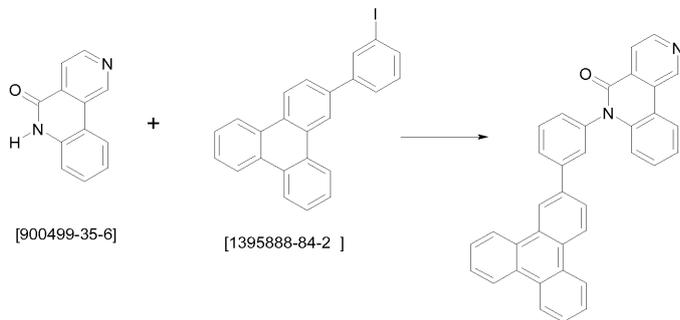
[0195] 이제 본 발명은 하기 실시예에 의해 더욱 상세히 설명될 것이며, 하기 실시예에 의해 본 발명을 제한하는 것을 바라지 않는다.

**A) 합성예**

[0197] 다르게 표시되지 않으면, 다음 합성들이 건조된 용매들에서 보호 가스 분위기 하에 수행된다. 용매 및 시약은 예를 들어 Sigma-ALDRICH 또는 ABCR에서 구입할 수 있다. 대응하는 CAS 번호는 또한 각각의 경우에 문헌으로부터 공지된 화합물로부터 표시된다.

**실시예 a:**

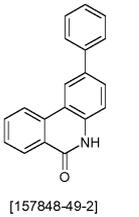
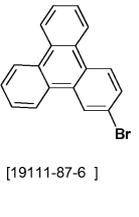
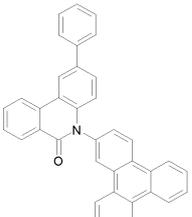
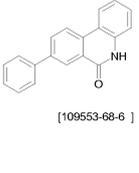
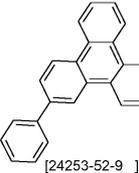
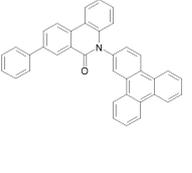
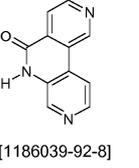
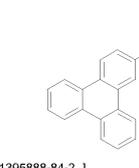
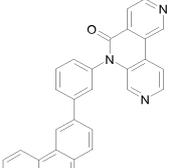
**6-(3-트리페닐렌-2-일-페닐)-6H-벤조[c][2,6]나프티리딘-5-온**



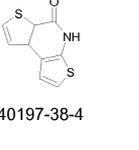
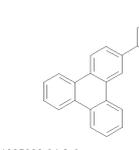
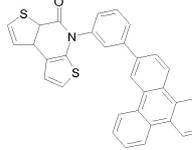
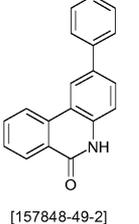
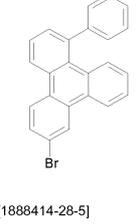
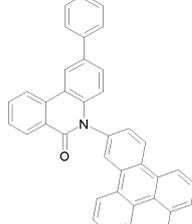
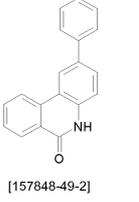
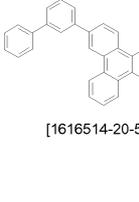
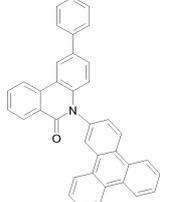
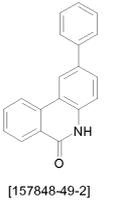
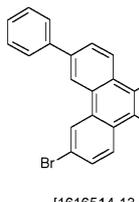
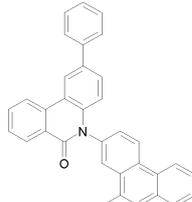
[0200]

[0201] 벤조[c]-2,6-나프티리딘은 19.6 g (100 mmol), 2-(3-요오도-페닐)-트리페닐렌 51.6 g (120 mmol) 및 L-프롤린 2.3 g (20 mmol) 을 100 mL의 DMF에 용해하고 150 °C에서 30 시간 동안 교반한다. 용액을 물로 희석하고 에틸 아세테이트로 두 번 추출하고 조합한 유기상을 Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 상에서 건조시키고 회전 증발에 의해 농축시킨다. 잔여물을 크로마토그래피 (EtOAc/헥산: 2/3) 로 정제한다. 잔여물을 톨루엔 및 디클로로메탄/톨루엔으로부터 재결정화하고, 마지막으로 고진공 하에 승화시킨다. 수율은 39 g (78 mmol) 이론치의 66% 이다.

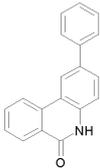
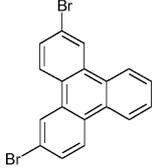
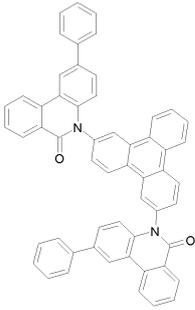
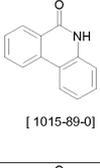
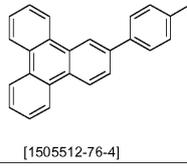
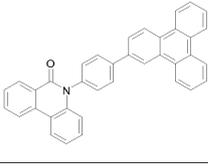
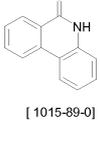
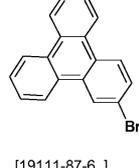
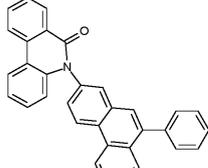
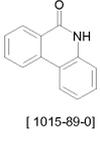
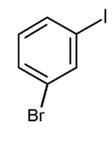
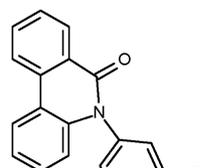
[0202] 유사하게, 하기 화합물을 수득한다:

예	추출물 1	추출물 2	생성물	수율
1a	 [157848-49-2]	 [19111-87-6 ]		53%
2a	 [109653-68-6 ]	 [24253-52-9 ]		60%
3a	 [1186039-92-8]	 [1395888-84-2 ]		66%

[0203]

4a	 40197-38-4	 [1395888-84-2 ]		62%
5a	 [157848-49-2]	 [1888414-28-5]		77%
6a	 [157848-49-2]	 [1616514-20-5 ]		75%
7a	 [157848-49-2]	 [1616514-13-6 ]		78%

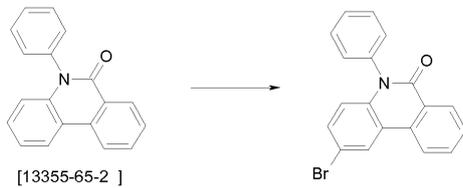
[0204]

8a	 [157848-49-2]	 [1570190-91-8 ]		64%
9a	 [ 1015-89-0]	 [1505512-76-4]		79%
10a	 [ 1015-89-0]	 [19111-87-6 ]		80%
11a	 [ 1015-89-0]			77%

[0205]

[0206]

실시예 b: 5-(4-브롬-페닐)-5H-페난트리딘-6-온

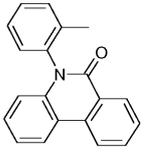
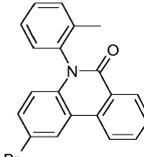
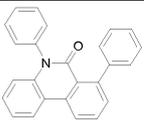
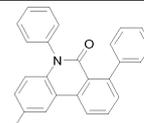


[0207]

[0208]

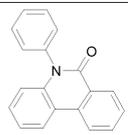
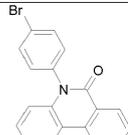
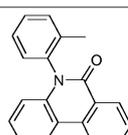
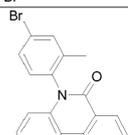
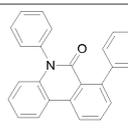
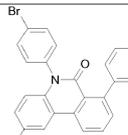
6.0 g (22.2 mmol) 의 5-페닐-5H-페난트리딘-6-온을 초기에 150 mL 의 DMF 에 넣는다. 그후, NBS 4g (22.5 mmol) 용액을 빛을 배제한 상태의 실온에서 DMF 100 mL에 적가한다. 혼합물을 실온에서 4 시간 동안 더욱 교반한다. 그후, 혼합물을 150 mL의 물과 혼합하고 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 로 추출한다. 유기 상을 MgSO<sub>4</sub> 상에서 건조시키고, 용매를 감압하에서 제거한다. 생성물을 뜨거운 헥산으로 교반하고 여과한다. 수율: 7.4 g (21 mmol), 이론치의 80%.

[0209] 유사하게, 하기 화합물을 수득한다:

예	추출물 1	생성물 1	수율
1b	 [129647-00-3 ]		68 %
2b			85%

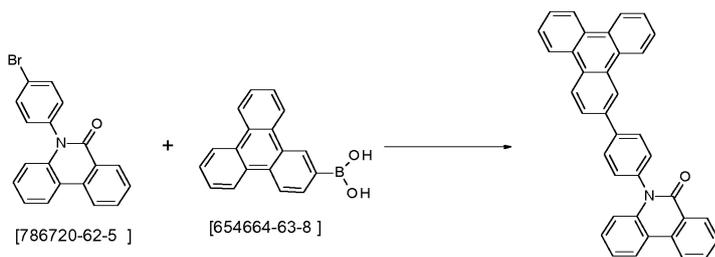
[0210]

[0211] 유사하게, 다음 화합물은 용매인 클로로포름에서 2 당량의 NBS를 사용하여 수득된다:

예	추출물 1	생성물 1	수율
3b			87 %
4b			82 %
5b			83%

[0212]

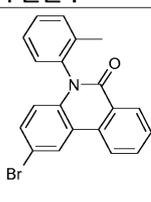
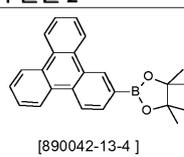
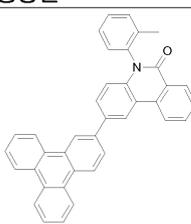
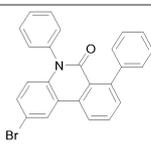
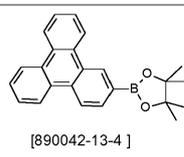
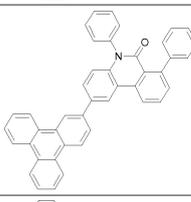
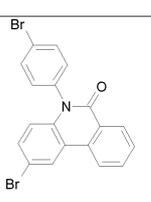
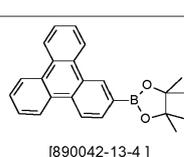
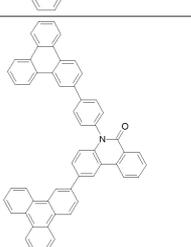
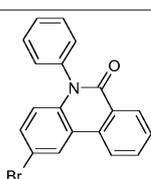
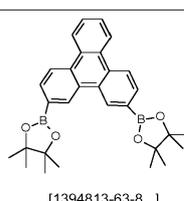
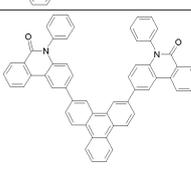
[0213] 실시예 c: 5-(4-트리페닐렌-2-일-페닐)-5H-페난트리딘-6-온



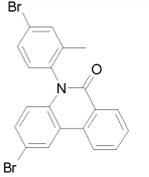
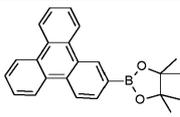
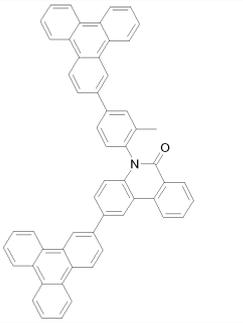
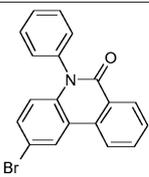
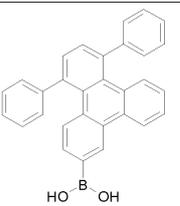
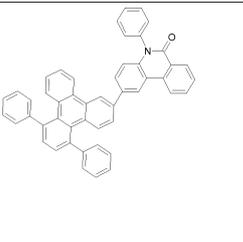
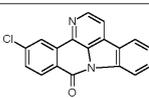
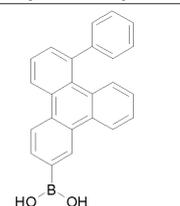
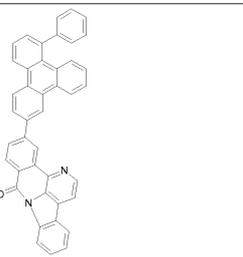
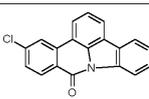
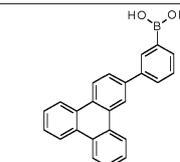
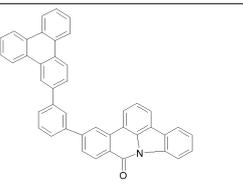
[0214]

[0215] 29.9 g (110.0 mmol) 의 트리페닐렌-2-보론산, 38 g (110.0 mmol) 의 5-(4-브로모-페닐)-5H-페난트리딘-6-온 및 44.6 g (210.0 mmol) 의 삼인산 칼륨을 500 mL 의 톨루엔, 500 mL 의 디옥산 및 500 mL 의 물에 현탁시킨다. 그후, 이 현탁액에 913 mg (3.0 mmol) 의 트리-*o*-톨릴-포스핀 및 후속하여 112 mg (0.5 mmol) 의 팔라듐(II) 아세테이트를 첨가하고, 반응 혼합물을 16 시간 동안 환류하 가열한다. 냉각 후, 유기 상을 수집하고, 실리카 겔을 통해 여과하고, 200 mL의 물로 3 회 세척한 후, 농축 건조시킨다. 잔여물을 톨루엔 및 디클로로메탄/이소프로판올로부터 재결정화하고, 마지막으로 고진공 하에 승화시키며, 순도는 99.9 % 이다. 수율은 43 g (86 mmol) 이며, 이론치의 80% 에 대응한다.

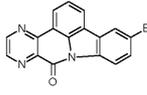
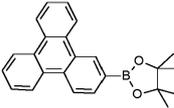
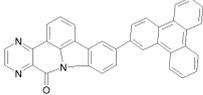
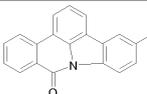
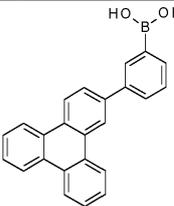
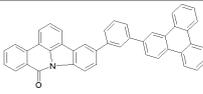
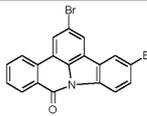
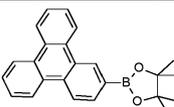
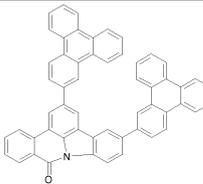
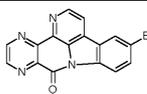
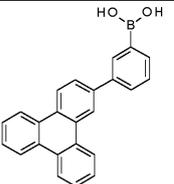
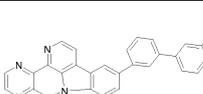
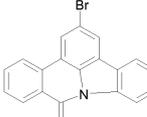
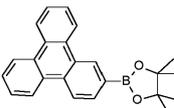
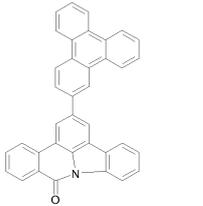
[0216] 유사하게, 하기 화합물을 수득한다:

예	추출물 1	추출물 2	생성물	수율
1c		 [890042-13-4]		84%
2c		 [890042-13-4]		68%
3c		 [890042-13-4]		67%
4c		 [1394813-63-8]		71%

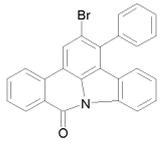
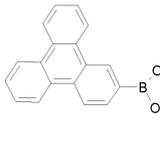
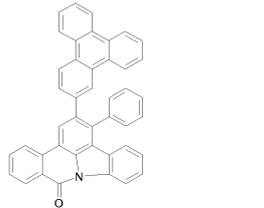
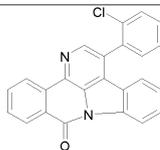
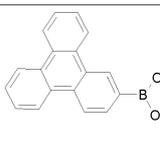
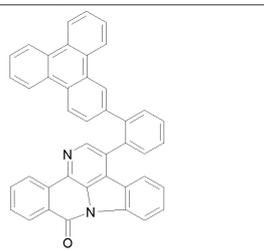
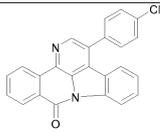
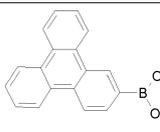
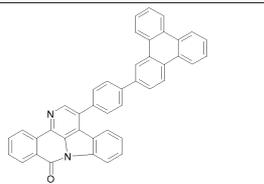
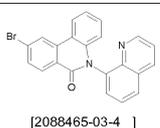
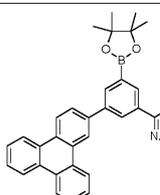
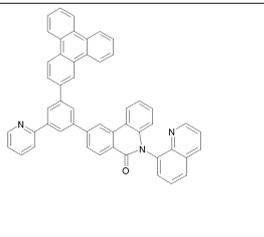
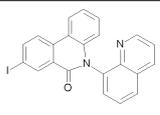
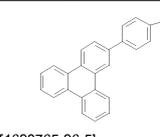
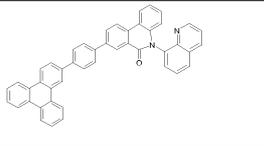
[0217]

5c		 [890042-13-4 ]		75%
6c		 HO-B-OH [1714136-45-4]		76%
7c	 [1629245-82-4 ]	 HO-B-OH [2020404-50-4]		70%
8c	 [1629245-81-3 ]	 HO-B-OH [1235876-72-8 ]		66%

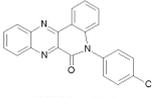
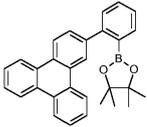
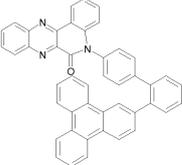
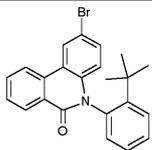
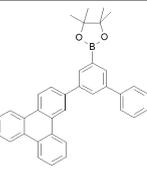
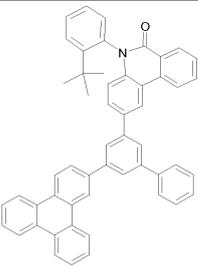
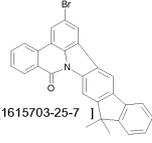
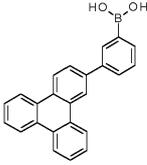
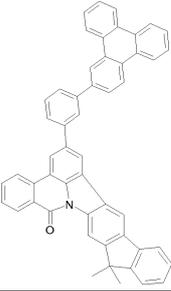
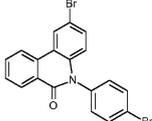
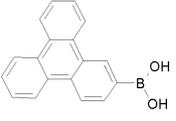
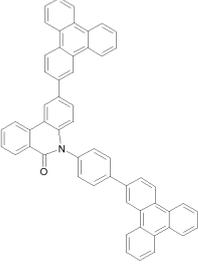
[0218]

<p>9c</p>	 <p>[1369958-42-8 ]</p>	 <p>[890042-13-4 ]</p>		<p>73%</p>
<p>10c</p>		 <p>[1235876-72-8 ]</p>		<p>71%</p>
<p>11c</p>	 <p>[1346571-48-9 ]</p>	 <p>[890042-13-4 ]</p>		<p>80%</p>
<p>12c</p>	 <p>[1346571-41-2]</p>	 <p>[1235876-72-8 ]</p>		<p>78%</p>
<p>13c</p>	 <p>[1346571-39-8]</p>	 <p>[890042-13-4 ]</p>		<p>81%</p>

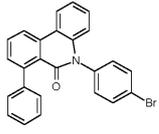
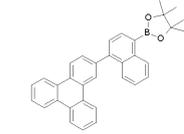
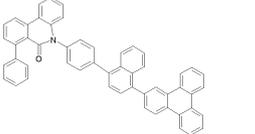
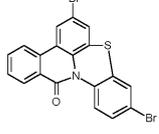
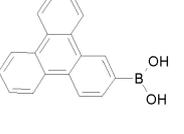
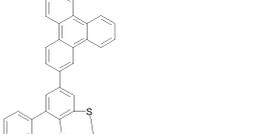
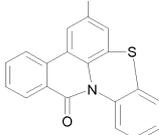
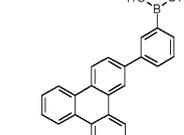
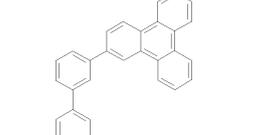
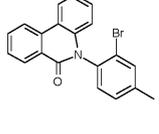
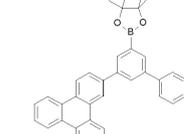
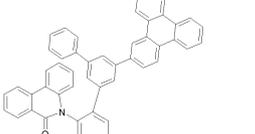
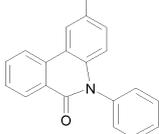
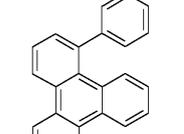
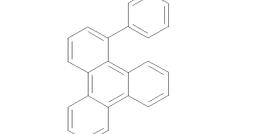
[0219]

<p>14c</p>  <p>[25890-89-5 ]</p>	 <p>[654664-63-8 ]</p>		<p>63%</p>
<p>15c</p>  <p>[904503-80-6 ]</p>	 <p>[654664-63-8 ]</p>		<p>59%</p>
<p>16c</p>  <p>[904503-77-1 ]</p>	 <p>[654664-63-8 ]</p>		<p>79%</p>
<p>17c</p>  <p>[2088465-03-4 ]</p>	 <p>[1943719-84-3 ]</p>		<p>75%</p>
<p>18c</p>  <p>[2088464-91-7 ]</p>	 <p>[1620765-26-5 ]</p>		<p>79%</p>

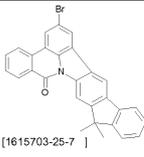
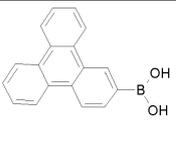
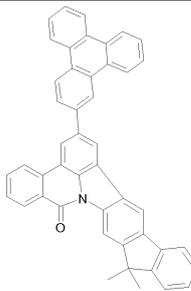
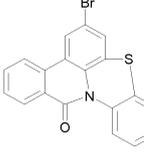
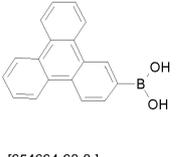
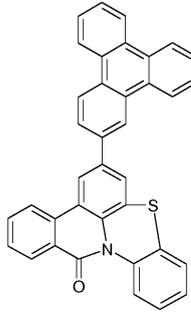
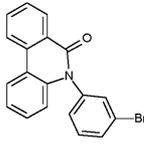
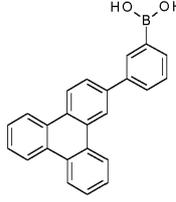
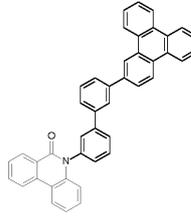
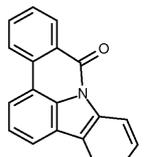
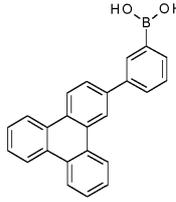
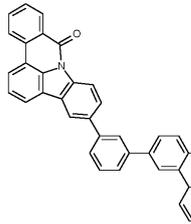
[0220]

<p>19c</p>	 <p>[1887014-91-6 ]</p>	 <p>[1638272-53-3]</p>		<p>64%</p>
<p>20c</p>	 <p>[1840905-70-5 ]</p>	 <p>[1372893-20-3]</p>		<p>81%</p>
<p>21c</p>	 <p>[1615703-25-7 ]</p>	 <p>[1235876-72-8 ]</p>		<p>77%</p>
<p>22c</p>	 <p>[1433190-03-4 ]</p>	 <p>[654664-63-8 ]</p>		<p>79%</p>

[0221]

<p>23c</p>  <p>1433190-00-1 ]</p>	 <p>[1158227-50-9]</p>		<p>76%</p>
<p>24c</p>  <p>[1346571-50-3 ]</p>	 <p>[654664-63-8]</p>		<p>68%</p>
<p>25c</p>  <p>[1346571-45-6 ]</p>	 <p>[1235876-72-8 ]</p>		<p>84%</p>
<p>26c</p>  <p>[88312-88-3 ]</p>	 <p>[1372893-20-3]</p>		<p>63%</p>
<p>27c</p>  <p>[101879-84-9 ]</p>	 <p>[2020404-50-4]</p>		<p>81%</p>

[0222]

28C	 [1615703-25-7]	 [654664-63-8]	 67%
29c	 [1346571-45-6]	 [654664-63-8]	 86%
30c	 [1346571-40-1]	 [1235876-72-8]	 83%
31c	 [1346571-40-1]	 [1235876-72-8]	 84%

[0223]

[0224] A) OLED 의 제작

[0225] 하기 실시예 V1 및 E1 (표 1 참조) 은 OLED 의 데이터를 도시한다.

[0226] 실시예 V1 - E1 의 기판 전처리:

[0227] 구조화된 ITO (50 nm, 인듐 주석 산화물) 를 갖는 유리 판은, OLED 가 프로세싱되는 기판을 형성한다. OLED 재료를 증발시키기 전에, 기판을 습식 프로세스 (여과된 탈이온수 및 Merck KGaA의 세제 "Extran" 사용) 로 세척한다. 유리 기판을 그후 170 °C에서 15 분 동안 건조시킨다.

[0228] 후속하여 깨끗하고 건조한 기판을 산소에 노출시킨 후 아르곤 플라즈마에 노출시킨다.

[0229] OLED 는 원칙적으로 하기의 층 구조를 갖는다: 기판 / 정공 수송층 (HTL) / 선택적인 중간층 (IL) / 전자 차단층 (EBL) / 방출층 (EML) / 선택적인 정공 차단층 (HBL) / 전자 수송층 (ETL) / 선택적인 전자 주입층 (EIL) 및 마지막으로 캐소드. 캐소드는 100 nm 두께의 알루미늄 층에 의해 형성된다. 정확한 층 구조는 표 1 에 표시되어 있다 (명확성을 위해 ITO 및 알루미늄 층은 생략됨). OLED 제작에 사용된 재료는 표 2 에 제시된다.

[0230] 모든 재료는 진공 챔버에서 열 증착으로 공급된다. 방출층은 여기서 항상 적어도 하나의 매트릭스 재료 (호스트 재료) 및 방출 도펀트 (방출체) 로 이루어지며, 이는 동시 증발에 의해 특정 부피비로 매트릭스 재료 또는 매트릭스 재료들과 혼합된다. CbzT1:SdT1:TEG1(41%:41%:18%) 와 같은 표현은 여기서, 재료 CbzT1 이 층에 41% 의 부피비로 존재하고, SdT1 이 층에 41% 의 부피비로 존재하고, TEG1 이 층에 18% 의 부피비로 존재한다는 것을 의미한다. 유사하게, 전자 수송층은 또한 2 개 재료의 혼합물로 이루어질 수 있다.

- [0231] OLED 는 표준 방법에 의해 특성화된다.
- [0232] 이를 위해 전계발광 스펙트럼과 수명이 결정된다. 전계발광 스펙트럼은 1000 cd/m<sup>2</sup> 의 휘도에서 결정되고, 대응하는 CIE 1931 x 및 y 색 좌표가 계산된다.
- [0233] 수명 LT는 시간 (h) 단위로 정의되며, 그후 정전류 밀도 j<sub>0</sub> 에서 시작 밝기는 시작 밝기의 %로 특정 레벨 L1로 감소된다.
- [0234] 여기서 L1=80%는, 주어진 수명 LT가 밝기가 시작 값의 80%로 감소하는 시간에 해당함을 의미한다.
- [0235] **인광 OLED 에서 호스트 재료로서의 본 발명의 화합물의 용도**
- [0236] 본 발명의 화합물은 예를 들어 인광성 녹색 OLED의 방출층 (EML) 에 사용될 수 있다. 화합물 CbzT1 과 EG1 내지 EG5 중 하나의 본 발명의 조합은 방출층에서 매트릭스 재료로 사용된다.
- [0237] 이하의 섹션에서 여러 예를 더 자세히 기술하여 본 발명의 OLED 의 이점을 보여준다.
- [0238] **인광 OLED 에서 호스트 재료로서의 본 발명의 화합물의 용도**
- [0239] 예를 들어 18%의 EML에서 보다 높은 방출체 농도를 갖는 실시예 V1과 같은 최신 기술에 따른 화합물을 사용함으로써, 0.33/0.63 범위의 x/y를 갖는 우수한 색 좌표에 도달할 수 있다.
- [0240] 그럼에도 불구하고, 이러한 디바이스의 수명은 그리 높지 않다.
- [0241] 유사한 색 좌표에서 실시예 V1과 같은 최신 기술에 비해 25-30%까지 수명의 실질적인 개선은 예를 들어 CbzT1 및 화합물 EG1 내지 EG5 중 하나의 본 발명의 조합물 및 유사한 방출체 농도 (예를 들어 18%) 를 실시예 E1에서와 같이 방출층에 사용함으로써 달성될 수 있다.

**표 1**

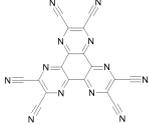
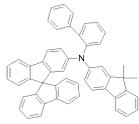
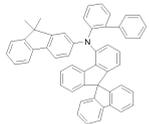
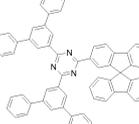
**표 1: OLED의 구조**

예	HIL 두께	HTL 두께	EBL 두께	EML 두께	HBL	ETL 두께	EIL 두께
V1	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	CbzT1:SdT1:TEG1 (41%:41%:18%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E1	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	CbzT1:EG1:TEG1 (41%:41%:18%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E2	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	CbzT1:EG2:TEG1 (41%:41%:18%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E3	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	CbzT1:EG3:TEG1 (41%:41%:18%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E4	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	CbzT1:EG4:TEG1 (41%:41%:18%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E5	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	CbzT1:EG5:TEG1 (41%:41%:18%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm

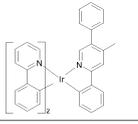
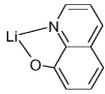
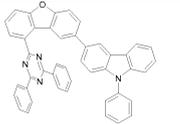
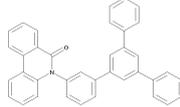
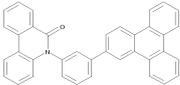
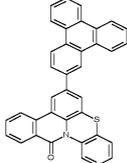
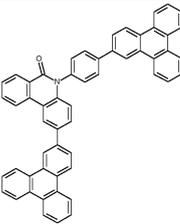
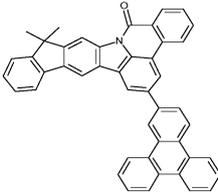
[0242]

표 2

표 2: OLED에서 사용되는 재료의 화학 구조

	
HATCN	SpMA1
	
SpMA2	ST2

[0243]

	
TEG1	LiQ
	
CbzT1	Sd11
	
EG1	EG2
	
EG3	EG4
	
EG5	

[0244]

표 3

표 3: OLED 데이터							
예	U1000 (V)	SE1000 (cd/A)	EQE 1000 (%)	1000 cd/m <sup>2</sup> 에서의 CIE x/y	L <sub>0</sub> ; j <sub>0</sub>	L <sub>1</sub> %	LD (h)
E1	<3.7	>57	>15	0.32/0.62	20 mA/cm <sup>2</sup>	80	90
E2	<3.6	>60	>18	0.32/0.62	20 mA/cm <sup>2</sup>	80	125
E3	<3.5	>56	>18	0.32/0.62	20 mA/cm <sup>2</sup>	80	120
E4	<3.2	>54	>18	0.32/0.62	20 mA/cm <sup>2</sup>	80	127
E5	<3.3	>59	>18	0.32/0.62	20 mA/cm <sup>2</sup>	80	128

[0245]