

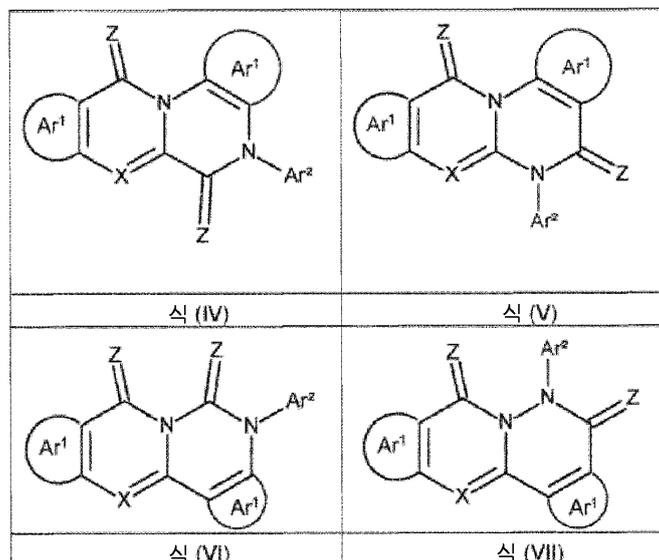
**(19) 대한민국특허청(KR)**
(12) 공개특허공보(A)(11) 공개번호 10-2022-0158017
(43) 공개일자 2022년11월29일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 487/04 (2006.01) C07D 471/04 (2006.01)
C07D 495/14 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (52) CPC특허분류
C07D 487/04 (2022.08)
C07D 471/04 (2022.08)
- (21) 출원번호 10-2022-7036495
(22) 출원일자(국제) 2021년03월22일
심사청구일자 없음
(85) 번역문제출일자 2022년10월19일
(86) 국제출원번호 PCT/EP2021/057202
(87) 국제공개번호 WO 2021/191117
국제공개일자 2021년09월30일
- (30) 우선권주장
20165094.2 2020년03월24일
유럽특허청(EPO)(EP)
- (71) 출원인
메르크 파텐트 게엠베하
독일 64293 다름슈타트 프랑크푸르터 스트라세 250
- (72) 발명자
파르함 아미르 호싸인
독일 64293 다름슈타트 프랑크푸르터 슈트라세 250 메르크 카게아아 씨/오
에렌라이히 크리스티안
독일 64293 다름슈타트 프랑크푸르터 슈트라세 250 메르크 카게아아 씨/오
엔겔하르트 옌스
독일 64293 다름슈타트 프랑크푸르터 슈트라세 250 메르크 카게아아 씨/오
- (74) 대리인
특허법인코리아나

전체 청구항 수 : 총 18 항

(54) 발명의 명칭 전자 디바이스용 재료**(57) 요약**

본원은 식 (IV) 내지 (VII) 의 복소환 화합물에 관한 것이고, 전자 디바이스에서 상기 화합물의 용도에 관한 것이고, 상기 화합물의 제조 방법에 관한 것이다.

대표도

(52) CPC특허분류

C07D 495/14 (2013.01)

C09K 11/06 (2022.01)

H01L 51/0067 (2013.01)

H01L 51/0072 (2013.01)

H01L 51/0074 (2013.01)

H01L 51/5016 (2013.01)

H01L 51/5072 (2013.01)

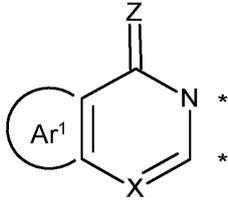
H01L 51/5096 (2013.01)

명세서

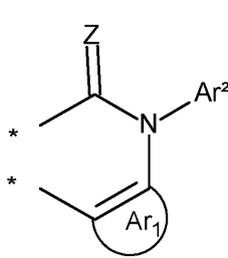
청구범위

청구항 1

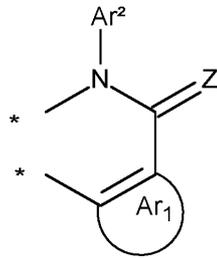
하기 식 (I) 의 화합물.



식 중 하기 식 (II) 또는 식 (III)의 단위가 고리에서 *로 표시된 결합 부위에서, 각 경우에 *로 표시된 결합을 통해, 결합되며,



식 (II)



식 (III),

그리고 식 중, 나타내는 변수들은 다음과 같다:

X 는 N 또는 CAr³ 이다;

Z 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 O 및 S 으로부터 선택된다;

Ar¹ 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 융합된(fused-on) 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 융합된 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 상기 방향족 고리 시스템 및 상기 헤테로방향족 고리 시스템은 각각 R¹ 라디칼로 치환된다;

Ar² 는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐 기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 여기서 언급된 기들은 각각 하나 이상의 R² 라디칼로 치환된다;

Ar³ 은, H, D, F, Cl, Br, I, C(=O)R³, CN, Si(R³)₃, N(R³)₂, P(=O)(R³)₂, OR³, S(=O)R³, S(=O)₂R³, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R³ 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH₂ 기는 -R³C=CR³-, -C≡C-, Si(R³)₂, C=O, C=NR³, -C(=O)O-, -C(=O)NR³-, NR³, P(=O)(R³), -O-, -S-, SO 또는 SO₂ 에 의해 대체될 수도 있다;

R^1 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, $P(=O)(R^4)_2$, OR^4 , $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R^1 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R^4 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, C=O, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, NR^4 , $P(=O)(R^4)$, -O-, -S-, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있다;

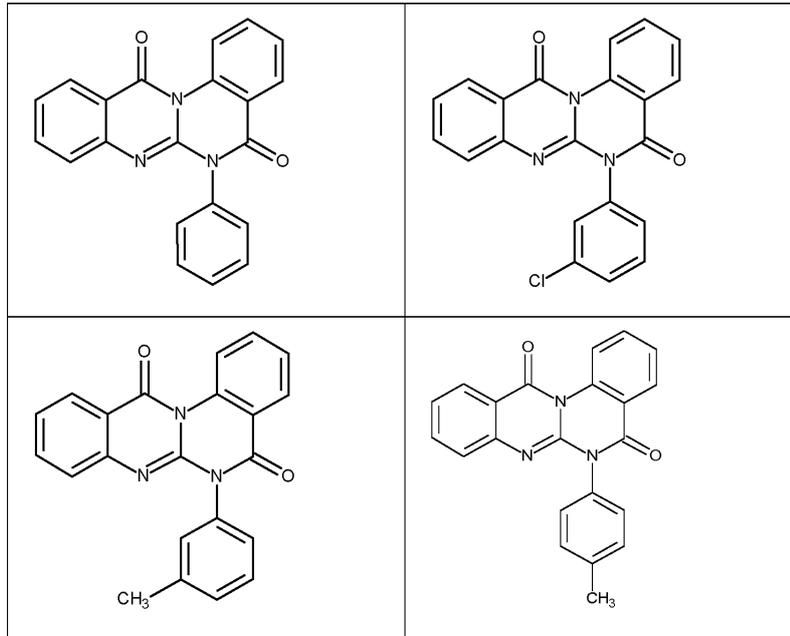
R^2 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, $P(=O)(R^4)_2$, OR^4 , $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R^2 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R^4 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, C=O, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, NR^4 , $P(=O)(R^4)$, -O-, -S-, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있다;

R^3 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, $P(=O)(R^4)_2$, OR^4 , $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R^3 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R^4 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, C=O, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, NR^4 , $P(=O)(R^4)$, -O-, -S-, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있다;

R^4 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^5$, CN, $Si(R^5)_3$, $N(R^5)_2$, $P(=O)(R^5)_2$, OR^5 , $S(=O)R^5$, $S(=O)_2R^5$, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R^4 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R^5 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^5C=CR^5-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^5)_2$, C=O, $C=NR^5$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^5-$, NR^5 , $P(=O)(R^5)$, -O-, -S-, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있다;

R⁵ 은 각각의 경우 동일하거나 상이하며, H, D, F, Cl, Br, I, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐 기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템로부터 선택되고; 2 개 이상의 R⁵ 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기, 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 F 및 CN 으로 선택된 하나 이상의 라디칼에 의해 치환될 수도 있다;

하기 화합물들을 제외한다:



청구항 2

제 1 항에 있어서,

Z 가 0 인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 3

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서,

X 가 N 인 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 4

제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 있어서,

Ar¹ 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하고, 벤젠, 바이페닐, 피리딘, 피리미딘, 피리다진, 나프탈렌, 퀴놀린, 퀴나졸린, 페난트렌, 안트라센, 플루오렌, 카르바졸, 푸란, 디벤조푸란, 티오펜 및 디벤조티오펜, 바람직하게는 벤젠, 피리딘, 푸란 및 티오펜, 보다 바람직하게는 벤젠으로부터 선택된 융합된 기로부터 선택되고, 각각은 R¹ 라디칼에 의해 치환되는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 5

제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 있어서,

Ar² 는 벤젠, 피리딘, 피리미딘, 피리다진, 나프탈렌, 퀴놀린, 퀴나졸린, 페난트렌, 안트라센, 플루오렌, 카르바졸, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 바이페닐, 테르페닐, 쿼터페닐, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 디히드로페난트렌, 디히드로피렌, 테트라히드로피렌, 인데노플루오렌, 트룩센, 이소트룩센, 스피로트룩센,

스피로이스트록센, 인데노카르바졸 (각각은 R² 라디칼에 의해 치환됨) 으로부터, 또는 이들 기의 조합으로부터 선택되고; 바람직하게는 페닐, 피리딘, 나프탈렌, 트리페닐렌, 카르바졸, 피리미딘, 트리아진, 트리아지닐페닐렌 및 바이페닐 (각각은 R² 라디칼에 의해 치환됨) 로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 6

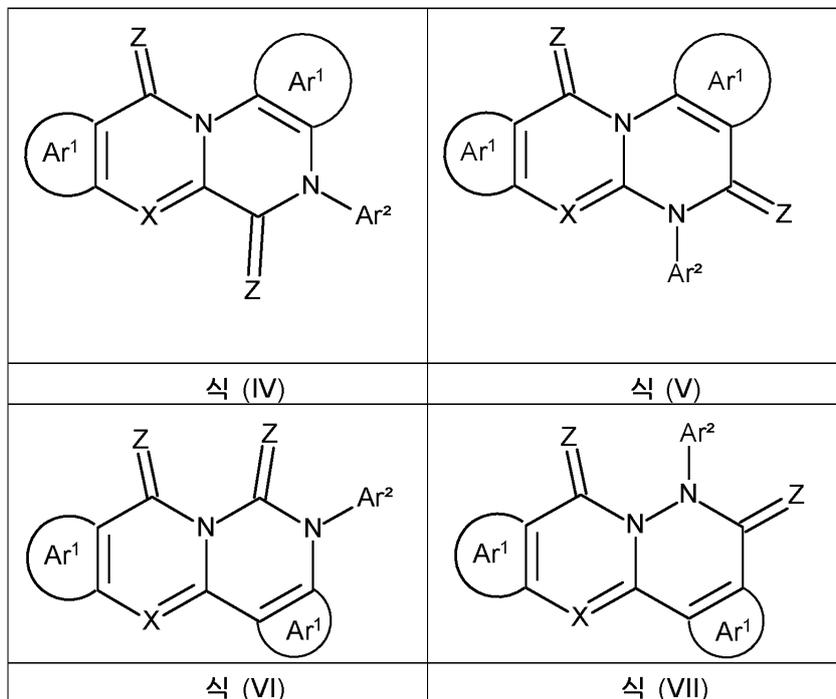
제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 있어서,

Ar³ 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하고, 6 내지 40개의 방향족 고리 원자를 갖고 R³ 라디칼로 치환된 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40개의 방향족 고리 원자를 갖고 R³ 라디칼로 치환된 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 7

제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 화합물은 하기 식 (IV) 및 (VII) 중 하나에 따르는 것을 특징으로 하는 화합물.

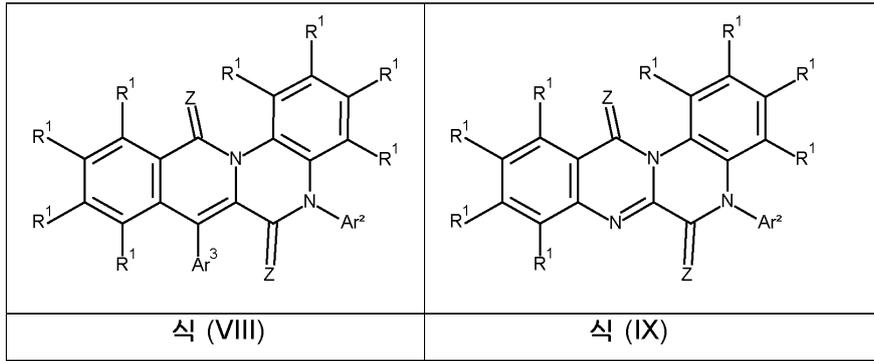


식 중 변수는 제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 정의된 바와 같다.

청구항 8

제 1 항 내지 제 7 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 화합물은 하기 식 (VIII) 및 (IX) 중 하나에 따르는 것을 특징으로 하는 화합물.

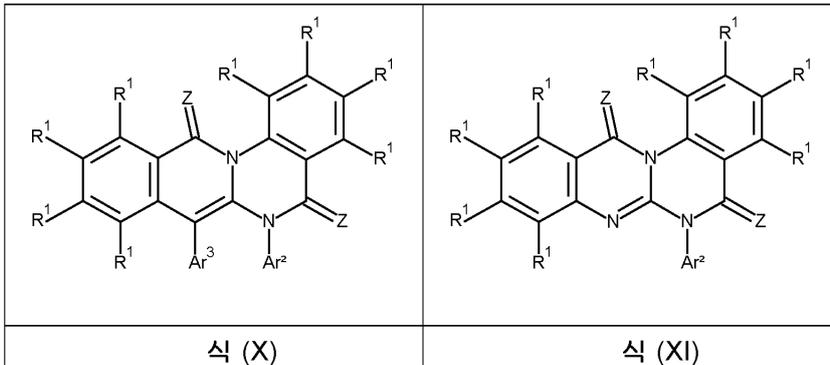


식 중 변수는 제 1 항 내지 제 7 항 중 어느 한 항에 정의된 바와 같다.

청구항 9

제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 화합물은 하기 식 (X) 및 (XI) 중 하나에 따르는 것을 특징으로 하는 화합물.

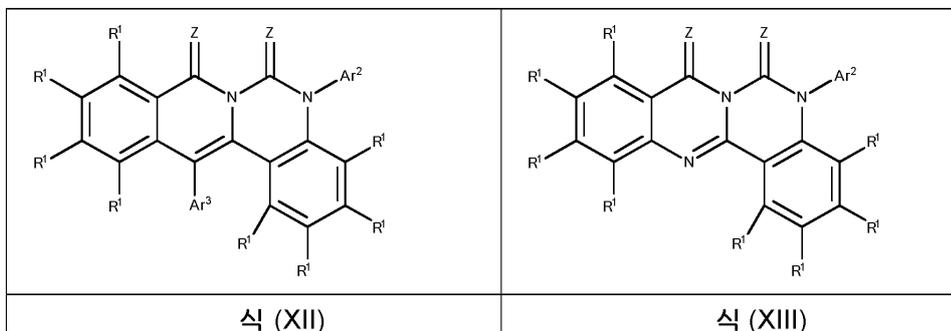


식 중 변수는 제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 정의된 바와 같다.

청구항 10

제 1 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 화합물은 하기 식 (XII) 및 (XIII) 중 하나에 따르는 것을 특징으로 하는 화합물.



식 중 변수는 제 1 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 정의된 바와 같다.

청구항 11

제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 있어서,

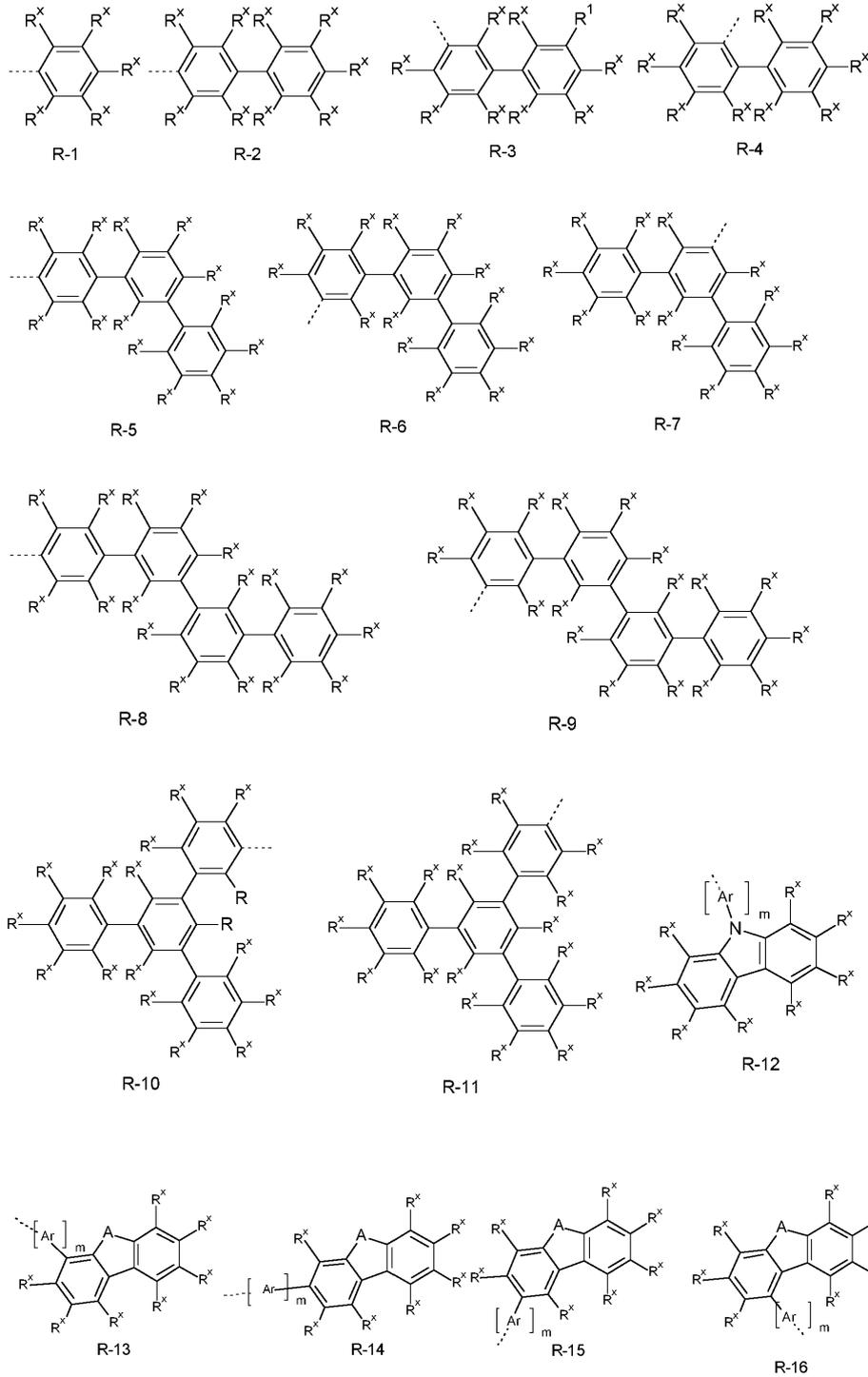
R¹, Ar² 및 Ar³로부터 선택되는 적어도 하나의 기, 바람직하게는 2개의 기는 6 내지 40개의 방향족 고리 원자를

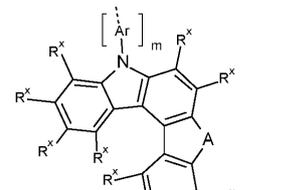
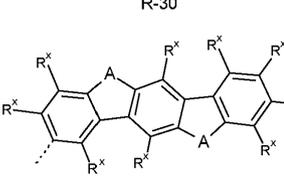
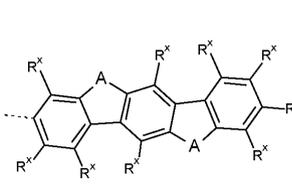
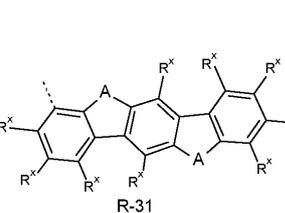
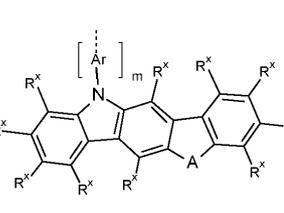
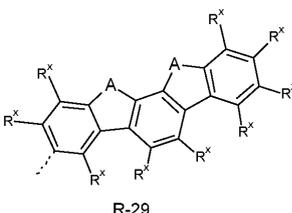
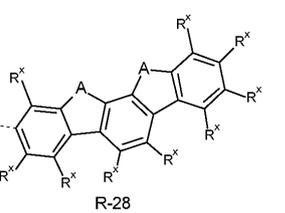
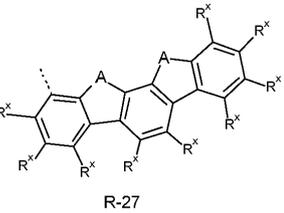
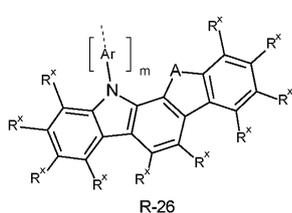
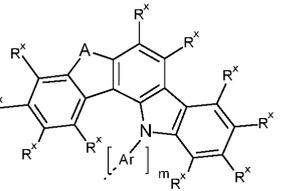
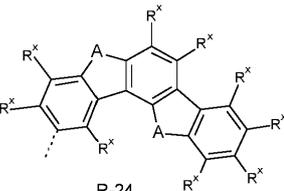
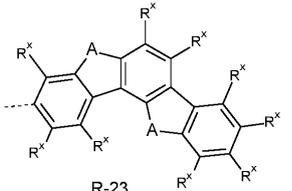
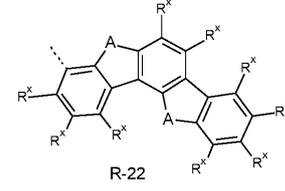
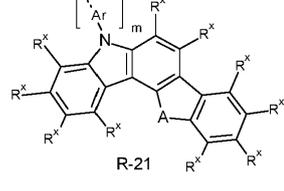
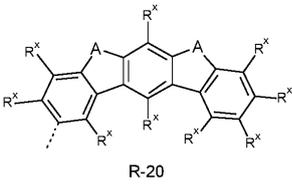
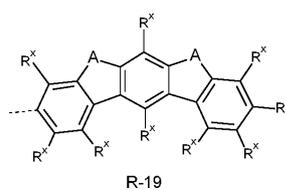
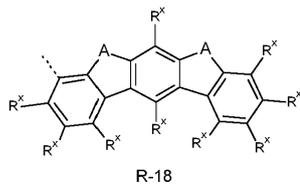
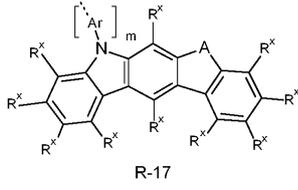
갖고 R⁴ 또는 R² 또는 R³ 라디칼로 치환된 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40개의 방향족 고리 원자를 갖고 R⁴ 또는 R² 또는 R³ 라디칼로 치환된 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.

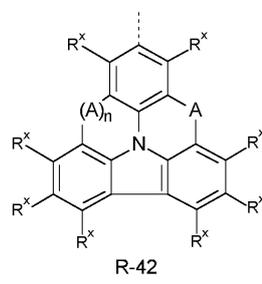
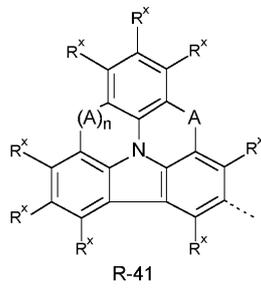
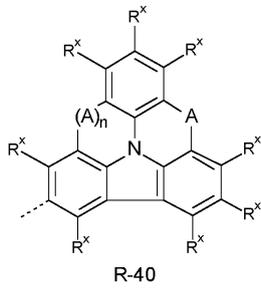
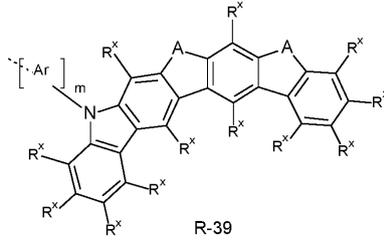
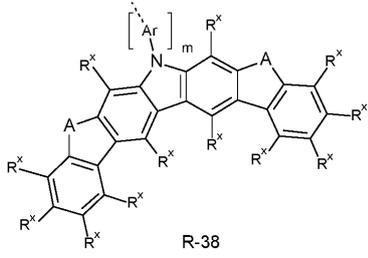
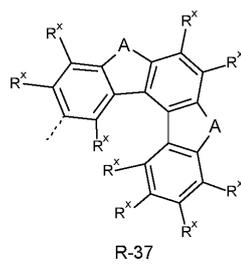
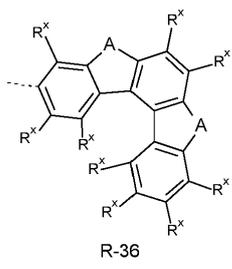
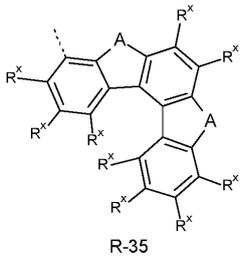
청구항 12

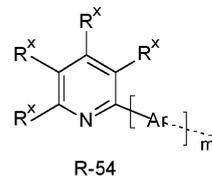
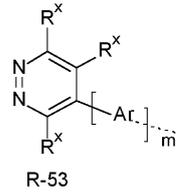
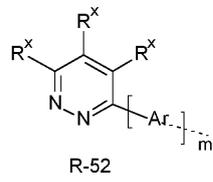
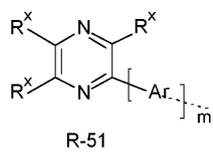
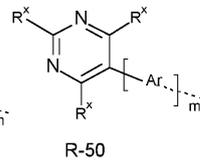
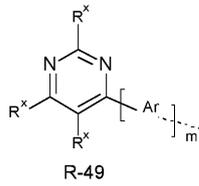
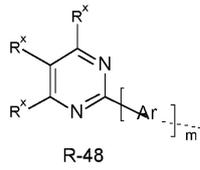
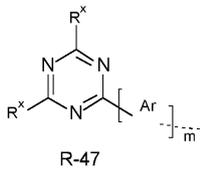
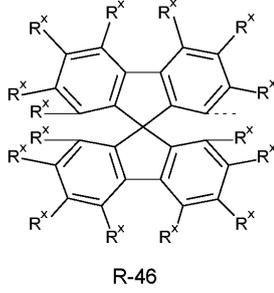
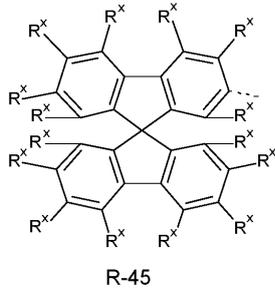
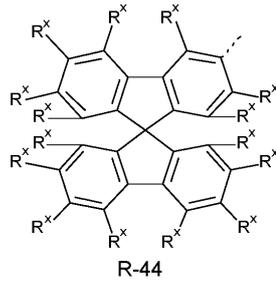
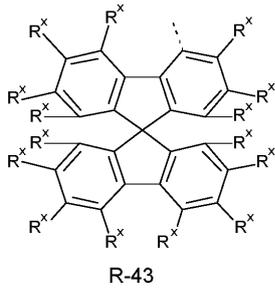
제 11 항에 있어서,

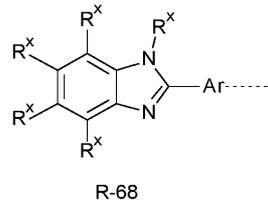
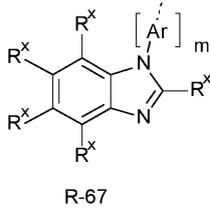
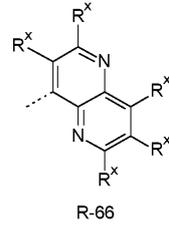
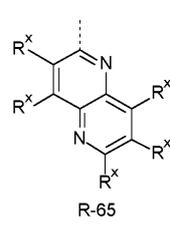
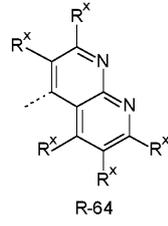
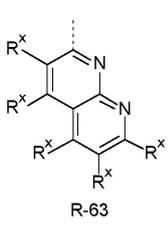
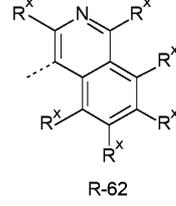
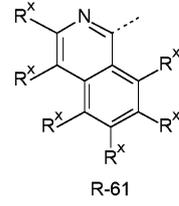
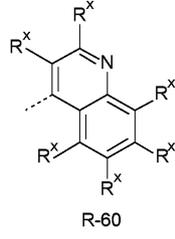
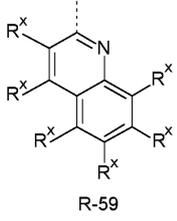
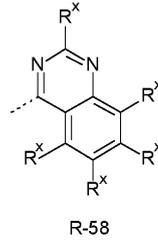
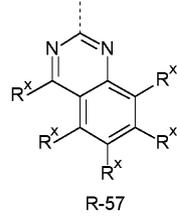
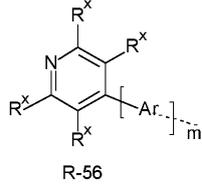
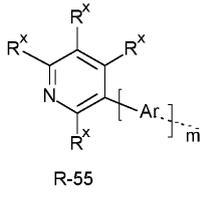
상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 바람직하게는 R-1 내지 R-84 기로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.

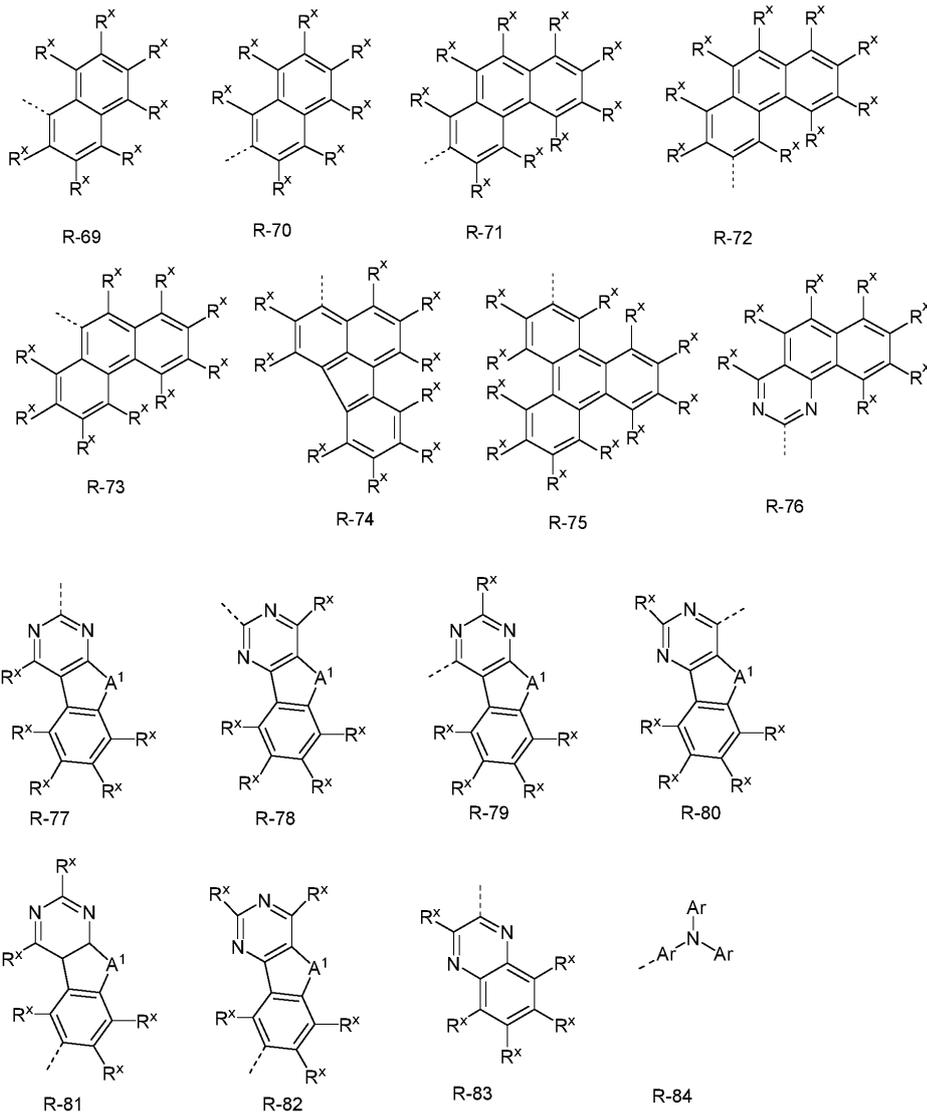












여기서 점선 결합은 식 (I) 에서의 베이스 골격에서 탄소 원자에 대한 결합을 나타내고, 여기서 또한:

- R-1 내지 R-84 기에서 Ar 은 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R^x 라디칼로 치환되는 방향족 고리 시스템, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R^x 라디칼로 치환되는 헤테로방향족 고리 시스템이다;

- A 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, C(R^x)₂, NR^x, S 및 O 로부터 선택된다;

- A¹ 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, C(R^x)₂, NR^x, S 및 O 로부터 선택된다;

- m은 0 또는 1이다; 여기서 m = 0은 당해 기가 부재하고 당해 기에 결합하는 기가 서로 직접 결합됨을 의미한다;

- n 은 0 또는 1 이고, 여기서 n = 0 는, A 기가 이 위치에서 결합되지 않고, 그 대신 R^x 라디칼이 대응하는 탄소 원자에 결합됨을 의미한다;

여기서 R^x 는 다음과 같다:

- R¹ 가 R-1 내지 R-84로부터 선택되는 기인 경우, R^x 는 R⁴ 이다;

- Ar² 가 R-1 내지 R-84 로부터 선택되는 기인 경우, R^x 는 R² 이다;

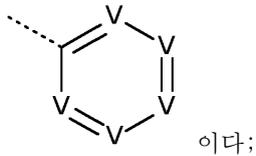
- Ar³ 가 R-1 내지 R-84 로부터 선택되는 기인 경우, R^x 는 R³ 이다.

청구항 13

제 1 항 내지 제 12 항 중 어느 한 항에 있어서,

하기 식 (IV) 내지 (VII) 중 하나에 따르며, 바람직하게는 식 (IV) 내지 (VI) 중 하나에 따르고, 여기서:

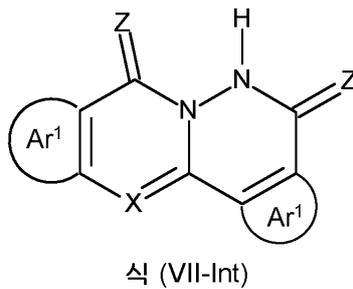
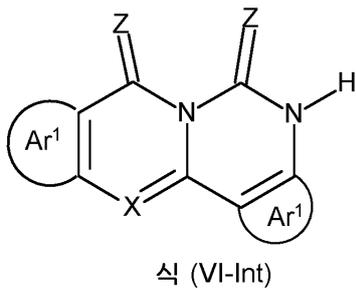
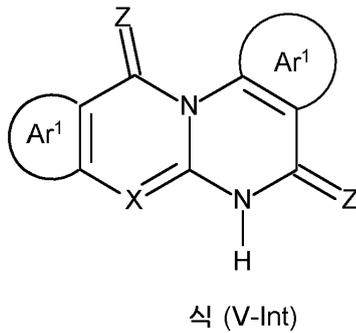
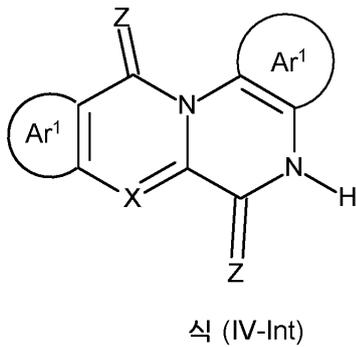
- Z 는 동일하거나 상이하고 O 및 S 로부터 선택된다;
- X 는 N 또는 CAr³ 이다;
- Ar¹ 은 하나 이상의 R¹ 라디칼에 의해 치환되는 페닐이다; 그리고
- Ar² 은



- 여기서 V는 동일하거나 상이하고 N 또는 CR² 이고, 여기서:
- 바람직하게는 3 개 이하의 V 는 N 이다;
- 바람직하게는 2개 이상의 인접한 V 는 N이 아니다; 그리고
- 바람직하게는, Ar² 는 페닐 기 또는 트리아진 기이며, 각각은 하나 이상의 R² 라디칼로 치환되는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 14

제 1 항 내지 제 13 항 중 어느 한 항에 따른 화합물의 제조 방법으로서, 하기 식 (IV-Int) 내지 (VII-Int) 중 하나의 중간체가 먼저,

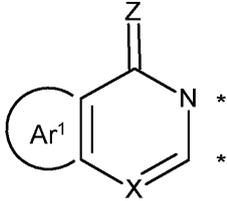


바람직하게 폐환 반응에 의해 제조되고, Ullmann 반응 또는 Buchwald 반응에서, 방향족 또는 헤테로방향족 시스템이 다음으로 식 (I) 에서의 Ar² 기의 위치에 도입되고, 다음으로 할로젠화 반응, 바람직하게는 브롬화 반응이

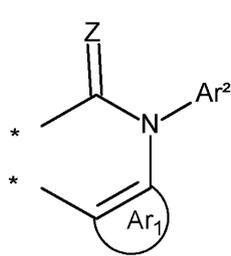
Ar¹ 고리 중 하나 상에서 수행되며, 이는 할로젠 치환기, 바람직하게 브롬 치환기를 Ar¹ 고리 중 하나에 도입하고, 다음으로 Suzuki 반응이 수행되며, 여기서 방향족 시스템이 할로젠 치환기, 바람직하게 브롬 치환기의 위치에 도입되는 것을 특징으로 하는 화합물의 제조 방법.

청구항 15

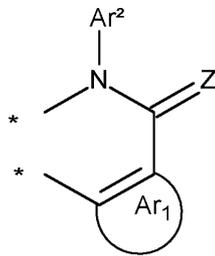
하기 식 (I) 의 화합물,



[식 중 하기 식 (II) 또는 식 (III)의 단위가 고리에서 *로 표시된 결합 부위에서, 각 경우에 *로 표시된 결합을 통해, 결합되며,



식 (II)



식 (III),

그리고 식 중, 나타내는 변수들은 다음과 같다:

X 는 N 또는 CAr³ 이다;

Z 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 O 및 S 으로부터 선택된다;

Ar¹ 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 융합된(fused-on) 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 융합된 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고, 상기 방향족 고리 시스템 및 상기 헤테로방향족 고리 시스템은 각각 R¹ 라디칼로 치환된다;

Ar² 는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐 기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 여기서 언급된 기들은 각각 하나 이상의 R² 라디칼로 치환된다;

Ar³ 은, H, D, F, Cl, Br, I, C(=O)R³, CN, Si(R³)₃, N(R³)₂, P(=O)(R³)₂, OR³, S(=O)R³, S(=O)₂R³, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R³ 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH₂ 기는 -R³C=CR³-, -C≡C-, Si(R³)₂, C=O, C=NR³, -C(=O)O-, -C(=O)NR³-, NR³, P(=O)(R³), -O-, -S-, SO 또는 SO₂ 에 의해 대체될 수도 있다;

R¹ 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, C(=O)R⁴, CN, Si(R⁴)₃, N(R⁴)₂, P(=O)(R⁴)₂, OR⁴,

$S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R^1 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R^4 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, $C=O$, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, NR^4 , $P(=O)(R^4)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있다;

R^2 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H , D , F , Cl , Br , I , $C(=O)R^4$, CN , $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, $P(=O)(R^4)_2$, OR^4 , $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R^2 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R^4 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, $C=O$, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, NR^4 , $P(=O)(R^4)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있다;

R^3 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H , D , F , Cl , Br , I , $C(=O)R^4$, CN , $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, $P(=O)(R^4)_2$, OR^4 , $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R^3 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R^4 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, $C=O$, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, NR^4 , $P(=O)(R^4)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있다;

R^4 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H , D , F , Cl , Br , I , $C(=O)R^5$, CN , $Si(R^5)_3$, $N(R^5)_2$, $P(=O)(R^5)_2$, OR^5 , $S(=O)R^5$, $S(=O)_2R^5$, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R^4 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R^5 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^5C=CR^5-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^5)_2$, $C=O$, $C=NR^5$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^5-$, NR^5 , $P(=O)(R^5)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있다;

R^5 은 각각의 경우 동일하거나 상이하며, H , D , F , Cl , Br , I , CN , 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알킬 또는

알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알킬닐 기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템로부터 선택되고; 2 개 이상의 R⁵ 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알킬닐 기, 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 F 및 CN 으로 선택된 하나 이상의 라디칼에 의해 치환될 수도 있다]; 및 적어도 하나의 추가 화합물을 포함하는 포블레이션.

청구항 16

전자 디바이스에서의, 제 15 항에 정의된 식 (I) 의 화합물의 용도.

청구항 17

제 15 항에 정의된 식 (I) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전자 디바이스.

청구항 18

제 17 항에 있어서,

상기 전자 디바이스는 유기 전계 발광 디바이스이고, 상기 화합물이 방출층에서 하나 이상의 인광 방출체를 위한 또는 TADF (thermally activated delayed fluorescence) 를 나타내는 방출체를 위한 매트릭스 재료로서 사용되거나 및/또는 전자 수송층에서 사용되거나 및/또는 정공 차단층에서 사용되는 것을 특징으로 하는, 전자 디바이스.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 전자 디바이스에 사용하기 위한 재료, 및 상기 재료를 포함하는 전자 디바이스에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 전자 디바이스는 본 출원의 맥락에서, 유기 반도체 재료를 기능성 재료로서 포함하는, 유기 전자 디바이스로 불리는 것을 의미하는 것으로 이해된다. 보다 특히, 이들은 OLED (organic electroluminescent device) 를 의미하는 것으로 이해된다. 용어 OLED 는 유기 화합물을 포함하는 하나 이상의 층을 가지며 전기 전압의 인가시에 광을 방출하는 전자 디바이스를 의미하는 것으로 이해된다. OLED의 구성 및 기능의 일반적인 원리는 당업자에게 공지되어 있다.

[0003] OLED 에서 사용된 방출 재료는 흔히 인광 유기금속성 착물이다. 일반적으로, 예를 들어 효율, 작동 전압 및 수명과 관련하여 OLED, 특히 또한 삼중항 방출 (인광) 을 나타내는 OLED 에서의 개선의 필요성이 여전히 존재한다. 인광 OLED 의 특성은 사용되는 삼중항 방출체에 의해서만 결정되는 것은 아니다. 더욱 구체적으로, 사용되는 다른 재료, 예컨대 매트릭스 재료도 여기서 특히 중요하다. 따라서, 이들 재료의 개선은 또한 OLED 특성의 개선에 이를 수 있다. OLED 에서 삼중항 방출체용 매트릭스 재료로 사용되는 알려진 부류의 재료의 예는 방향족 이소퀴놀린 재료이다.

발명의 내용

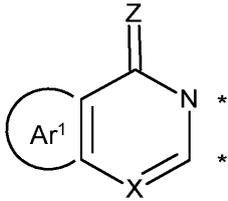
해결하려는 과제

[0004] 본 발명의 목적은 OLED 에서, 특히 인광 방출체용 매트릭스 재료로서 또는 전자 수송 재료로서 사용하기에 적합하고 그 안에서 특성을 개선시키는 화합물을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

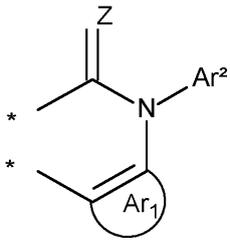
[0005] 놀랍게도, 이 목적은 OLED 에서 사용하기에 양호하게 적합한 이하 상세히 설명되는 특정 화합물에 의해 달성된다는 것을 알아냈다. 이들 OLED 는 특히 긴 수명, 고효율 및 낮은 작동 전압을 갖는다. 따라서 본 발명은 이들 화합물, 및 이들 화합물을 포함하는 전자 디바이스, 특히 유기 전계 발광 디바이스를 제공한다.

[0006] 따라서, 본 출원은 식 (I) 의 화합물을 제공하며,

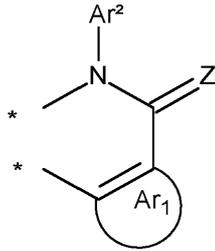


[0007]

[0008] 식 중 하기 식 (II) 또는 식 (III)의 단위가 고리에서 *로 표시된 결합 부위에서, 각 경우에 *로 표시된 결합을 통해, 결합되며,



식 (II)



식 (III),

[0009]

[0010] 그리고 식 중, 나타내는 변수들은 다음과 같다:

[0011] X 는 N 또는 CAr³ 이다;

[0012] Z 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 O 및 S 으로부터 선택된다;

[0013] Ar¹ 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 융합된(fused-on) 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 융합된 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 상기 방향족 고리 시스템 및 상기 헤테로방향족 고리 시스템은 각각 R¹ 라디칼로 치환된다;

[0014] Ar² 는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐 기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 여기서 언급된 기들은 각각 하나 이상의 R² 라디칼로 치환된다;

[0015] Ar³ 은, H, D, F, Cl, Br, I, C(=O)R³, CN, Si(R³)₃, N(R³)₂, P(=O)(R³)₂, OR³, S(=O)R³, S(=O)₂R³, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R³ 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH₂ 기는 -R³C=CR³-, -C≡C-, Si(R³)₂, C=O, C=NR³, -C(=O)O-, -C(=O)NR³-, NR³, P(=O)(R³), -O-, -S-, SO 또는 SO₂ 에 의해 대체될 수도 있다;

[0016] R¹ 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, C(=O)R⁴, CN, Si(R⁴)₃, N(R⁴)₂, P(=O)(R⁴)₂, OR⁴, S(=O)R⁴, S(=O)₂R⁴, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R¹ 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상

기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R⁴ 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH₂ 기는 -R⁴C=CR⁴-, -C≡C-, Si(R⁴)₂, C=O, C=NR⁴, -C(=O)O-, -C(=O)NR⁴-, NR⁴, P(=O)(R⁴), -O-, -S-, SO 또는 SO₂ 에 의해 대체될 수도 있다;

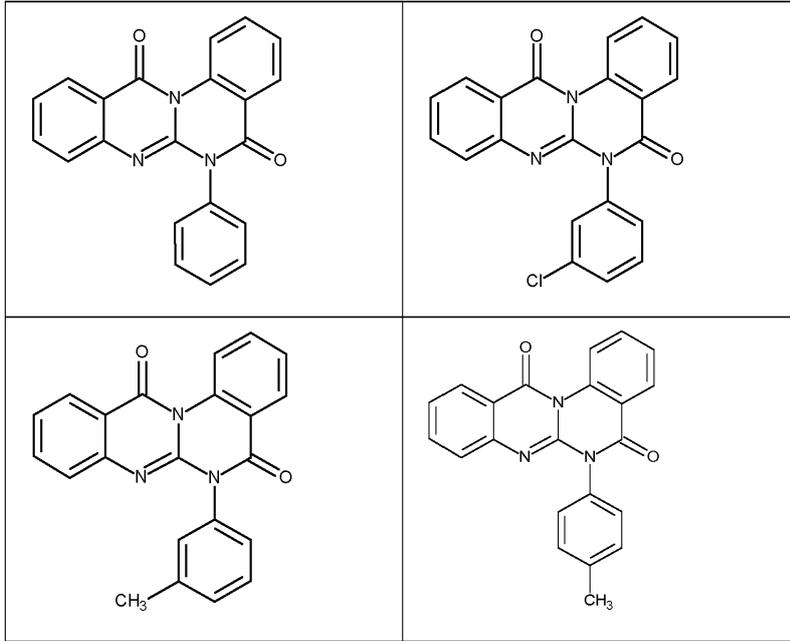
[0017] R² 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, C(=O)R⁴, CN, Si(R⁴)₃, N(R⁴)₂, P(=O)(R⁴)₂, OR⁴, S(=O)R⁴, S(=O)₂R⁴, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R² 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R⁴ 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH₂ 기는 -R⁴C=CR⁴-, -C≡C-, Si(R⁴)₂, C=O, C=NR⁴, -C(=O)O-, -C(=O)NR⁴-, NR⁴, P(=O)(R⁴), -O-, -S-, SO 또는 SO₂ 에 의해 대체될 수도 있다;

[0018] R³ 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, C(=O)R⁴, CN, Si(R⁴)₃, N(R⁴)₂, P(=O)(R⁴)₂, OR⁴, S(=O)R⁴, S(=O)₂R⁴, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R³ 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R⁴ 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH₂ 기는 -R⁴C=CR⁴-, -C≡C-, Si(R⁴)₂, C=O, C=NR⁴, -C(=O)O-, -C(=O)NR⁴-, NR⁴, P(=O)(R⁴), -O-, -S-, SO 또는 SO₂ 에 의해 대체될 수도 있다;

[0019] R⁴ 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, C(=O)R⁵, CN, Si(R⁵)₃, N(R⁵)₂, P(=O)(R⁵)₂, OR⁵, S(=O)R⁵, S(=O)₂R⁵, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R⁴ 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R⁵ 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH₂ 기는 -R⁵C=CR⁵-, -C≡C-, Si(R⁵)₂, C=O, C=NR⁵, -C(=O)O-, -C(=O)NR⁵-, NR⁵, P(=O)(R⁵), -O-, -S-, SO 또는 SO₂ 에 의해 대체될 수도 있다;

[0020] R⁵ 은 각각의 경우 동일하거나 상이하며, H, D, F, Cl, Br, I, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐 기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2 개 이상의 R⁵ 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기, 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 F 및 CN 으로 선택된 하나 이상의 라디칼에 의해 치환될 수도 있다;

[0021] 하기 화합물들을 제외한다:



[0022]

[0023] 이하의 정의들은 본원에서 사용되는 화학 기에 적용 가능하다. 이들은 어떠한 더 구체적인 정의가 주어지지 않는 한 적용 가능하다.

[0024] 본 발명의 맥락에서 아릴 기는 단일 방향족 환 (cycle), 즉 벤젠, 또는 융합 방향족 다환 (polycycle), 예를 들어 나프탈렌, 페난트렌 또는 안트라센을 의미하는 것으로 이해된다. 본 출원의 맥락에서 융합된 방향족 다환은 서로 융합된 2개 이상의 단일 방향족 환으로 이루어진다. 여기서 환들 간의 융합은 환들이 서로 적어도 하나의 에지를 공유하는 것을 의미하는 것으로 이해된다. 본 발명의 맥락에서 아릴 기는 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 함유한다. 또한, 아릴 기는 방향족 고리 원자로서 어떤 헤테로원자도 함유하지 않지만, 탄소 원자만 함유한다.

[0025] 본 발명의 맥락에서 헤테로아릴 기는 단일 헤테로방향족 환, 예를 들어 피리딘, 피리미딘 또는 티오펜, 또는 융합된 헤테로방향족 다환, 예를 들어 퀴놀린 또는 카르바졸을 의미하는 것으로 이해된다. 본원의 맥락에서 융합된 헤테로방향족 다환은 서로 융합된 둘 이상의 단일 방향족 또는 헤테로방향족 환들로 이루어지며, 여기서 방향족 및 헤테로방향족 환들 중 적어도 하나는 헤테로방향족 환이다. 여기서 환들 간의 융합은 환들이 서로 적어도 하나의 에지를 공유하는 것을 의미하는 것으로 이해된다. 본 발명의 맥락에서 헤테로아릴기는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 함유하며, 이 중 적어도 하나는 헤테로원자이다. 헤테로아릴 기의 헤테로원자들은 바람직하게는 N, O 및 S 로부터 선택된다.

[0026] 각각이 위에 언급된 라디칼에 의해 치환될 수도 있는, 아릴 또는 헤테로아릴기는, 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, 벤즈이미다졸로[1,2-a]벤즈이미다졸, 나프티이미다졸, 페난트르이미다졸, 피리디미다졸, 피라진이미다졸, 퀴놀살린이미다졸, 옥사졸, 벤즈옥사졸, 나프트옥사졸, 안트르옥사졸, 페난트르옥사졸, 이속사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴놀살린, 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 유래하는 기를 의미하는 것으로 이해된다.

[0027] 본 발명의 맥락에서 방향족 고리 시스템은 반드시 아릴기를 단독으로 함유할 필요가 있는 것이 아니라, 적어도

하나의 아릴 기에 융합된 하나 이상의 비방향족 고리를 추가로 함유할 수도 있는 시스템이다. 이러한 비방향족 고리는 고리 원자로서 전적으로 탄소 원자를 함유한다. 이 정의에 의해 커버되는 기들의 예는 테트라히드로나프탈렌, 플루오렌 및 스피로바이플루오렌이다. 또한, 용어 "방향족 고리 시스템" 은, 예를 들어 바이페닐, 테르페닐, 7-페닐-2-플루오레닐, 쿼터페닐 및 3,5-디페닐-1-페닐인, 단일 결합을 통해 서로 연결된 둘 이상의 방향족 고리 시스템으로 이루어진 시스템을 포함한다. 본 발명의 맥락에서 방향족 고리 시스템은 고리 시스템에 6 내지 40 개의 탄소 원자를 함유하고 헤테로원자를 함유하지 않는다. "방향족 고리 시스템" 의 정의는 헤테로아릴 기를 포함하지 않는다.

[0028] 헤테로방향족 고리 시스템은, 고리 원자로서 적어도 하나의 헤테로원자를 함유해야 하는 것을 제외하고는, 전술한 방향족 고리 시스템의 정의에 따른다. 방향족 고리 시스템의 경우와 같이, 헤테로방향족 고리 시스템은 아릴 기 및 헤테로아릴 기를 전적으로 함유할 필요가 있는 것이 아니라, 적어도 하나의 아릴 또는 헤테로아릴 기에 융합된 하나 이상의 비방향족 고리를 추가로 함유할 수도 있다. 비방향족 고리는 고리 원자로서 탄소 원자만을 함유할 수도 있거나, 또는 하나 이상의 헤테로원자를 추가로 함유할 수도 있으며, 여기서 헤테로원자는 바람직하게는 N, O 및 S 로부터 선택된다. 이러한 헤테로방향족 고리 시스템에 대한 하나의 예는 벤조피라닐이다. 또한, 용어 "헤테로방향족 고리 시스템" 은 단일 결합, 예를 들어 4,6-디페닐-2-트리아지닐을 통해 서로 결합된 2개 이상의 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어지는 시스템을 의미하는 것으로 이해된다. 본 발명의 맥락에서, 헤테로방향족 고리 시스템은 탄소 및 헤테로원자로부터 선택되는 5 내지 40 개의 고리 원자를 함유하고, 여기서 고리 원자 중 적어도 하나는 헤테로원자이다. 헤테로방향족 고리 시스템의 헤테로원자는 바람직하게는 N, O 및 S로부터 선택된다.

[0029] 따라서, 본원에서 정의된 용어 "헤테로방향족 고리 시스템" 및 "방향족 고리 시스템" 은 방향족 고리 시스템이 고리 원자로서 헤테로원자를 가질 수 없는 반면에, 헤테로방향족 고리 시스템은 고리 원자로서 적어도 하나의 헤테로원자를 가져야 한다는 점에서 서로 상이하다. 이 헤테로원자는 비방향족 복소환 고리의 고리 원자로서 또는 방향족 복소환 고리의 고리 원자로서 존재할 수도 있다.

[0030] 위의 정의에 따라, 임의의 아릴 기는 "방향족 고리 시스템" 이라는 용어에 의해 커버되고, 임의의 헤테로아릴 기는 "헤테로방향족 고리 시스템" 이라는 용어에 의해 커버된다.

[0031] 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템은 특히 아릴기 및 헤테로아릴 기 하에서 위에 언급된 기로부터, 그리고 바이페닐, 테르페닐, 쿼터페닐, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 디히드로페난트렌, 디히드로피렌, 테트라히드로피렌, 인데노플루오렌, 트록센, 이소트록센, 스피로트록센, 스피로이소트록센, 인데노카르바졸로부터, 또는 이들 기의 조합으로부터 유도하는 기를 의미하는 것으로 이해된다.

[0032] 본 발명의 맥락에서, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기 및 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기 및 2 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (여기서 개개의 수소 원자 또는 CH₂ 기는 또한, 라디칼의 정의에서 위에 언급된 기들에 의해 치환될 수도 있음) 는 바람직하게는 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, s-부틸, t-부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, s-펜틸, 시클로펜틸, 네오펜틸, n-헥실, 시클로헥실, 네오헥실, n-헵틸, 시클로헵틸, n-옥틸, 시클로옥틸, 2-에틸헥실, 트리플루오로메틸, 펜타플루오로에틸, 2,2,2-트리플루오로에틸, 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 시클로펜테닐, 헥세닐, 시클로헥세닐, 헵테닐, 시클로헵테닐, 옥테닐, 시클로옥테닐, 에티닐, 프로피닐, 부티닐, 펜티닐, 헥시닐 또는 옥티닐 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다.

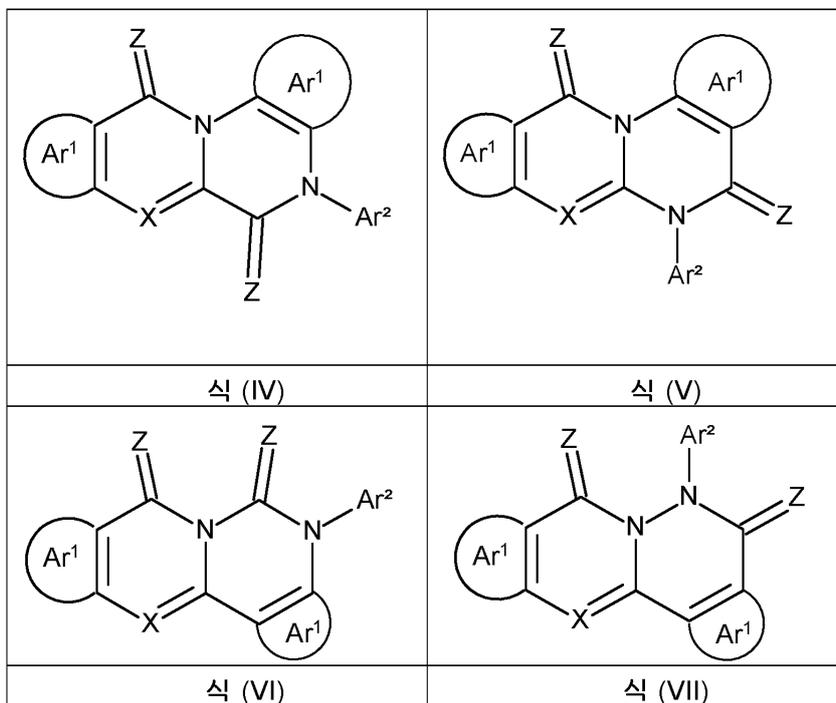
[0033] 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알콕시 또는 티오알킬기 (여기서 개개의 수소 원자 또는 CH₂ 기는 또한 라디칼의 정의에서 상기 언급된 기로 치환될 수 있음) 는 바람직하게는 메톡시, 트리플루오로메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, s-부톡시, t-부톡시, n-펜톡시, s-펜톡시, 2-메틸부톡시, n-헥소키, 시클로헥실옥시, n-헵톡시, 시클로헵틸옥시, n-옥틸옥시, 시클로옥틸옥시, 2-에틸헥실옥시, 펜타플루오로에톡시, 2,2,2-트리플루오로에톡시, 메틸티오, 에틸티오, n-프로필티오, i-프로필티오, n-부틸티오, i-부틸티오, s-부틸티오, t-부틸티오, n-펜틸티오, s-펜틸티오, n-헥실티오, 시클로헥실티오, n-헵틸티오, 시클로헵틸티오, n-옥틸티오, 시클로옥틸티오, 2-에틸헥실티오, 트리플루오로메틸티오, 펜타플루오로에틸티오, 2,2,2-트리플루오로에틸티오, 에테닐티오, 프로페닐티오, 부테닐티오, 펜테닐티오, 시클로펜테닐티오, 헥세닐티오, 시클로헥세닐티오, 헵테닐티오, 시클로헵테닐티오, 옥테닐티오, 시클로옥테닐티오, 에티닐티오, 프로피닐티오, 부티닐티오, 펜티닐티오, 헥시닐티오, 헵티닐티오 또는 옥티닐티오를 의미하는 것으로 이해된다.

- [0034] 본 출원의 문맥에서, 2개 이상의 라디칼이 함께 고리를 형성할 수도 있다는 문구는, 특히 2개의 라디칼이 화학 결합에 의해 서로 연결된다는 것을 의미하는 것으로 이해되어야 한다. 그러나, 추가적으로, 위에 언급된 문구는 또한 2개의 라디칼 중 하나가 수소인 경우에, 제 2 라디칼이 수소 원자가 결합되었던 위치에 결합되어, 고리를 형성한다는 것을 의미하는 것으로 이해되어야 한다.
- [0035] 바람직하게, Z 는 0 이다.
- [0036] 바람직하게, X 는 N 이다. 대안의, 마찬가지로 바람직한 실시형태에서, X 는 CAr^3 이다.
- [0037] 바람직하게, Ar^1 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 융합된(fused-on) 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 융합된 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 상기 고리 시스템은 R^1 라디칼에 의해 치환된다. 또한 바람직하게, Ar^1 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 융합된 아릴 기, 및 5 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 융합된 헤테로아릴 기로부터 선택되고, 각각은 R^1 라디칼에 의해 치환된다. 더욱 바람직하게는, Ar^1 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하고, 벤젠, 바이페닐, 피리딘, 피리미딘, 피리다진, 나프탈렌, 퀴놀린, 퀴나졸린, 페난트렌, 안트라센, 플루오렌, 카르바졸, 푸란, 디벤조푸란, 티오펜 및 디벤조티오펜, 특히 바람직하게는 벤젠, 피리딘, 푸란 및 티오펜, 가장 바람직하게는 벤젠으로부터 선택된 융합된 기로부터 선택되고, 각각은 R^1 라디칼에 의해 치환된다.
- [0038] 바람직하게는 Ar^2 은 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 R^2 라디칼에 의해 치환되는 방향족 고리 시스템이다. 더욱 바람직하게는, Ar^2 는 벤젠, 피리딘, 피리미딘, 피리다진, 나프탈렌, 퀴놀린, 퀴나졸린, 페난트렌, 안트라센, 플루오렌, 카르바졸, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 바이페닐, 테르페닐, 쿼터페닐, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 디히드로페난트렌, 디히드로피렌, 테트라히드로피렌, 인데노플루오렌, 트루센, 이소트루센, 스피로트루센, 스피로이소트루센, 인데노카르바졸 (각각은 R^2 라디칼에 의해 치환됨) 으로부터, 또는 이들 기의 조합으로부터 선택되고; Ar^2 는 가장 바람직하게는 페닐, 피리딘, 나프탈렌, 트리페닐렌, 카르바졸, 피리미딘, 트리아진, 트리아지닐페닐렌 및 바이페닐 (각각은 R^2 라디칼에 의해 치환됨) 로부터 선택된다.
- [0039] 바람직하게는 Ar^3 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 6 내지 40개의 방향족 고리 원자를 갖고 R^3 라디칼로 치환된 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40개의 방향족 고리 원자를 갖고 R^3 라디칼로 치환된 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택된다.
- [0040] 바람직하게는, R^1 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 여기서 상기 알킬기, 상기 방향족 고리 시스템 및 상기 헤테로방향족 고리 시스템은 R^4 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-C\equiv C-$, $-R^4C=CR^4-$, $Si(R^4)_2$, $C=O$, $C=NR^4$, $-NR^4-$, $-O-$, $-S-$, $-C(=O)O-$ 또는 $-C(=O)NR^4-$ 로 대체될 수도 있다.
- [0041] 바람직하게는, R^2 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 여기서 상기 알킬기, 상기 방향족 고리 시스템 및 상기 헤테로방향족 고리 시스템은 R^4 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-C\equiv C-$, $-R^4C=CR^4-$, $Si(R^4)_2$, $C=O$, $C=NR^4$, $-NR^4-$, $-O-$, $-S-$, $-C(=O)O-$ 또는 $-C(=O)NR^4-$ 로 대체될 수도 있다.
- [0042] 바람직하게는, R^3 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, 1 내지 20 개의 탄소

원자를 갖는 직쇄 알킬기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 여기서 상기 알킬기, 상기 방향족 고리 시스템 및 상기 헤테로방향족 고리 시스템은 R⁴ 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬기에서 하나 이상의 CH₂ 기는 -C≡C-, -R⁴C=CR⁴-, Si(R⁴)₂, C=O, C=NR⁴, -NR⁴-, -O-, -S-, -C(=O)O- 또는 -C(=O)NR⁴- 로 대체될 수도 있다.

[0043] 바람직하게는 R⁴ 은 각각의 경우 동일하거나 상이하며, H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알킬기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐 기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 둘 이상의 R⁴ 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알케닐 및 알키닐 기, 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 F 또는 CN 으로 선택된 하나 이상의 라디칼에 의해 치환될 수도 있다.

[0044] 바람직하게, 식 (I) 의 화합물은 하기 식 (IV) 내지 (VII) 중 하나에 따르면:



[0045]

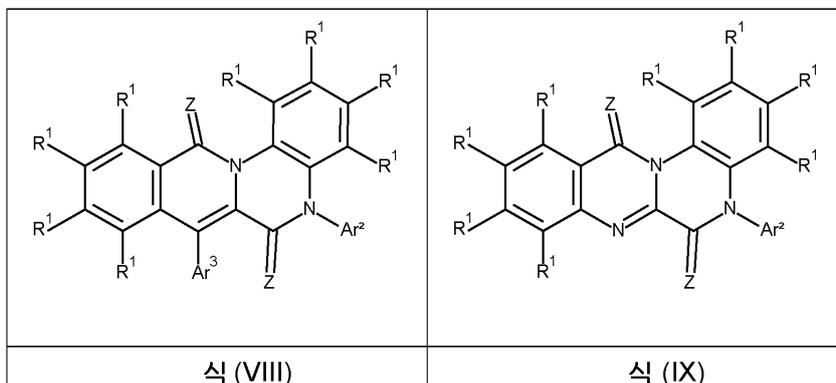
[0046] 식 중 변수는 식 (I) 의 화합물에 대해 정의된 바와 같다.

[0047]

위에 언급한 식 중에서, 식 (IV), (V) 및 (VI) 이 특히 바람직하다.

[0048]

보다 바람직하게, 식 (IV) 의 화합물은 하기 식 (VIII) 및 (IX) 중 하나에 따르면:



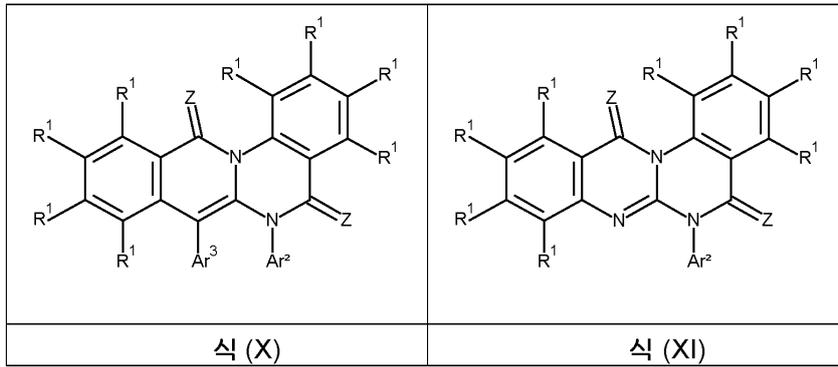
[0049]

[0050] 식 중 변수는 식 (I) 의 화합물에 대해 정의된 바와 같다. 바람직하게, 식 (VIII) 및 (IX) 중 변수는 그들

[0050]

의 위에 명시된 바람직한 실시형태에 대응한다.

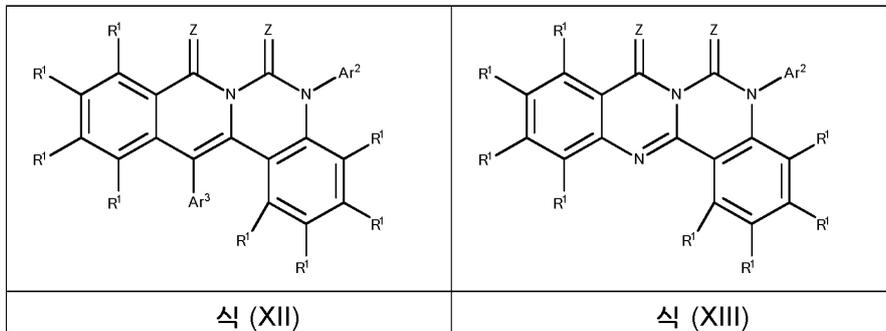
[0051] 보다 바람직하게, 식 (V) 의 화합물은 하기 식 (X) 및 (XI) 중 하나에 따르면:



[0052]

[0053] 식 중 변수는 식 (I) 의 화합물에 대해 정의된 바와 같다. 바람직하게, 식 (X) 및 (XI) 중 변수는 그들의 위에 명시된 바람직한 실시형태에 대응한다.

[0054] 보다 바람직하게, 식 (VI) 의 화합물은 하기 식 (XII) 및 (XIII) 중 하나에 따르면:

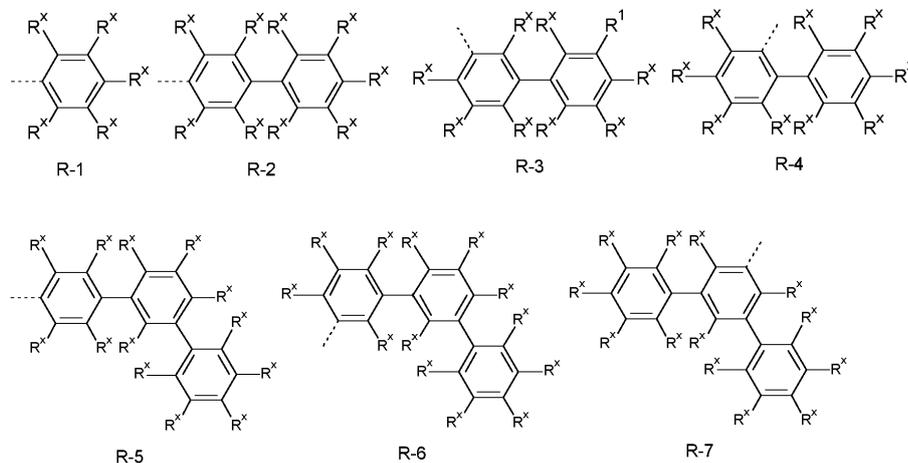


[0055]

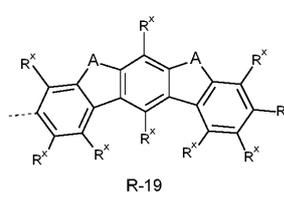
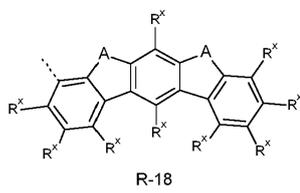
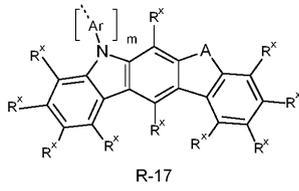
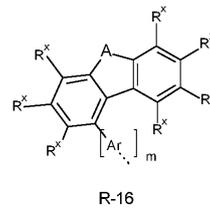
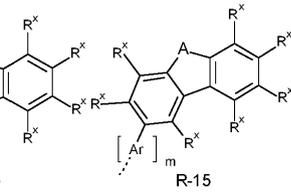
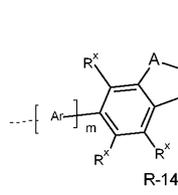
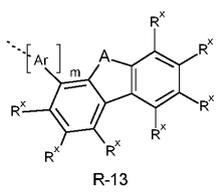
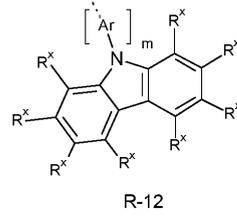
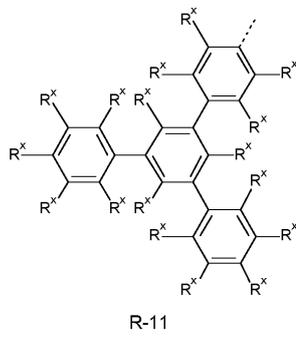
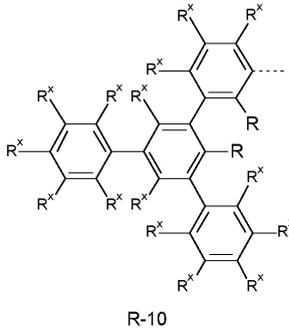
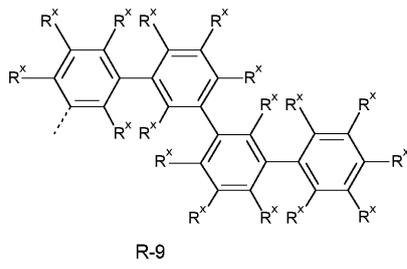
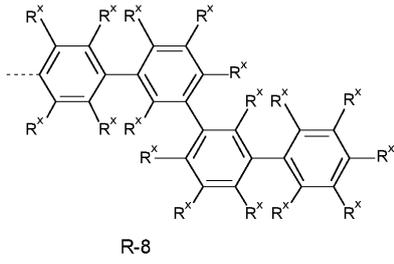
[0056] 식 중 변수는 식 (I) 의 화합물에 대해 정의된 바와 같다. 바람직하게, 식 (XII) 및 (XIII) 중 변수는 그들의 위에 명시된 바람직한 실시형태에 대응한다.

[0057] 또한, R¹, Ar² 및 Ar³ 로부터 선택되는 적어도 하나의 기, 바람직하게는 2개의 기, 그리고 보다 바람직하게는 R¹ 및 Ar² 로부터 선택되는 적어도 하나의 기, 바람직하게는 2개의 기는 6 내지 40개의 방향족 고리 원자를 갖고 R⁴ 또는 R² 또는 R³ 라디칼로 치환된 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40개의 방향족 고리 원자를 갖고 R⁴ 또는 R² 또는 R³ 라디칼로 치환된 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되는 식 (I) 의 화합물이 특히 바람직하다.

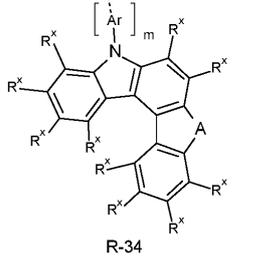
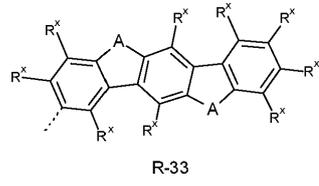
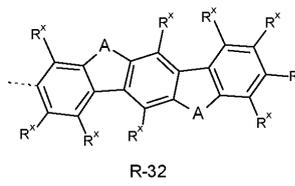
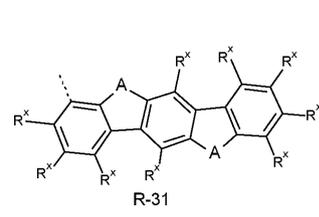
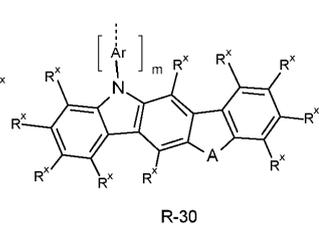
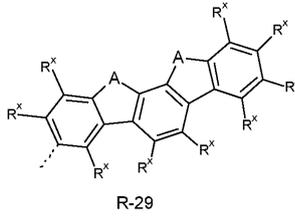
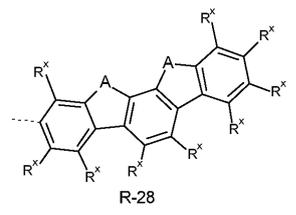
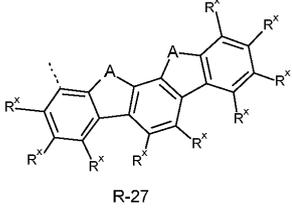
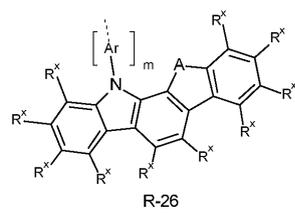
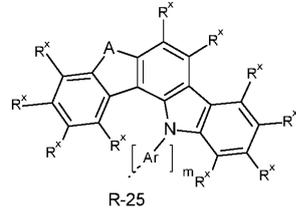
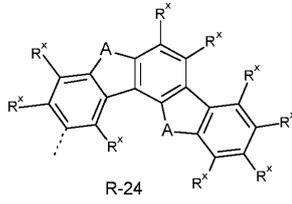
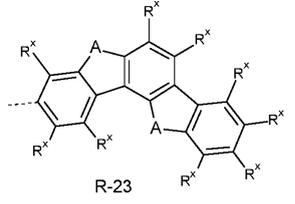
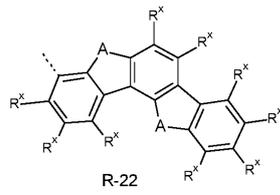
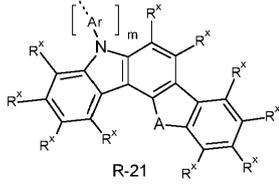
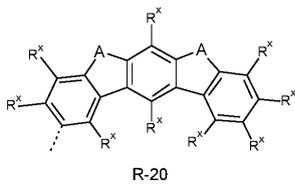
[0058] 이들 경우에, 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템은 바람직하게는 R-1 내지 R-84 기로부터 선택된다:



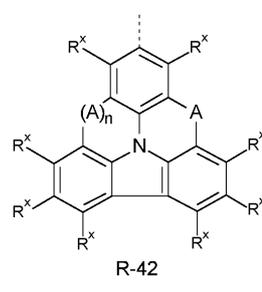
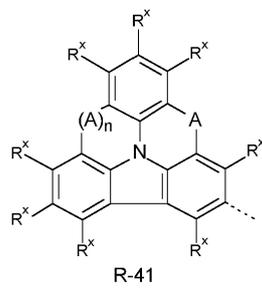
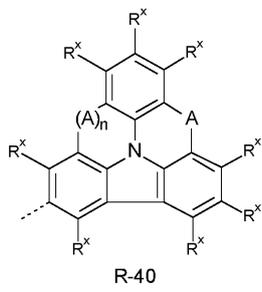
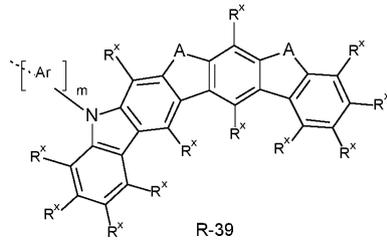
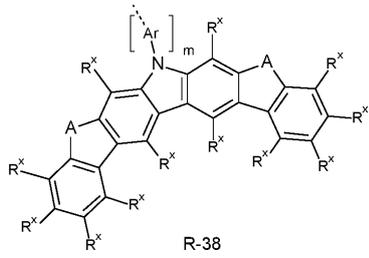
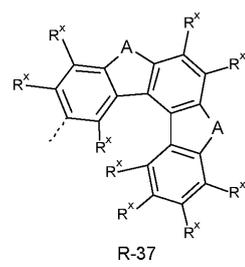
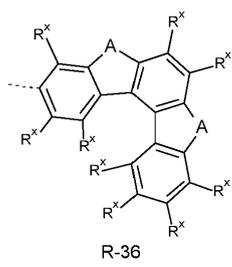
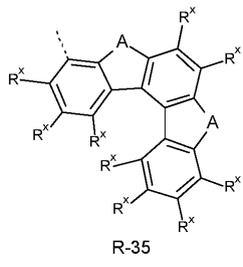
[0059]



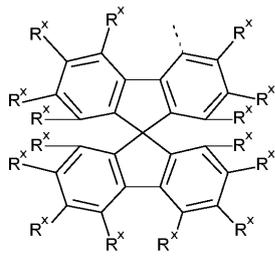
[0060]



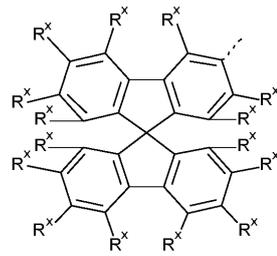
[0061]



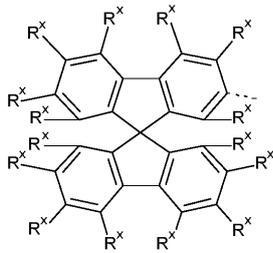
[0062]



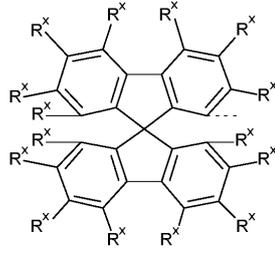
R-43



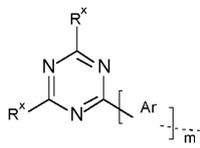
R-44



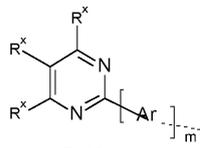
R-45



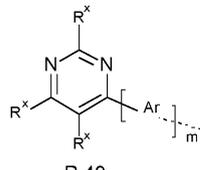
R-46



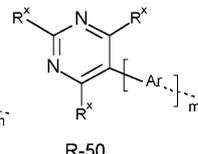
R-47



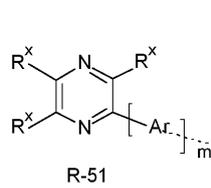
R-48



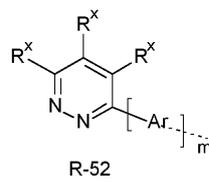
R-49



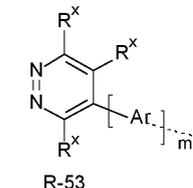
R-50



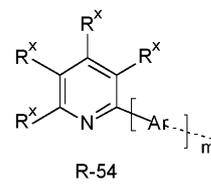
R-51



R-52

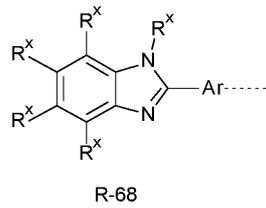
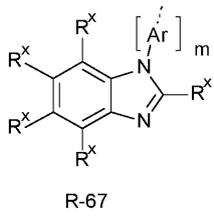
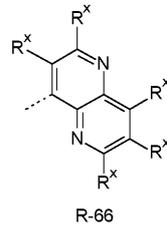
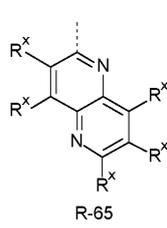
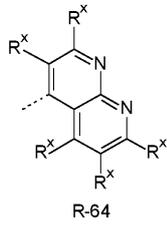
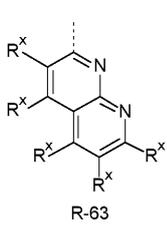
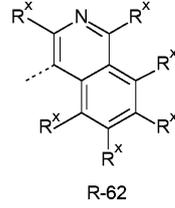
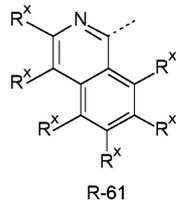
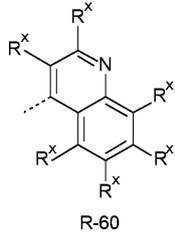
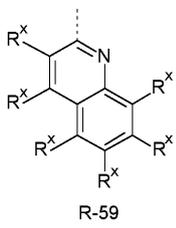
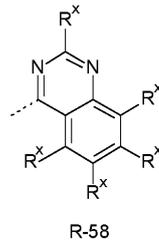
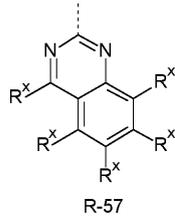
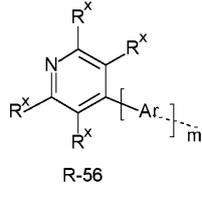
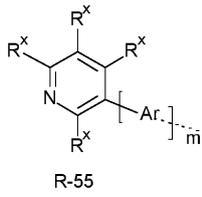


R-53

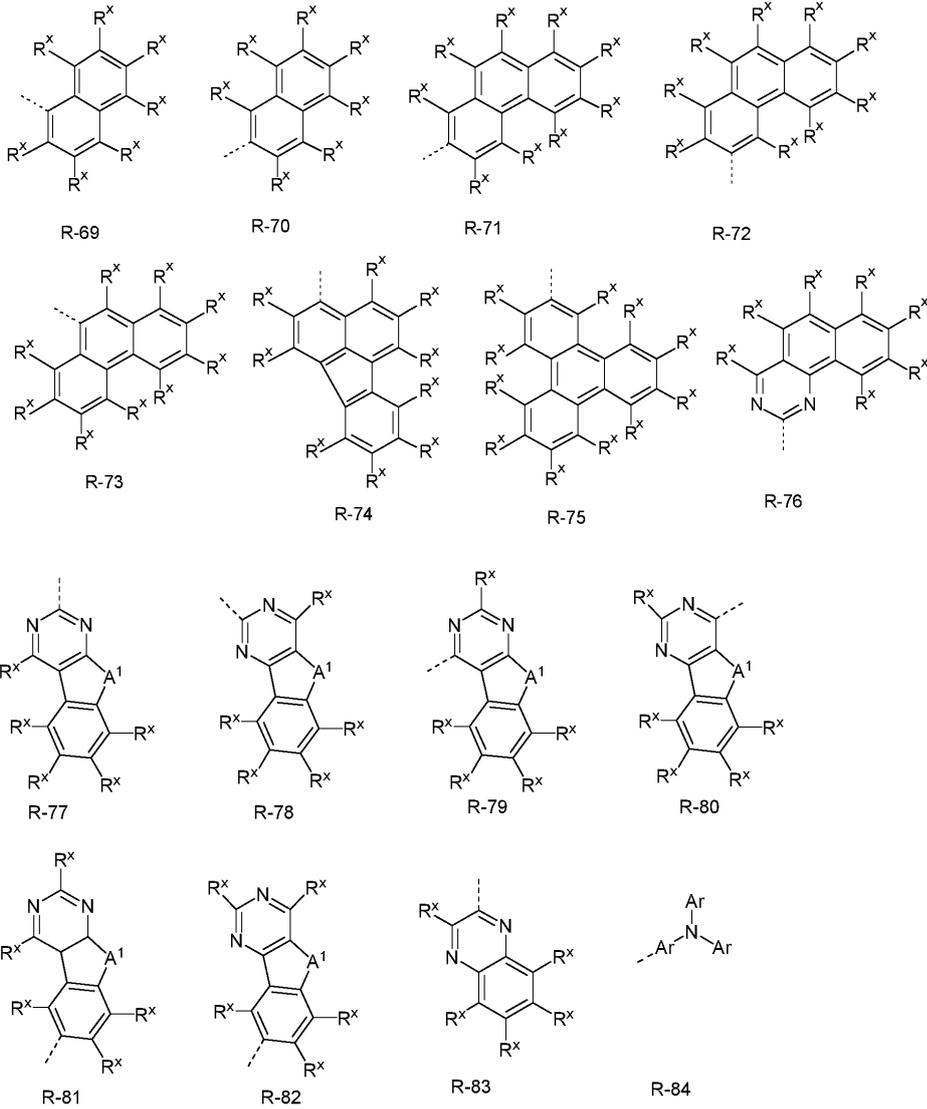


R-54

[0063]



[0064]



[0065]

[0066] 여기서 점선 결합은 식 (I) 에서의 베이스 골격에서 탄소 원자에 대한 결합을 나타내고, 여기서 또한:

[0067] - R-1 내지 R-84 기에서 Ar 은 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R^x 라디칼로 치환되는 방향족 고리 시스템, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R^x 라디칼로 치환되는 헤테로방향족 고리 시스템이다;

[0068] - A 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, C(R^x)₂, NR^x, S 및 O 로부터 선택된다;

[0069] - A¹ 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, C(R^x)₂, NR^x, S 및 O 로부터 선택된다;

[0070] - m은 0 또는 1이다; 여기서 m = 0은 당해 기가 부재하고 당해 기에 결합하는 기가 서로 직접 결합됨을 의미한다;

[0071] - n 은 0 또는 1 이고, 여기서 n = 0 는, A 기가 이 위치에서 결합되지 않고, 그 대신 R^x 라디칼이 대응하는 탄소 원자에 결합됨을 의미한다;

[0072] 여기서 R^x 는 다음과 같다:

[0073] - R¹ 가 R-1 내지 R-84로부터 선택되는 기인 경우, R^x 는 R¹ 이다;

[0074] - Ar² 가 R-1 내지 R-84 로부터 선택되는 기인 경우, R^x 는 R² 이다;

[0075] - Ar³ 가 R-1 내지 R-84 로부터 선택되는 기인 경우, R^x 는 R³ 이다;

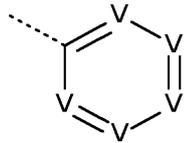
[0076] 그리고 변수 R², R³ 및 R⁴ 는 식 (I)의 화합물에 대해 정의된 바와 같다.

[0077] 바람직하게, 화합물은 하기 식 (IV) 내지 (VII) 중 하나에 따르며, 보다 바람직하게는 식 (IV) 내지 (VI) 중 하나에 따르고, 여기서:

[0078] - Z 는 동일하거나 상이하고 O 및 S 로부터 선택된다;

[0079] - X 는 N 또는 CAr³ 이다;

[0080] - Ar¹ 은 하나 이상의 R¹ 라디칼에 의해 치환되는 페닐이다;



[0081] - 그리고 Ar² 는 이다;

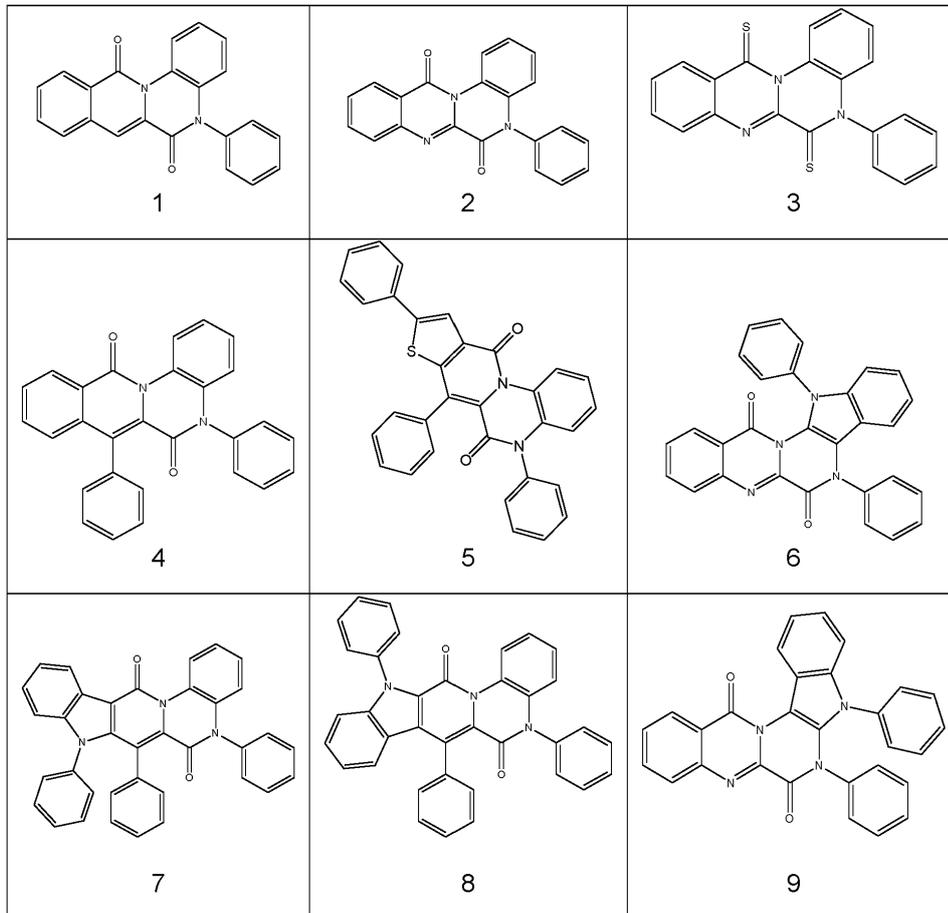
[0082] o 여기서 V는 동일하거나 상이하고 N 또는 CR² 이고, 여기서:

[0083] o 바람직하게는 3 개 이하의 V 는 N 이다;

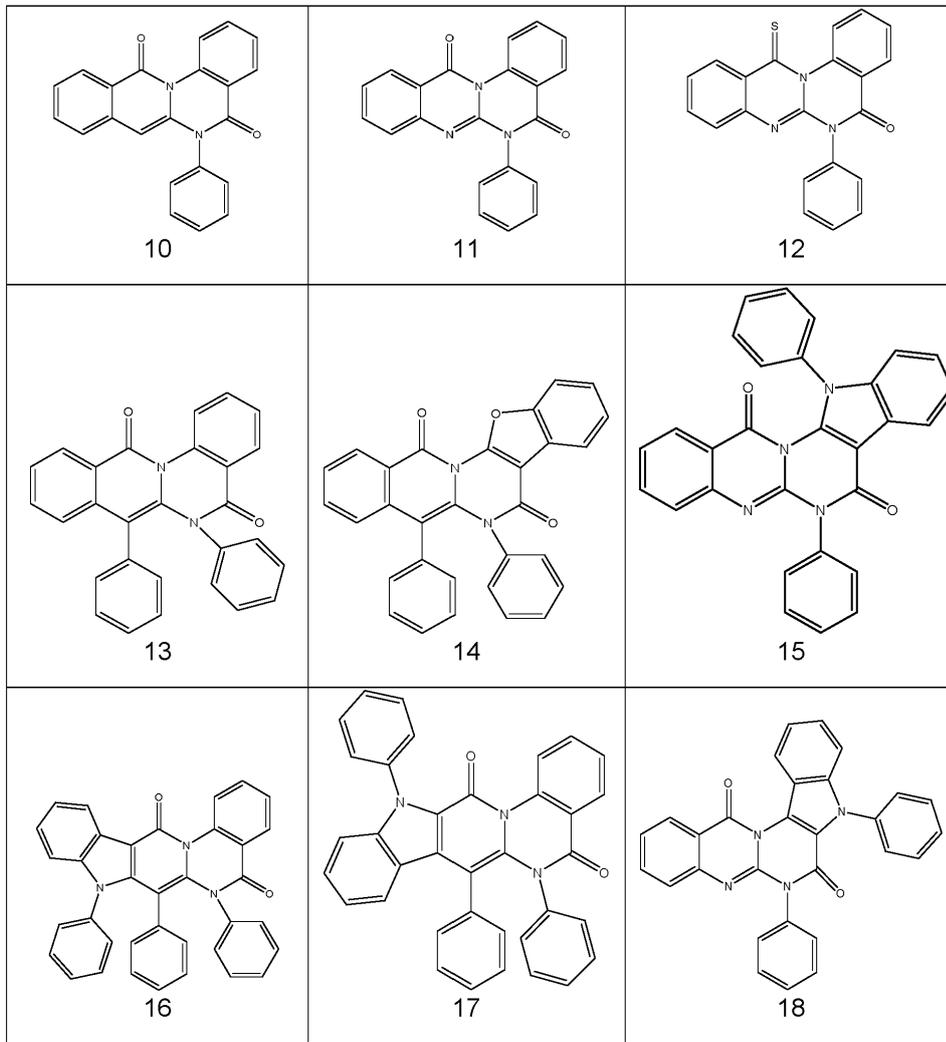
[0084] o 바람직하게는 2개 이상의 인접한 V 는 N이 아니다; 그리고

[0085] - 보다 바람직하게는, Ar² 는 페닐 기 또는 트리아진 기이며, 각각은 하나 이상의 R² 라디칼로 치환된다.

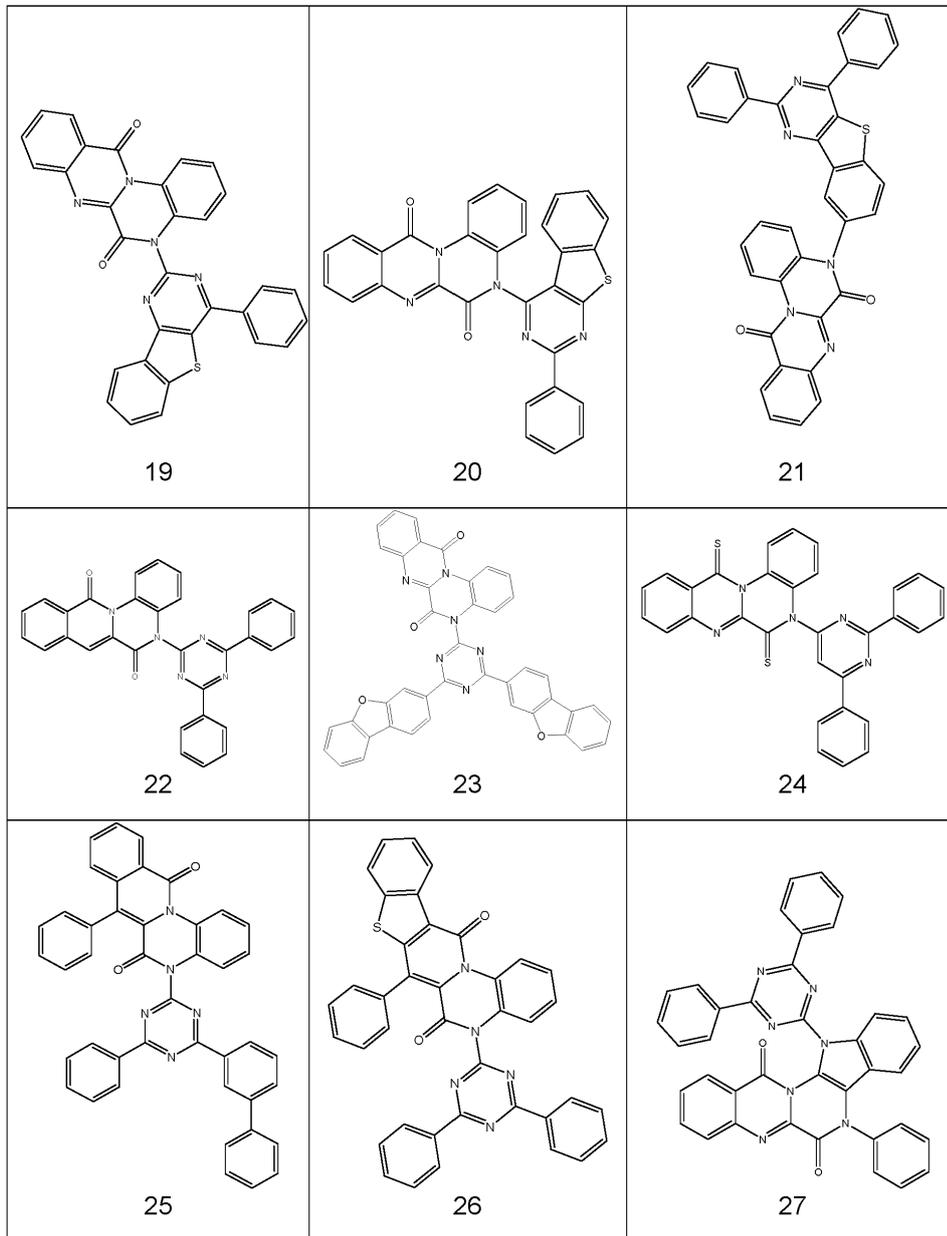
[0086] 식 (I) 의 바람직한 화합물은 하기 표에 나타낸다:



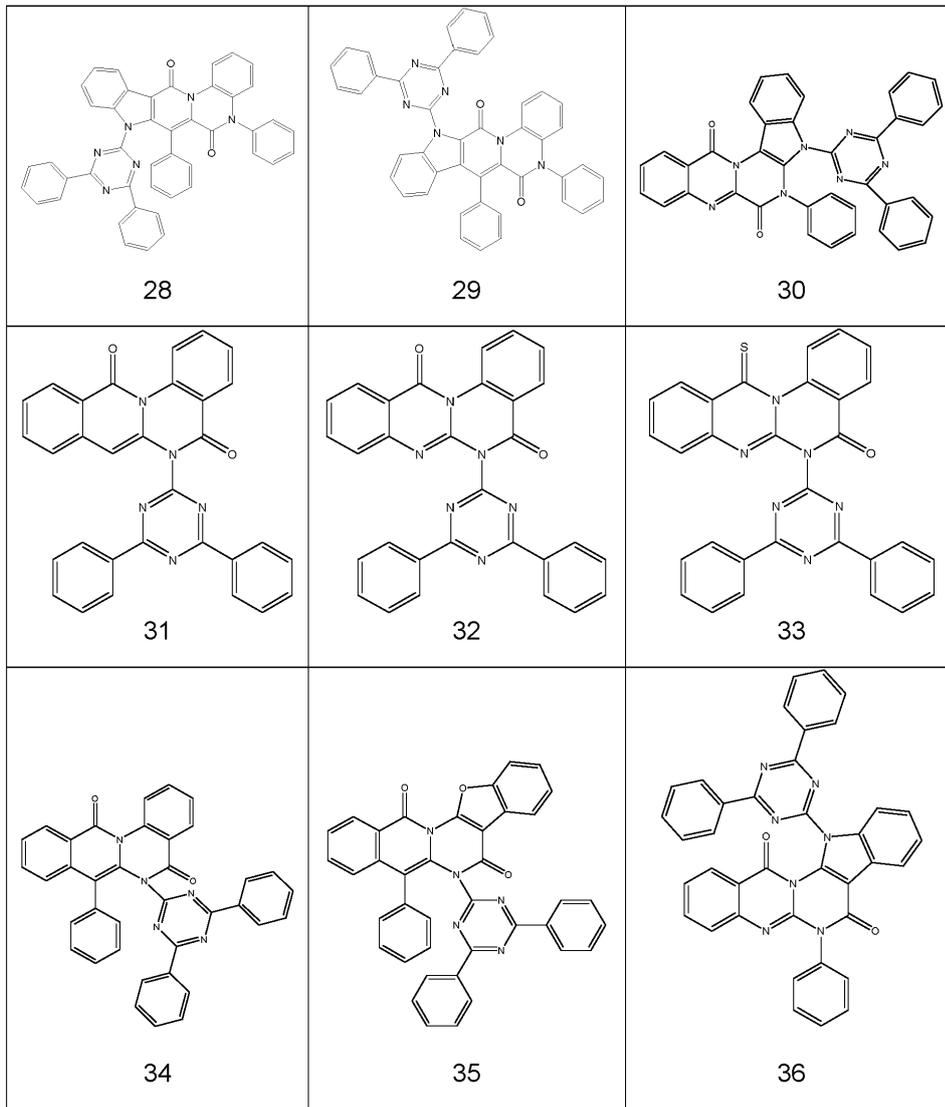
[0087]



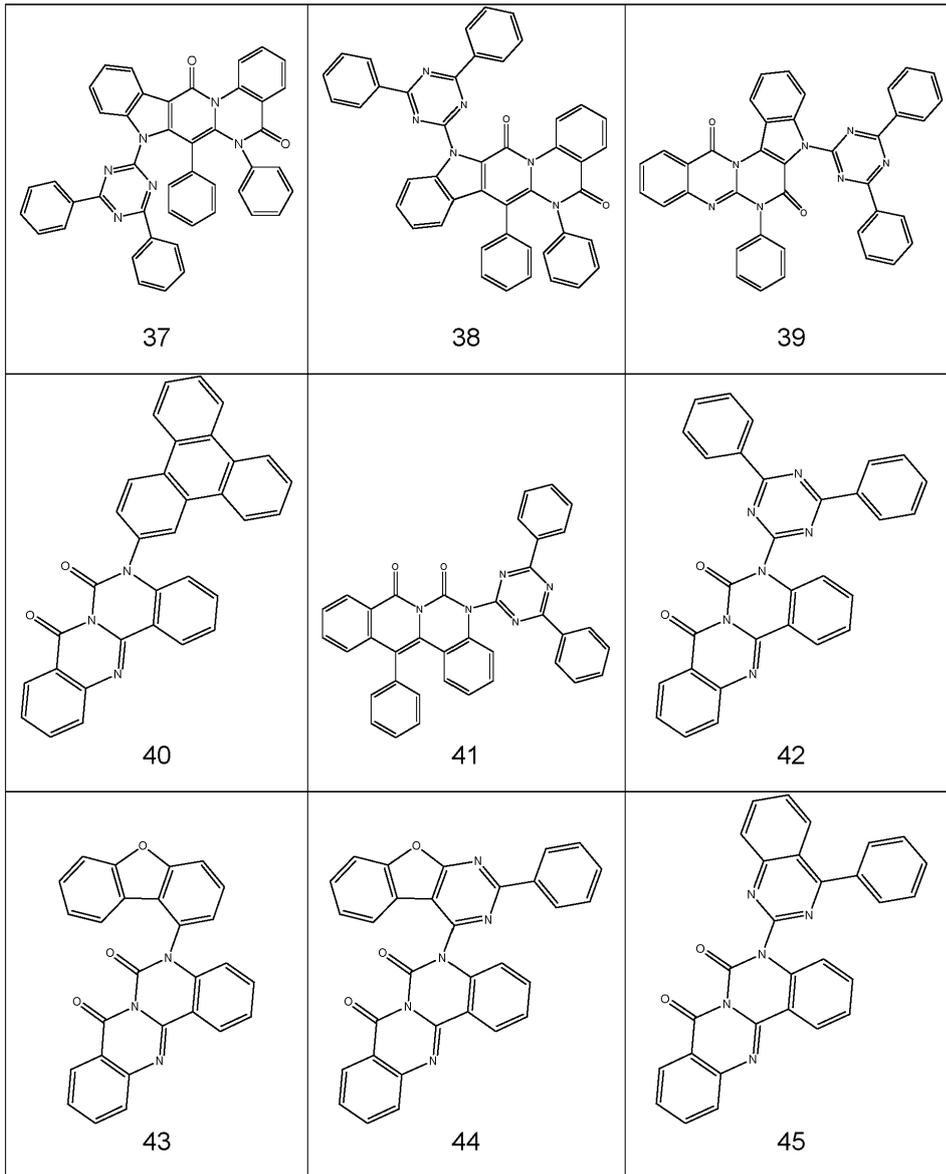
[0088]



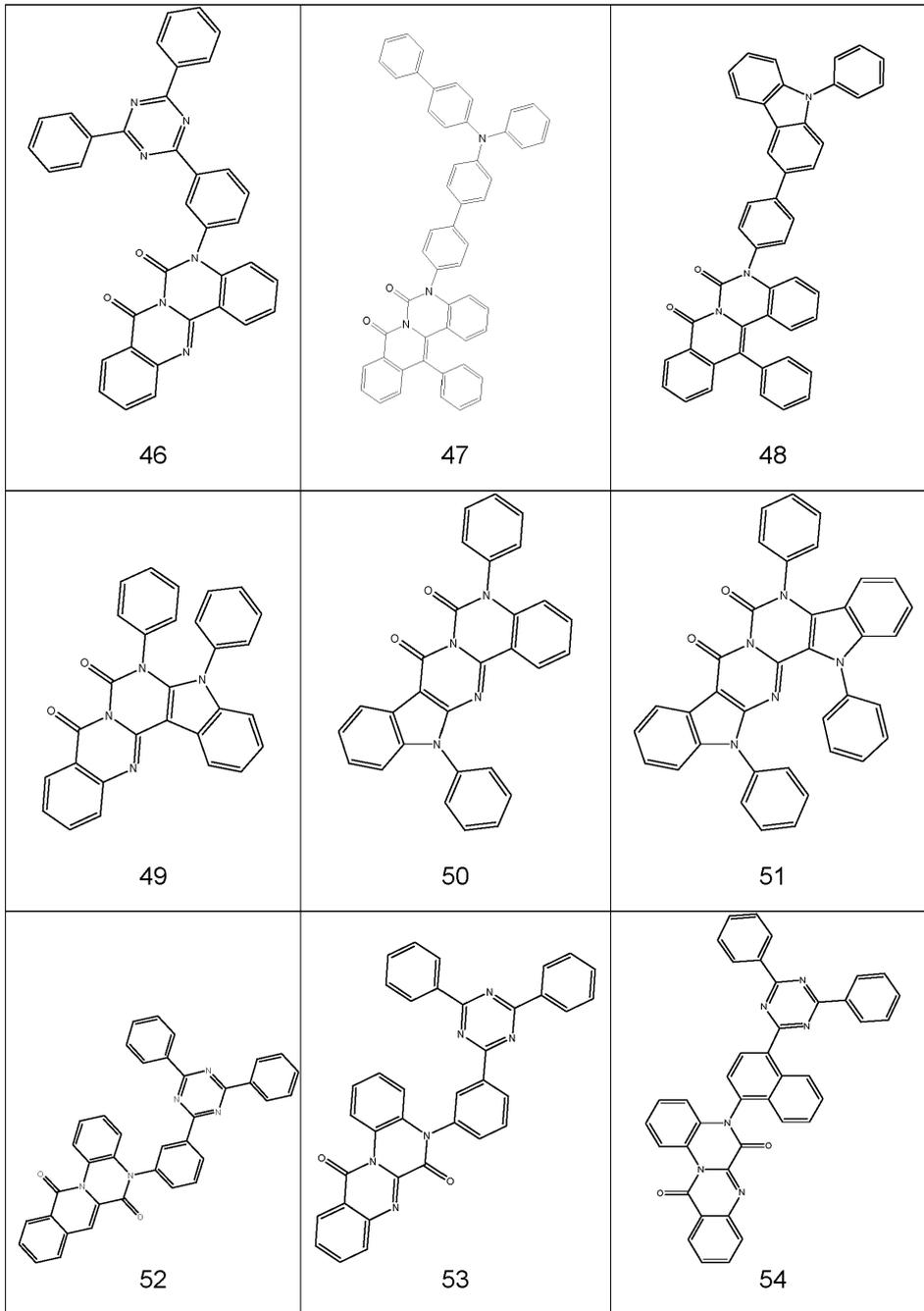
[0089]



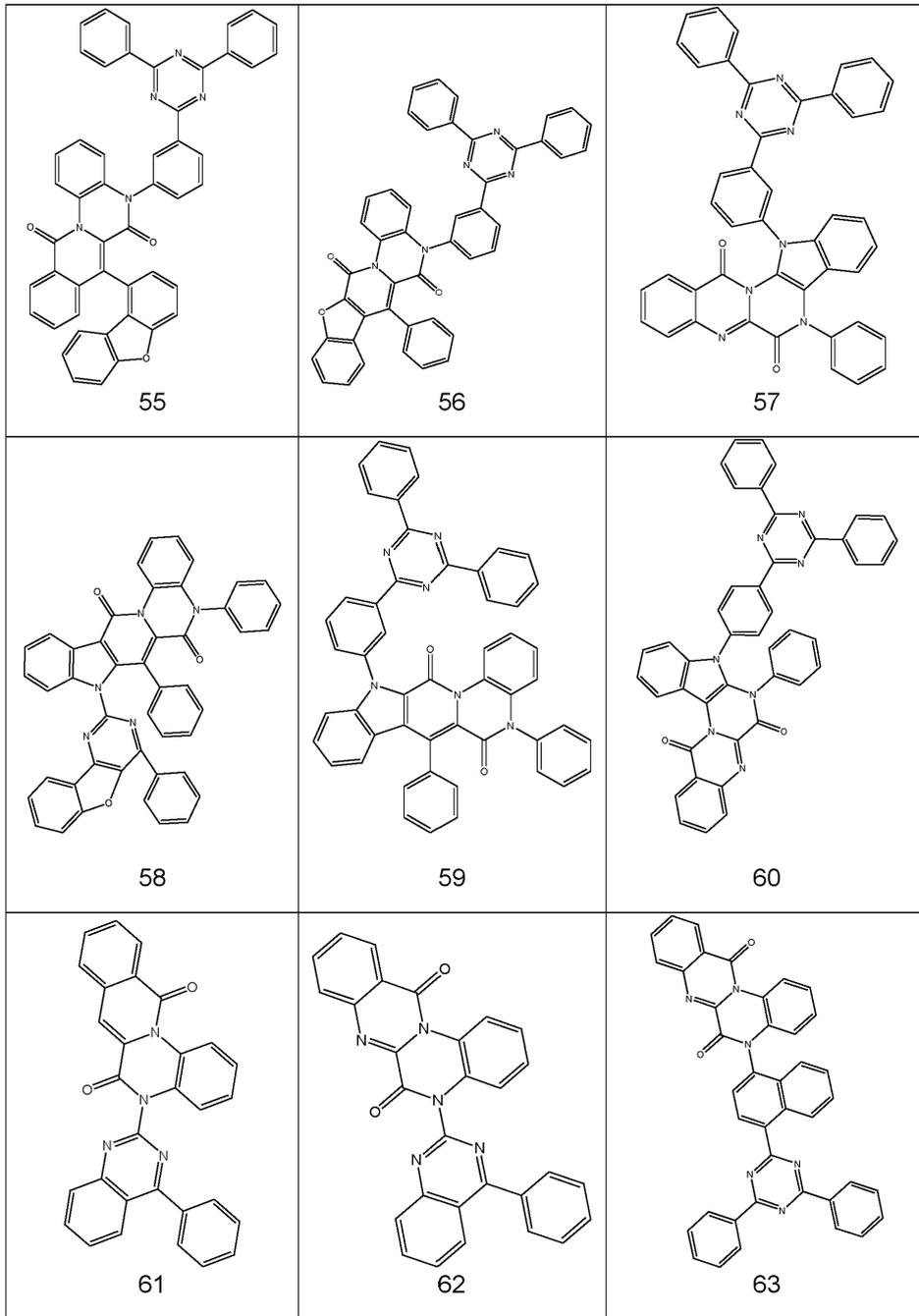
[0090]



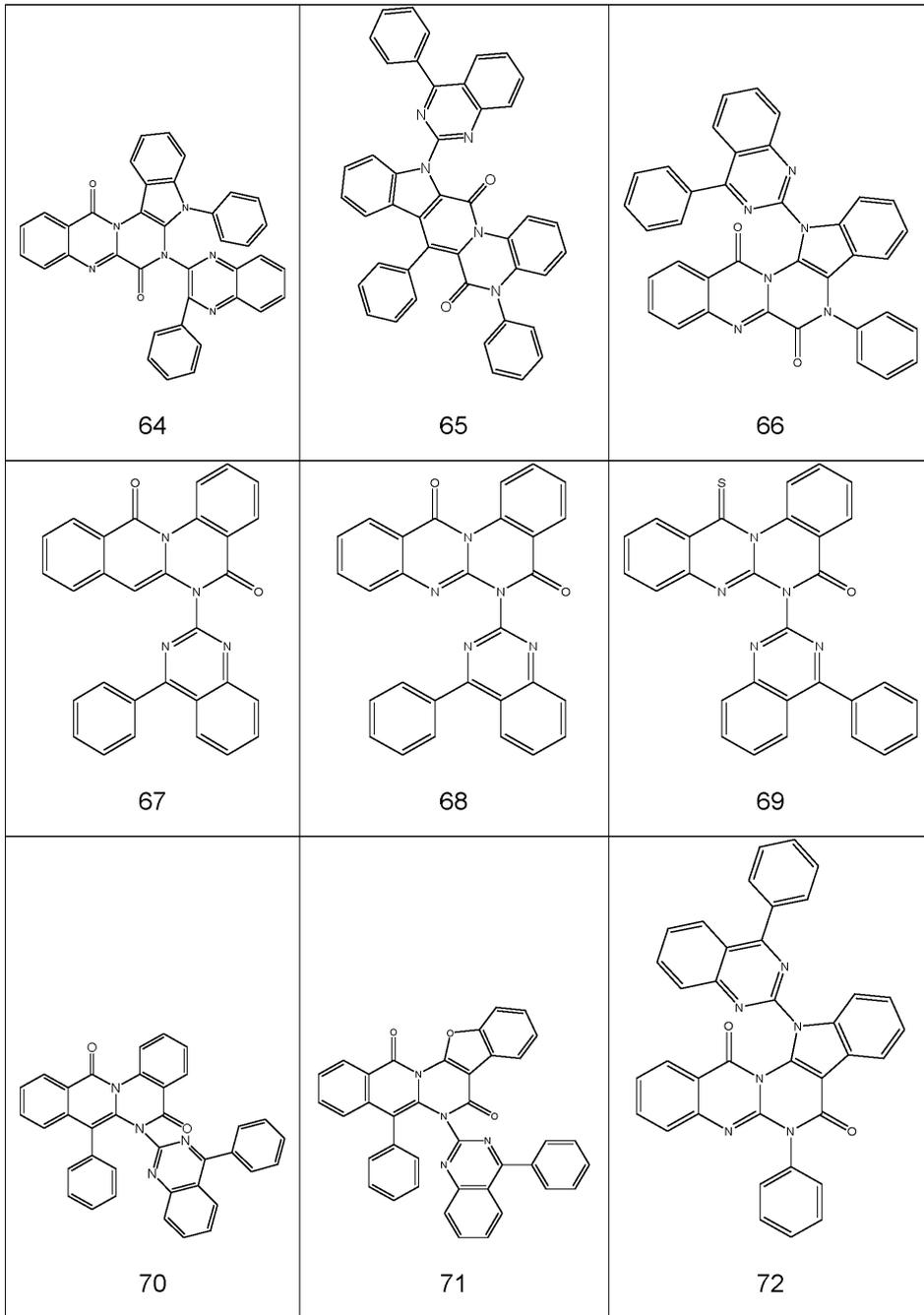
[0091]



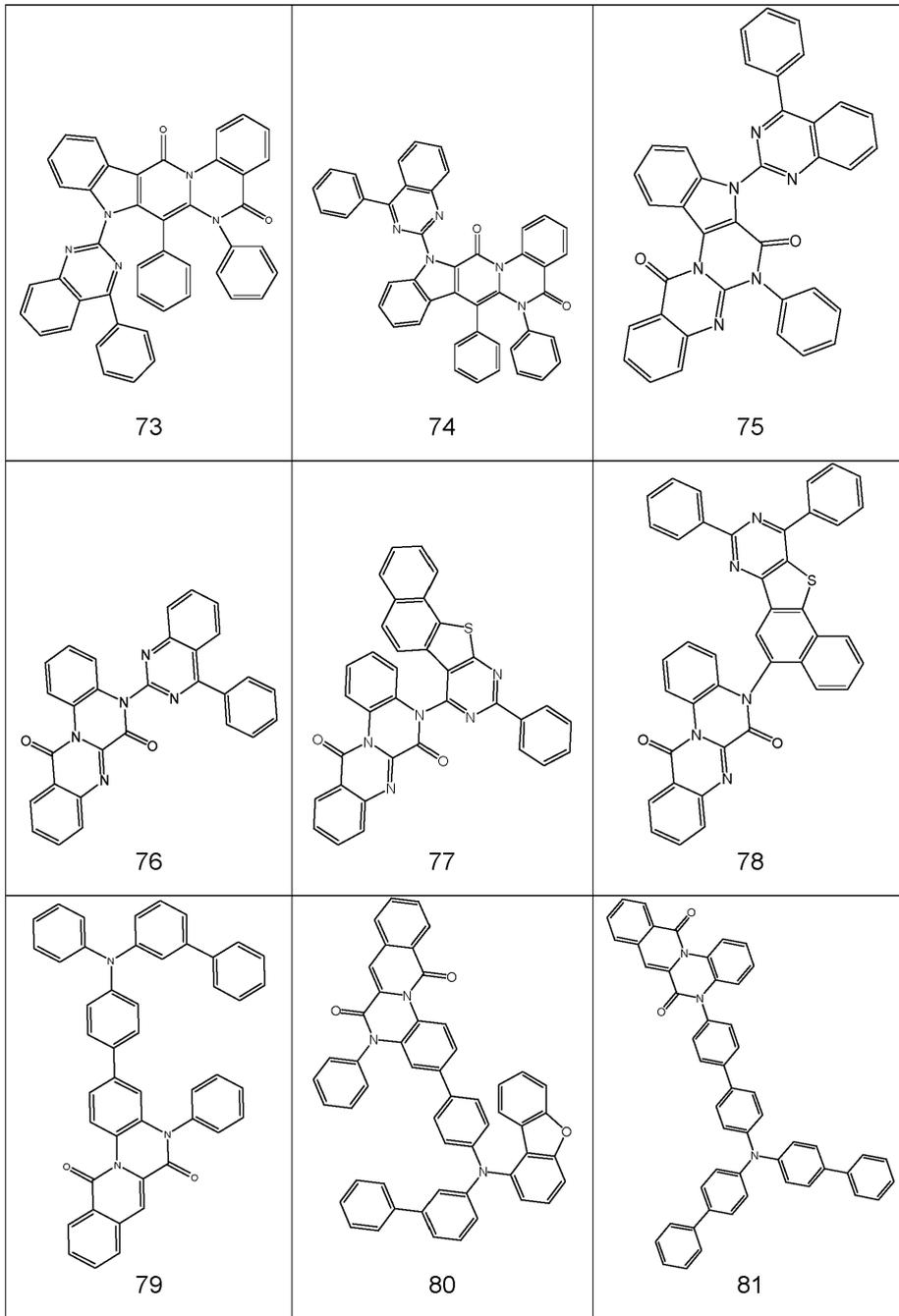
[0092]



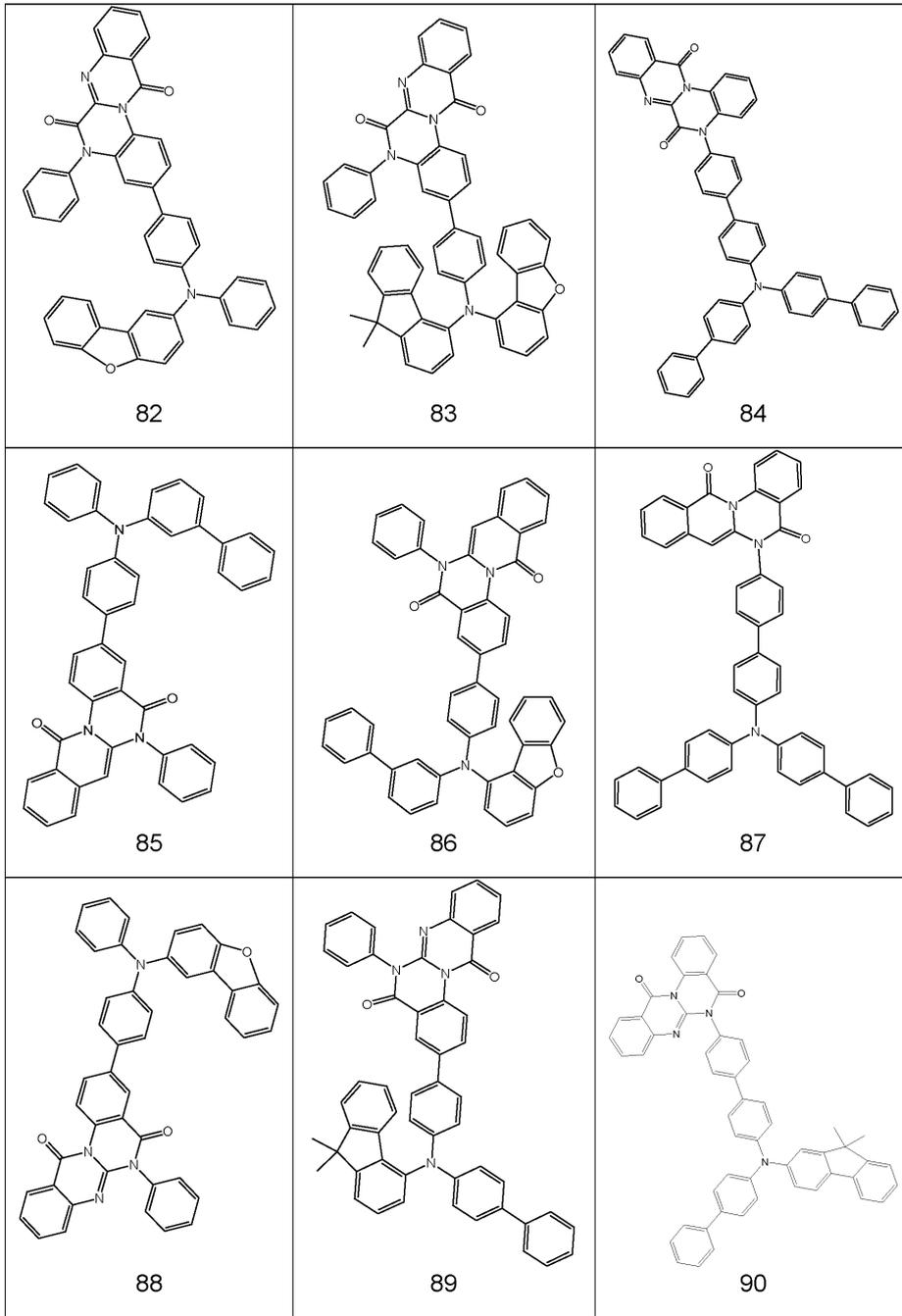
[0093]



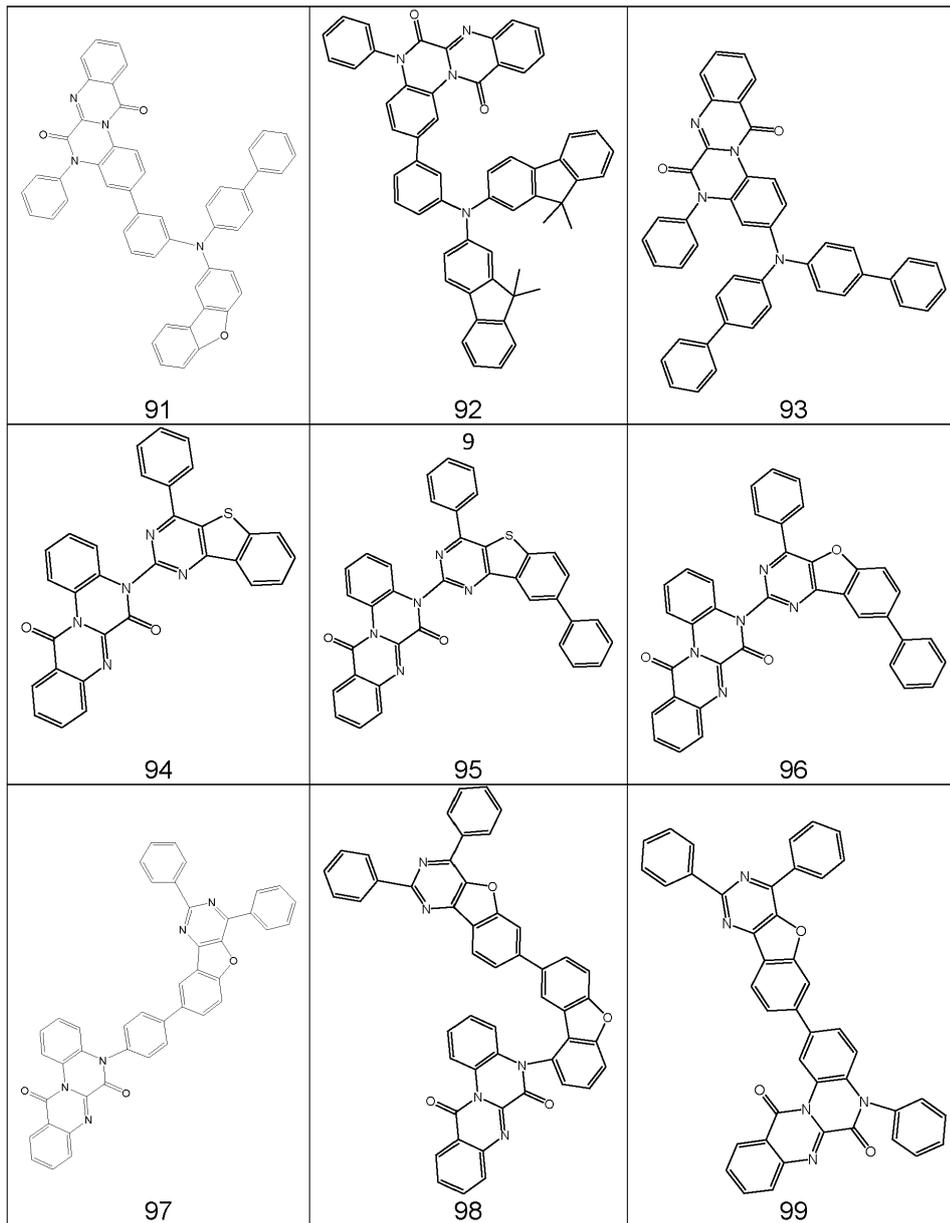
[0094]



[0095]



[0096]



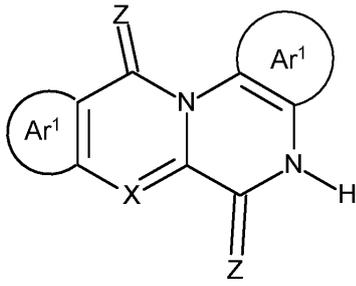
[0097]

[0098]

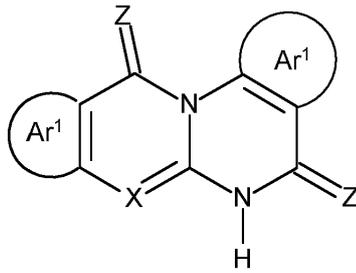
식 (I) 의 화합물은 유기 화학에서 알려진 합성 단계, 예를 들어 브롬화, Suzuki 커플링 및 Hartwig-Buchwald 커플링에 의해 제조될 수 있다. 일부 바람직한 합성 방법이 예로서 아래에 보여져 있다. 이들은 당업자에 의해 그들의 일반 지식의 범위 내에서 수정될 수 있고 제한적인 방식으로 해석되어서는 안된다.

[0099]

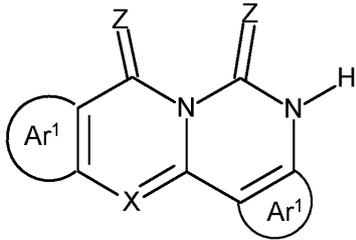
식 (I) 의 화합물을 제조하기 위한 바람직한 방법에서, 제 1 단계에서, 하기 식 (IV-Int) 내지 (VII-Int) 중 하나에 따르는 베이스 골격이 제조된다:



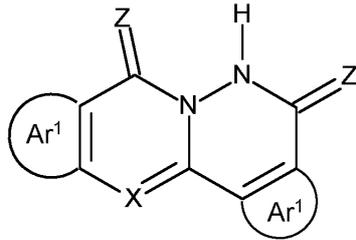
식 (IV-Int)



식 (V-Int)



식 (VI-Int)



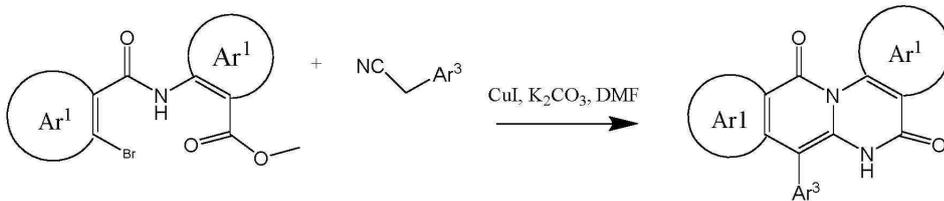
식 (VII-Int)

[0100]

[0101] 식 (IV-Int) 내지 (VII-Int) 의 베이스 골격의 예시적인 합성은 아래 나타나 있다.

[0102] 도식 1은 식 (V-Int)의 베이스 골격의 합성을 보여준다.

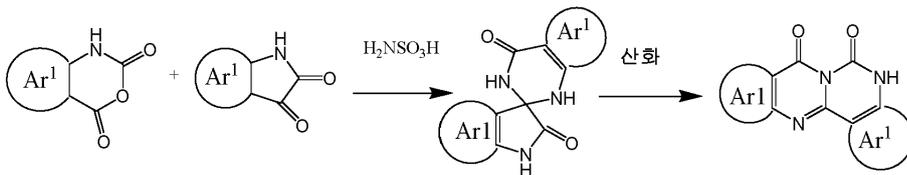
[0103] 도식 1



[0104]

[0105] 도식 2는 식 (VI-Int)의 베이스 골격의 합성을 보여준다.

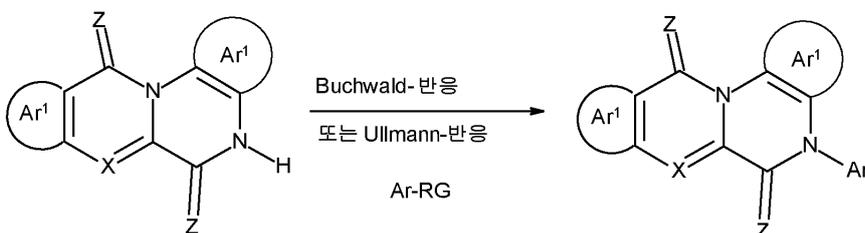
[0106] 도식 2



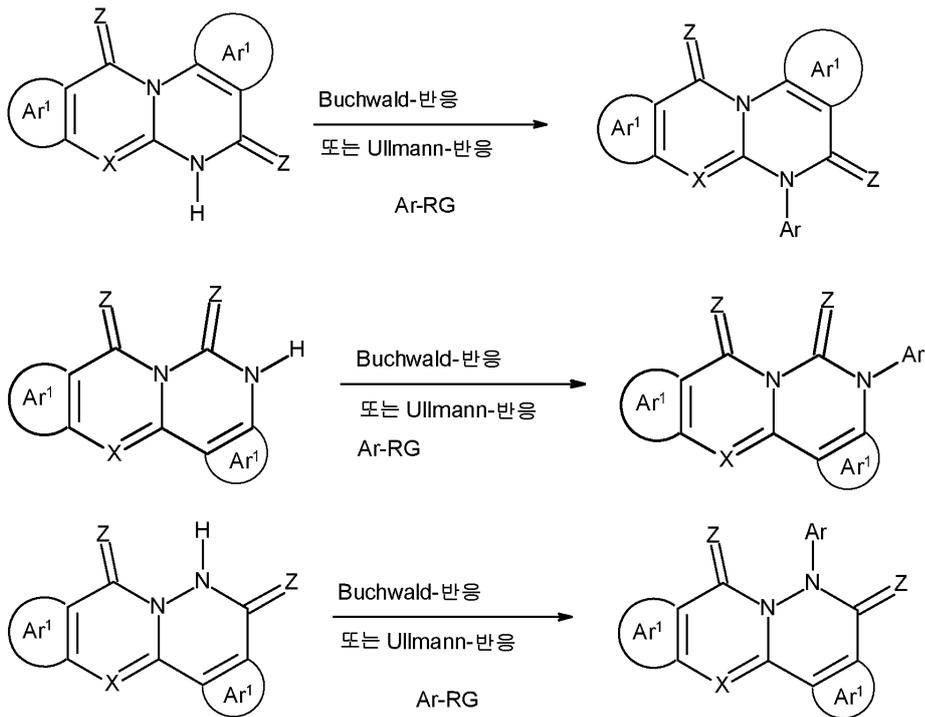
[0107]

[0108] 식 (IV-Int) 내지 (VII-Int) 중 하나의 주요 구조의 합성 후, 방향족 시스템은, 유기금속 커플링 반응, 바람직 하계는 Ullmann 반응 또는 Buchwald 반응에서, 식 (IV-Int) 내지 (VII-Int) 의 중간체의 자유 질소 원자에 결 합된다.

[0109] 도식 3



[0110]



[0111]

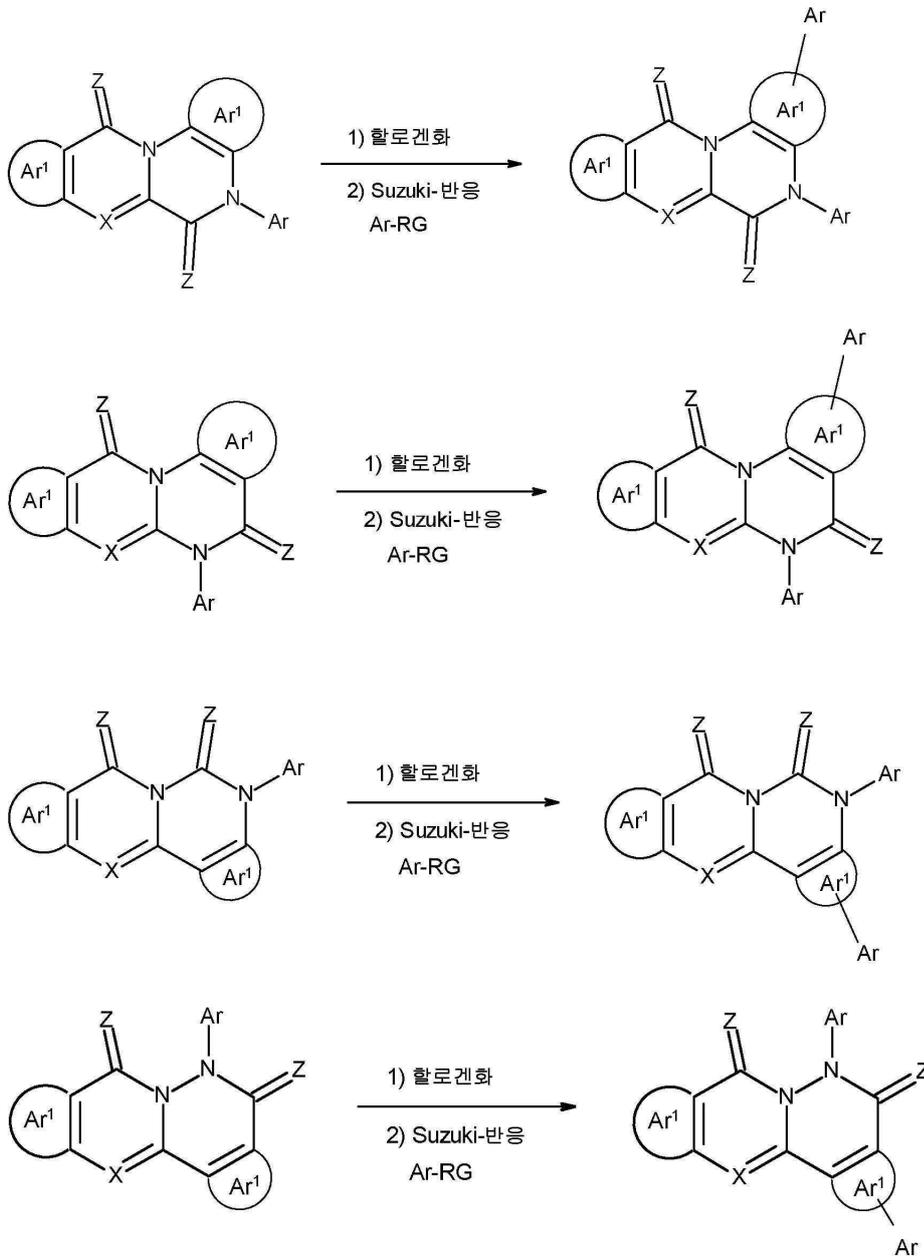
[0112]

위에 언급된 도식에서 Ar은 선택적으로 치환된 방향족 또는 헤테로방향족 시스템이다. RG는 반응성 기, 바람직하게는 할로젠이다.

[0113]

추가 선택적 단계(도식 4)에서, 위에 언급된 도식에서 획득된 식 (I)의 화합물은 고리 중 하나 상에서 할로젠화되고 이어서 Suzuki 반응에서 이 위치에서 방향족 또는 헤테로방향족 시스템에 결합될 수도 있다:

[0114] 도식 4



[0115]

[0116] 위에 언급된 도식에서 Ar은 선택적으로 치환된 방향족 또는 헤테로방향족 시스템이다. RG는 반응성 기, 바람직하게는 할로젠이다.

[0117]

따라서, 본 출원은, 식 (IV-Int) 내지 (VII-Int) 중 하나의 중간체가 먼저, 바람직하게는 폐환 반응에 의해 제조되고, Ullmann 반응 또는 Buchwald 반응에서, 방향족 또는 헤테로방향족 시스템이 다음으로 식 (I)의 Ar² 기의 위치에 도입되는 것을 특징으로 하는 식 (I)의 화합물의 제조 방법을 제공한다. 바람직한 실시형태에서, 할로겐화 반응, 바람직하게는 브롬화 반응이 이어서 Ar¹ 고리 중 하나 상에서 수행되며, 이는 할로젠 치환기, 특히 브롬 치환기를 Ar¹ 고리 중 하나에 도입하고, 다음으로 Suzuki 반응이 수행되며, 여기서 방향족 시스템이 할로젠 치환기, 특히 브롬 치환기의 위치에 도입된다.

[0118]

아래 도식 5는, 마지막으로, 식 (I)의 화합물을 하나의 단계로 합성하는 방법을 보여준다:

갖는 알케닐 또는 알키닐 기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 여기서 언급된 기들은 각각 하나 이상의 R² 라디칼로 치환된다;

[0131] Ar³ 은, H, D, F, Cl, Br, I, C(=O)R³, CN, Si(R³)₃, N(R³)₂, P(=O)(R³)₂, OR³, S(=O)R³, S(=O)₂R³, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R³ 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH₂ 기는 -R³C=CR³-, -C≡C-, Si(R³)₂, C=O, C=NR³, -C(=O)O-, -C(=O)NR³-, NR³, P(=O)(R³), -O-, -S-, SO 또는 SO₂ 에 의해 대체될 수도 있다;

[0132] R¹ 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, C(=O)R⁴, CN, Si(R⁴)₃, N(R⁴)₂, P(=O)(R⁴)₂, OR⁴, S(=O)R⁴, S(=O)₂R⁴, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R¹ 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R⁴ 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH₂ 기는 -R⁴C=CR⁴-, -C≡C-, Si(R⁴)₂, C=O, C=NR⁴, -C(=O)O-, -C(=O)NR⁴-, NR⁴, P(=O)(R⁴), -O-, -S-, SO 또는 SO₂ 에 의해 대체될 수도 있다;

[0133] R² 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, C(=O)R⁴, CN, Si(R⁴)₃, N(R⁴)₂, P(=O)(R⁴)₂, OR⁴, S(=O)R⁴, S(=O)₂R⁴, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R² 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R⁴ 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH₂ 기는 -R⁴C=CR⁴-, -C≡C-, Si(R⁴)₂, C=O, C=NR⁴, -C(=O)O-, -C(=O)NR⁴-, NR⁴, P(=O)(R⁴), -O-, -S-, SO 또는 SO₂ 에 의해 대체될 수도 있다;

[0134] R³ 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, C(=O)R⁴, CN, Si(R⁴)₃, N(R⁴)₂, P(=O)(R⁴)₂, OR⁴, S(=O)R⁴, S(=O)₂R⁴, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R³ 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R⁴ 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH₂ 기는 -R⁴C=CR⁴-, -C≡C-, Si(R⁴)₂, C=O, C=NR⁴, -C(=O)O-, -C(=O)NR⁴-, NR⁴, P(=O)(R⁴), -O-, -S-, SO 또는 SO₂ 에 의해 대체될 수도

있다;

[0135] R^4 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^5$, CN, $Si(R^5)_3$, $N(R^5)_2$, $P(=O)(R^5)_2$, OR^5 , $S(=O)R^5$, $S(=O)_2R^5$, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R^4 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R^5 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^5C=CR^5-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^5)_2$, $C=O$, $C=NR^5$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^5-$, NR^5 , $P(=O)(R^5)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있다;

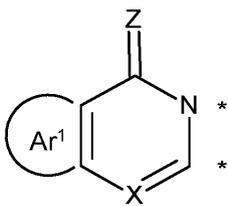
[0136] R^5 은 각각의 경우 동일하거나 상이하며, H, D, F, Cl, Br, I, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐 기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템로부터 선택되고; 2 개 이상의 R^5 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기, 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 F 및 CN 으로 선택된 하나 이상의 라디칼에 의해 치환될 수도 있다;; 및 적어도 하나의 추가 화합물

[0137] 을 포함하는 포물레이션을 제공한다.

[0138] 추가 화합물은 예를 들어, 용매, 특히 위에 언급된 용매 중 하나 또는 이들 용매의 혼합물일 수 있다. 추가 화합물은 대안적으로, 마찬가지로 전자 디바이스에서 사용되는 적어도 하나의 추가의 유기 또는 무기 화합물, 예를 들어 방출 화합물 및/또는 추가 매트릭스 재료일 수도 있다. 적합한 방출 화합물 및 추가 매트릭스 재료는 유기 전계 발광 디바이스와 관련하여 뒤에 열거된다. 이 추가 화합물은 또한 중합체성일 수도 있다.

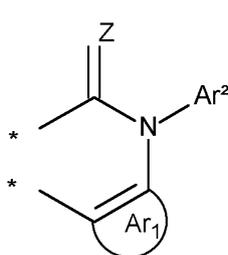
[0139] 본 발명의 화합물은 전자 디바이스, 특히 유기 전계발광 디바이스에서의 사용에 적합하다. 따라서 본 발명은 또한, 전자 디바이스, 특히 유기 전계 발광 디바이스에서의 본원에 따른 포물레이션과 관련하여 위에 정의된 식 (I) 의 본 발명 화합물의 용도를 제공한다.

[0140] 본 발명은 여전히 또한 식 (I) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 전자 디바이스를 제공하고

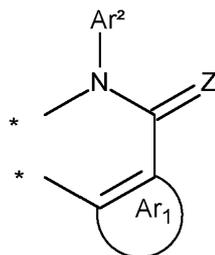


[0141]

[0142] 식 중 하기 식 (II) 또는 식 (III)의 단위가 고리에서 *로 표시된 결합 부위에서, 각 경우에 *로 표시된 결합을 통해, 결합되며,



식 (II)



식 (III),

[0143]

- [0144] 그리고 식 중, 나타내는 변수들은 다음과 같다:
- [0145] X 는 N 또는 CAr^3 이다;
- [0146] Z 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 O 및 S 으로부터 선택된다;
- [0147] Ar^1 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 융합된(fused-on) 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 융합된 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고, 상기 방향족 고리 시스템 및 상기 헤테로방향족 고리 시스템은 각각 R^1 라디칼로 치환된다;
- [0148] Ar^2 는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐 기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 여기서 언급된 기들은 각각 하나 이상의 R^2 라디칼로 치환된다;
- [0149] Ar^3 은, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^3$, CN, $Si(R^3)_3$, $N(R^3)_2$, $P(=O)(R^3)_2$, OR^3 , $S(=O)R^3$, $S(=O)_2R^3$, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R^3 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^3C=CR^3-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^3)_2$, C=O, $C=NR^3$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^3-$, NR^3 , $P(=O)(R^3)$, -O-, -S-, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있다;
- [0150] R^1 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, $P(=O)(R^4)_2$, OR^4 , $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R^1 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R^4 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, C=O, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, NR^4 , $P(=O)(R^4)$, -O-, -S-, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있고;
- [0151] R^2 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, $P(=O)(R^4)_2$, OR^4 , $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R^2 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R^4 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, C=O, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, NR^4 , $P(=O)(R^4)$, -O-, -S-, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있고;

[0152] R^3 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^4$, CN, $Si(R^4)_3$, $N(R^4)_2$, $P(=O)(R^4)_2$, OR^4 , $S(=O)R^4$, $S(=O)_2R^4$, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R^3 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R^4 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^4C=CR^4-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^4)_2$, $C=O$, $C=NR^4$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^4-$, NR^4 , $P(=O)(R^4)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있다;

[0153] R^4 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, $C(=O)R^5$, CN, $Si(R^5)_3$, $N(R^5)_2$, $P(=O)(R^5)_2$, OR^5 , $S(=O)R^5$, $S(=O)_2R^5$, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R^4 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기 및 상기 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 R^5 라디칼에 의해 각각 치환되고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^5C=CR^5-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^5)_2$, $C=O$, $C=NR^5$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^5-$, NR^5 , $P(=O)(R^5)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수도 있다;

[0154] R^5 은 각각의 경우 동일하거나 상이하며, H, D, F, Cl, Br, I, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알킬 또는 알콕시 기, 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐 기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 2개 이상의 R^5 라디칼은 서로 연결될 수도 있고 고리를 형성할 수도 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기, 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 F 및 CN 으로 선택된 하나 이상의 라디칼에 의해 치환될 수도 있다.

[0155] 본 발명의 맥락에서 전자 디바이스는 적어도 하나의 유기 화합물을 포함하는 적어도 하나의 층을 포함하는 디바이스이다. 이 컴포넌트는 또한 무기 재료 또는 그렇지 않으면 무기 재료로부터 전체적으로 형성된 층을 포함할 수도 있다.

[0156] 전자 디바이스는 바람직하게는 유기 전계발광 디바이스 (OLED), 유기 집적회로 (O-IC), 유기 전계효과 트랜지스터 (O-FET), 유기 박막 트랜지스터 (O-TFT), 유기 발광 트랜지스터 (O-LET), 유기 태양전지 (O-SC), 염료-감응형 유기 태양전지 (DSSC), 유기 광검출기, 유기 광수용체, 유기 전계-퀵치 디바이스 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 유기 플라즈몬 방출 디바이스로 이루어지는 군, 바람직하게는 유기 전계발광 디바이스 (OLED), 더 바람직하게는 인광 OLED 로부터 선택된다.

[0157] 유기 전계 발광 디바이스는 캐소드, 애노드 및 적어도 하나의 방출층을 포함한다. 이들 층 외에도, 이것은 또한, 추가 층, 예를 들어 각 경우에 하나 이상의 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 차단 층, 전자 수송층, 전자 주입층, 여기자 차단 층, 전자 차단 층 및/또는 전하 생성 층을 포함할 수도 있다. 마찬가지로 여기자 차단 기능을 갖는 중간층이, 예를 들어, 2 개의 방출 층 사이에 도입되는 것이 가능하다. 그러나, 이러한 층들 중 모든 것이 반드시 존재할 필요는 없다는 것이 언급되어야 한다. 이 경우에, 유기 전계 발광 디바이스는 하나의 방출층을 포함할 수 있거나, 또는 복수의 방출층을 포함할 수 있다. 복수의 방출 층들이 존재하는 경우, 이들은, 전체 결과가 백색 방출이 되도록 전체적으로 380 nm와 750 nm 사이의 여러 방출 최대치들을 갖는 것이 바람직하며; 환언하면, 형광 또는 인광을 나타낼 수도 있는 다양한 방출 화합물들이 방출 층들에 사용된다. 3개의 방출 층을 갖는 시스템이 특히 바람직하며, 여기서 3개의 층은 청색, 녹색 및 오렌지색 또

는 적색 방출을 나타낸다. 본 발명의 유기 전계 발광 디바이스는 또한, 특히 백색-방출 OLED 를 위한, 텐덤 OLED 일 수도 있다.

[0158] 위에 상세히 나타낸 실시형태들에 따른 본 발명의 화합물은 정확한 구조에 따라, 상이한 층에서 사용될 수도 있다. 하나 이상의 인광 방출체를 위한 또는 TADF (thermally activated delayed fluorescence) 를 나타내는 방출체를 위한, 특히 인광 방출체를 위한, 매트릭스 재료로서 방출 층에서 식 (I) 또는 위에 언급된 바람직한 실시형태들의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 디바이스가 바람직하다. 이 경우, 유기 전계 발광 디바이스는 하나의 방출층을 함유할 수도 있거나, 또는 이것은 복수의 방출층을 함유할 수도 있으며, 여기서 적어도 하나의 방출 층은 매트릭스 재료로서 본 발명의 적어도 하나의 화합물을 함유한다. 또한, 본 발명의 화합물은 또한 전자 수송층에서 및/또는 정공 차단층에서 및/또는 정공 수송층에서 및/또는 여기자 차단 층에서 사용될 수 있다.

[0159] 본 발명의 화합물이 방출 층에서 인광 화합물을 위한 매트릭스 재료로서 사용되는 경우, 바람직하게는 하나 이상의 인광 재료 (삼중항 방출체) 와 조합하여 사용된다. 인광은 본 발명의 맥락에서 더 높은 스핀 다중도를 갖는 여기된 상태, 즉, 스핀 상태 > 1, 특히 여기된 삼중항 상태로부터의 루미네이션을 의미하는 것으로 이해된다. 본 출원의 맥락에서, 전이 금속 또는 란타나이드와의 모든 발광 착물, 특히 모든 이리듐, 백금 및 구리 착물은 인광 화합물로서 간주되어야 할 것이다.

[0160] 본 발명의 화합물 및 방출 화합물의 혼합물은 방출체 및 매트릭스 재료의 총 혼합물을 기준으로, 99 부피% 내지 1 부피%, 바람직하게는 98 부피% 내지 10 부피%, 더욱 바람직하게는 97 부피% 내지 60 부피%, 그리고 특히 95 부피% 내지 80 부피% 로 본 발명의 화합물을 함유한다. 따라서, 혼합물은 방출체 및 매트릭스 재료의 총 혼합물을 기준으로, 1 부피% 내지 99 부피%, 바람직하게는 2 부피% 내지 90 부피%, 더욱 바람직하게는 3 부피% 내지 40 부피%, 특히 5 부피% 내지 20 부피% 사이의 방출체를 함유한다.

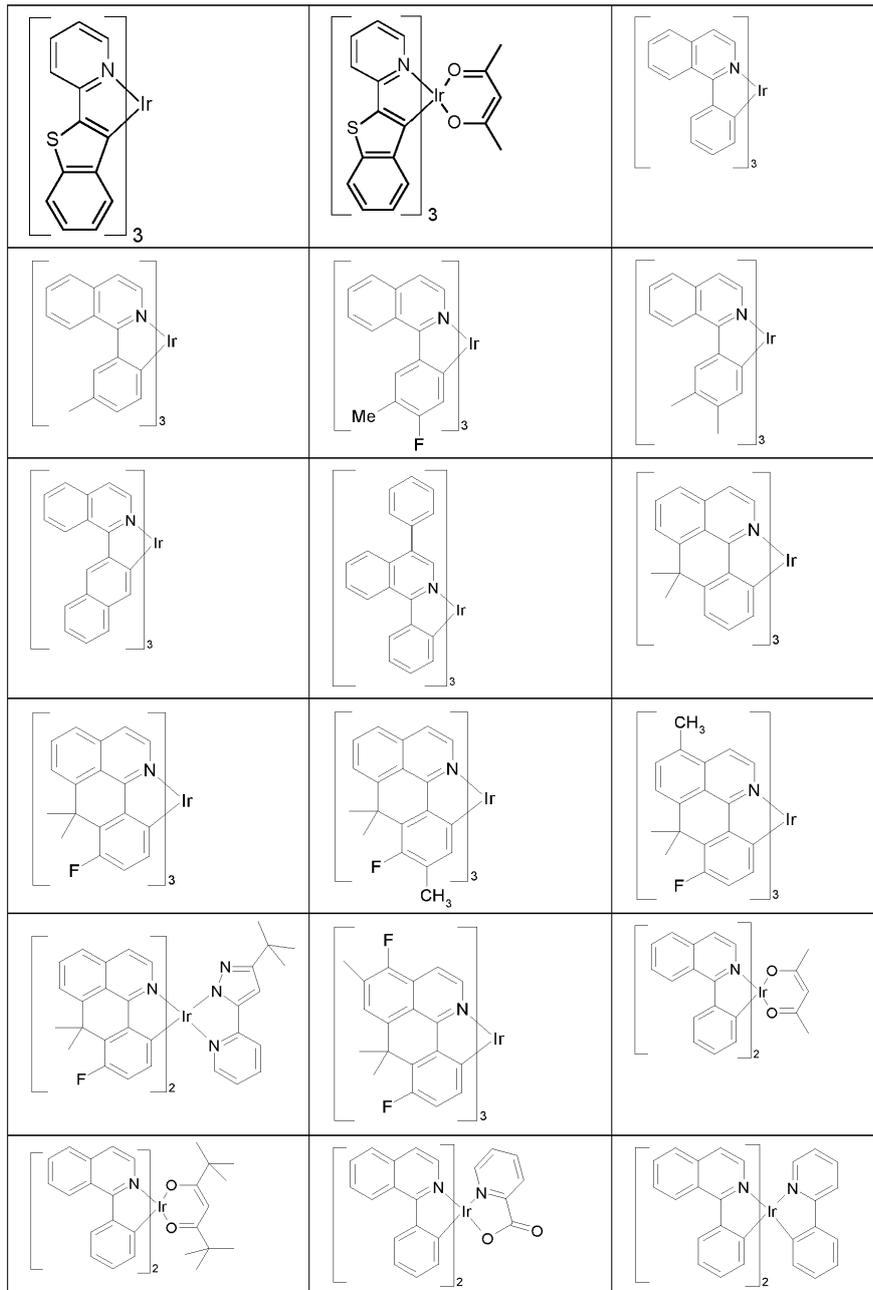
[0161] 본 발명의 추가의 바람직한 실시형태는 추가의 매트릭스 재료와 조합으로 인광 방출체를 위한 매트릭스 재료로서의 본 발명의 화합물의 용도이다. 본 발명의 화합물과 조합으로 사용될 수 있는 적합한 매트릭스 재료는, 예를 들어 WO 2004/013080, WO 2004/093207, WO 2006/005627 또는 WO 2010/006680 에 따른 방향족 케톤, 방향족 포스핀 산화물 또는 방향족 술폰사이드 또는 술폰, 트리아릴아민, 카르바졸 유도체, 예를 들어 CBP (N,N-비스카르바졸릴바이페닐) 또는 WO 2005/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527, WO 2008/086851 또는 WO 2013/041176 에 기재된 카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따른 인돌로카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 2010/136109, WO 2011/000455, WO 2013/041176 또는 WO 2013/056776 에 따른 인데노카르바졸 유도체, 예를 들어 EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160 에 따른 아자카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 2007/137725 에 따른 쌍극성 매트릭스 재료, 예를 들어 WO 2005/111172 에 따른 실란, 예를 들어 WO 2006/117052 에 따른 아자보롤 또는 보로닉 에스테르, 예를 들어 WO 2007/063754, WO 2008/056746, WO 2010/015306, WO 2011/057706, WO 2011/060859 또는 WO 2011/060877 에 따른 트리아진 유도체, 예를 들어 EP 652273 또는 WO 2009/062578 에 따른 아연 착물, 예를 들어 WO 2010/054729 에 따른 디아자실롤 또는 테트라아자실롤 유도체, 예를 들어 WO 2010/054730 에 따른 디아자포스폴 유도체, 예를 들어 WO 2011/042107, WO 2011/060867, WO 2011/088877 및 WO 2012/143080 에 따른 브릿징된 카르바졸 유도체, 예를 들어, WO 2012/048781에 따른 트리페닐렌 유도체, 또는 예를 들어 WO 2015/169412, WO 2016/015810, WO 2016/023608, WO 2017/148564 또는 WO 2017/148565 에 따른 디벤조푸라닐-카르바졸 유도체이다. 마찬가지로 실제 방출체보다 더 짧은 파장 방출을 갖는 추가의 인광 방출체가 혼합물 중의 코-호스트, 또는 예를 들어, WO 2010/108579 에 기재된 바와 같이, 있다손 치더라도, 현저한 정도로 전자 수송에 관여하지 않는 화합물로서 존재하는 것이 가능하다.

[0162] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, 재료는 추가 매트릭스 재료와 조합하여 사용된다. 특히 본 발명의 화합물이 전자 결핍 헤테로방향족 고리 시스템에 의해 치환되는 경우 바람직한 코-매트릭스 재료는, 비스카르바졸, 브릿지된 카르바졸, 트리아릴아민, 디벤조푸라닐-카르바졸 유도체 또는 디벤조푸라닐-아민 유도체 및 카바졸아민의 군으로부터 선택된다.

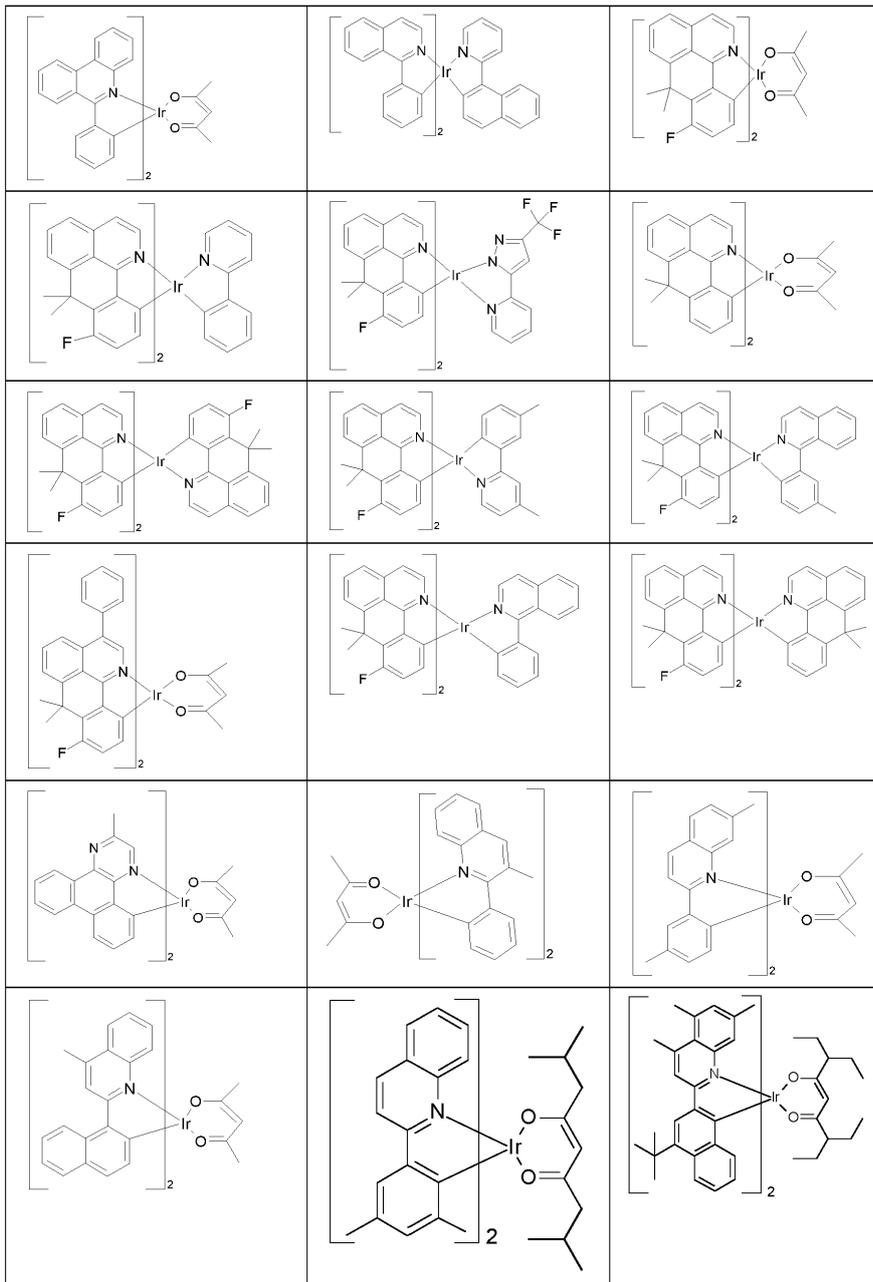
[0163] 적합한 인광 화합물 (= 삼중항 방출체) 는 특히, 적합하게 여기될 때, 바람직하게는 가시 영역에서 발광하며 또한 20 초과, 바람직하게는 38 초과 및 84 미만, 보다 바람직하게는 56 초과 및 80 미만의 원자 번호의 적어도 하나의 원자, 특히 이러한 원자 번호를 갖는 금속을 함유하는 화합물이다. 사용되는 바람직한 인광 방출체들은 구리, 몰리브덴, 텅스텐, 레늄, 루테튬, 오스뮴, 로듐, 이리듐, 팔라듐, 백금, 은, 금 또는 유토포를 함유하는 화합물들, 특히 이리듐 또는 백금을 함유하는 화합물들이다.

[0164] 위에 기재된 방출체들의 예들은 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 2014/094961, WO 2014/094960, WO 2015/036074, WO 2015/104045, WO 2015/117718, WO 2016/015815, WO 2016/124304, WO 2017/032439, WO 2018/011186 및 WO 2018/041769, WO 2019/020538, WO 2018/178001 및 아직 공개되지 않았던 특허 출원 EP 17206950.2 및 EP 18156388.3 에서 찾아볼 수 있다. 일반적으로, 종래 기술에 따라 인광 OLED 에 사용된 바와 같은 그리고 유기 전계 발광의 분야의 당업자에게 알려진 바와 같은 모든 인광 착물들이 적합하고, 당업자는 진보적 능력을 발휘하지 않고서 추가의 인광 착물을 사용 가능할 것이다.

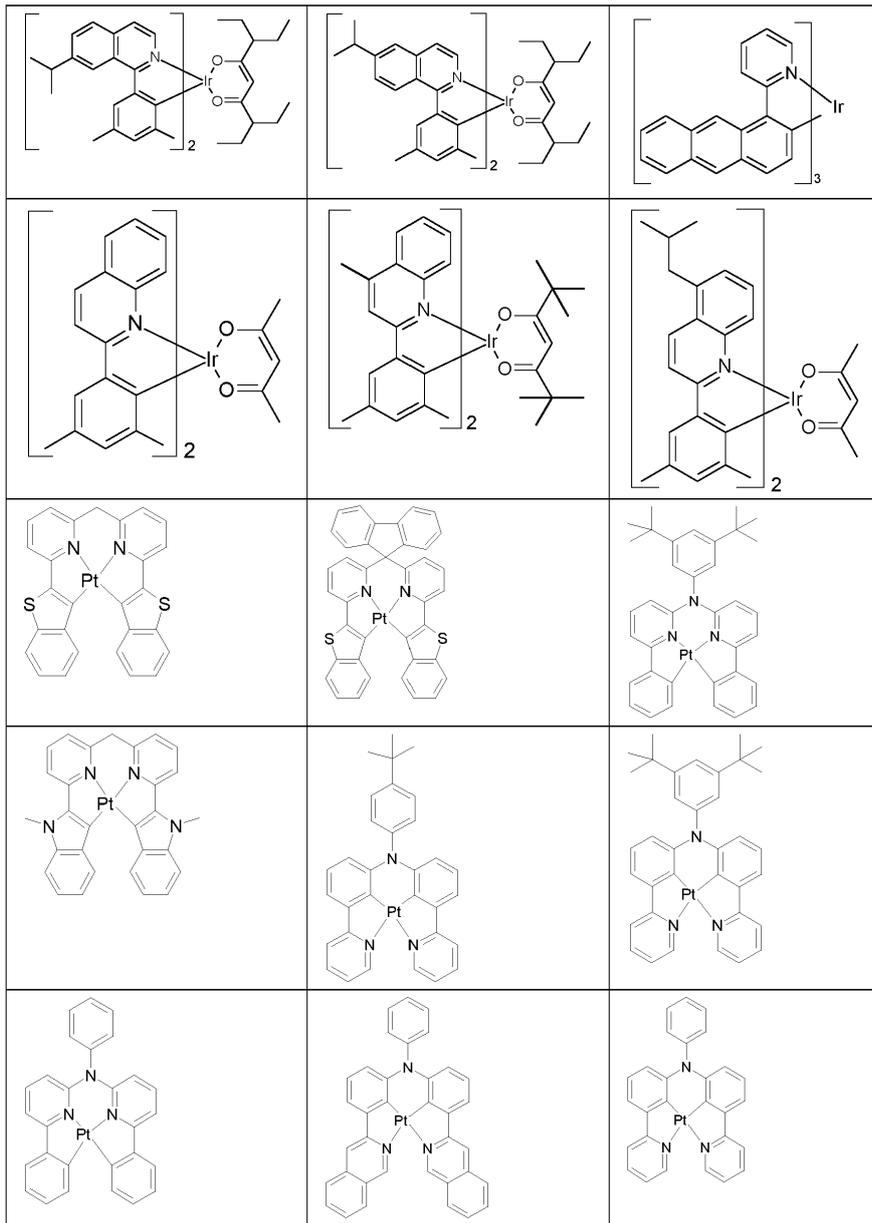
[0165] 인광 도펀트의 예가 아래에 제시되어 있다.



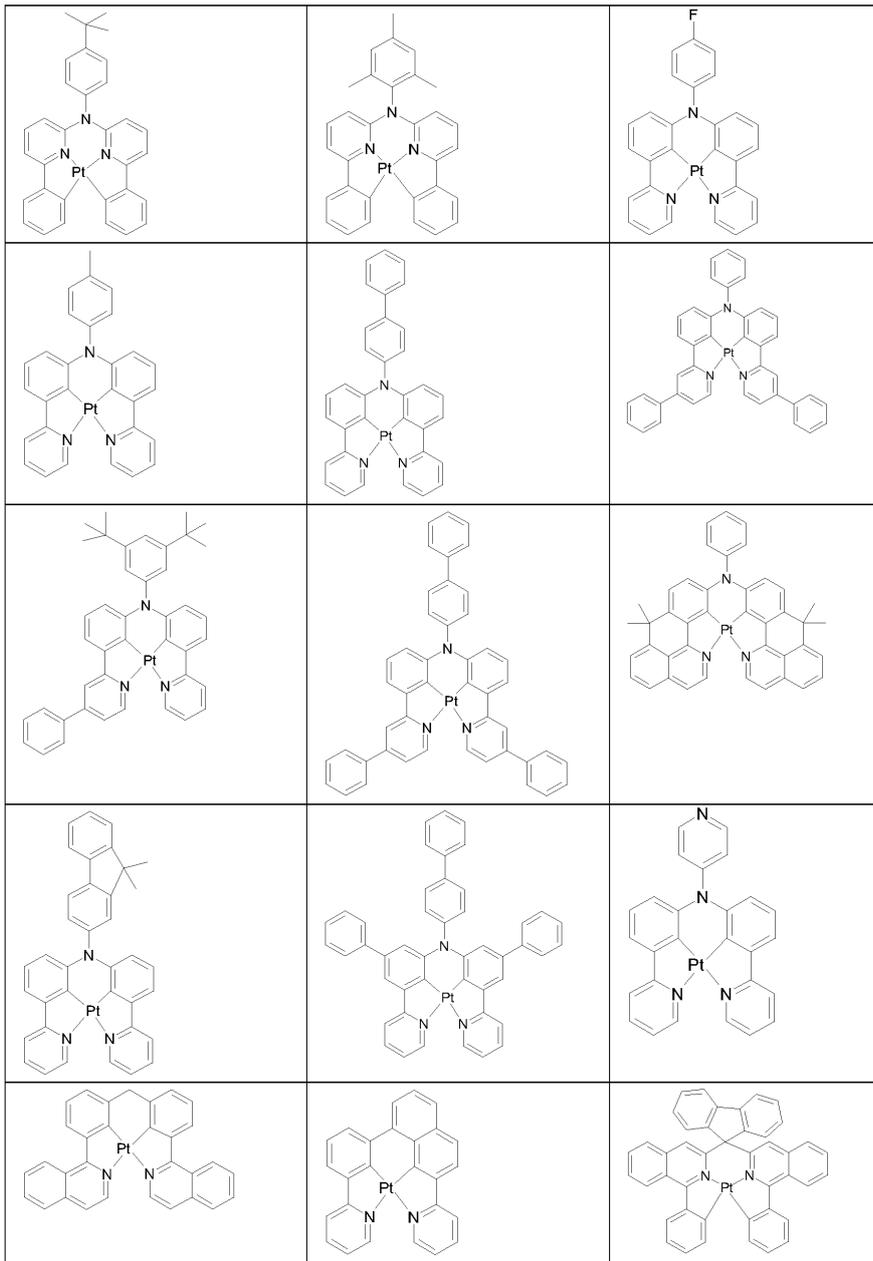
[0166]



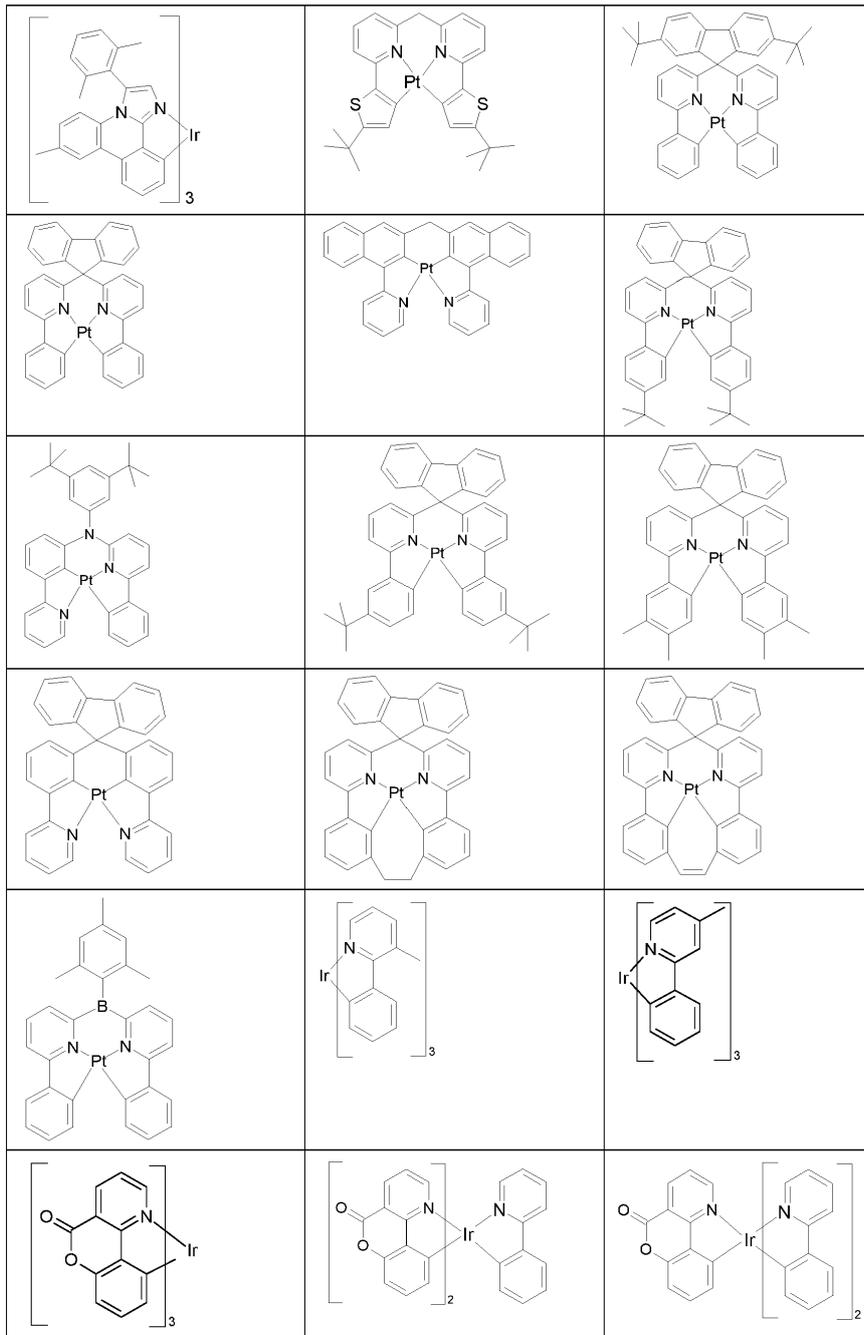
[0167]



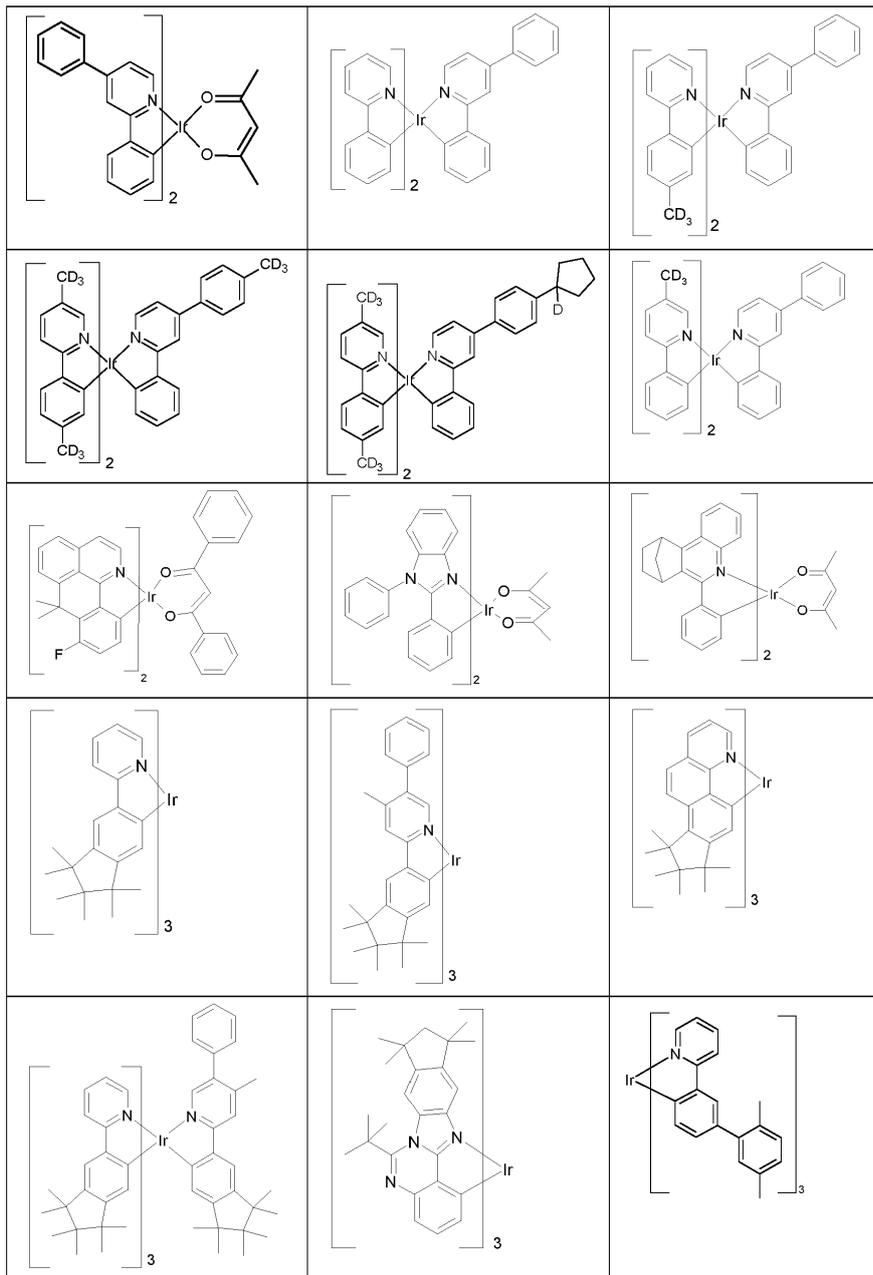
[0168]



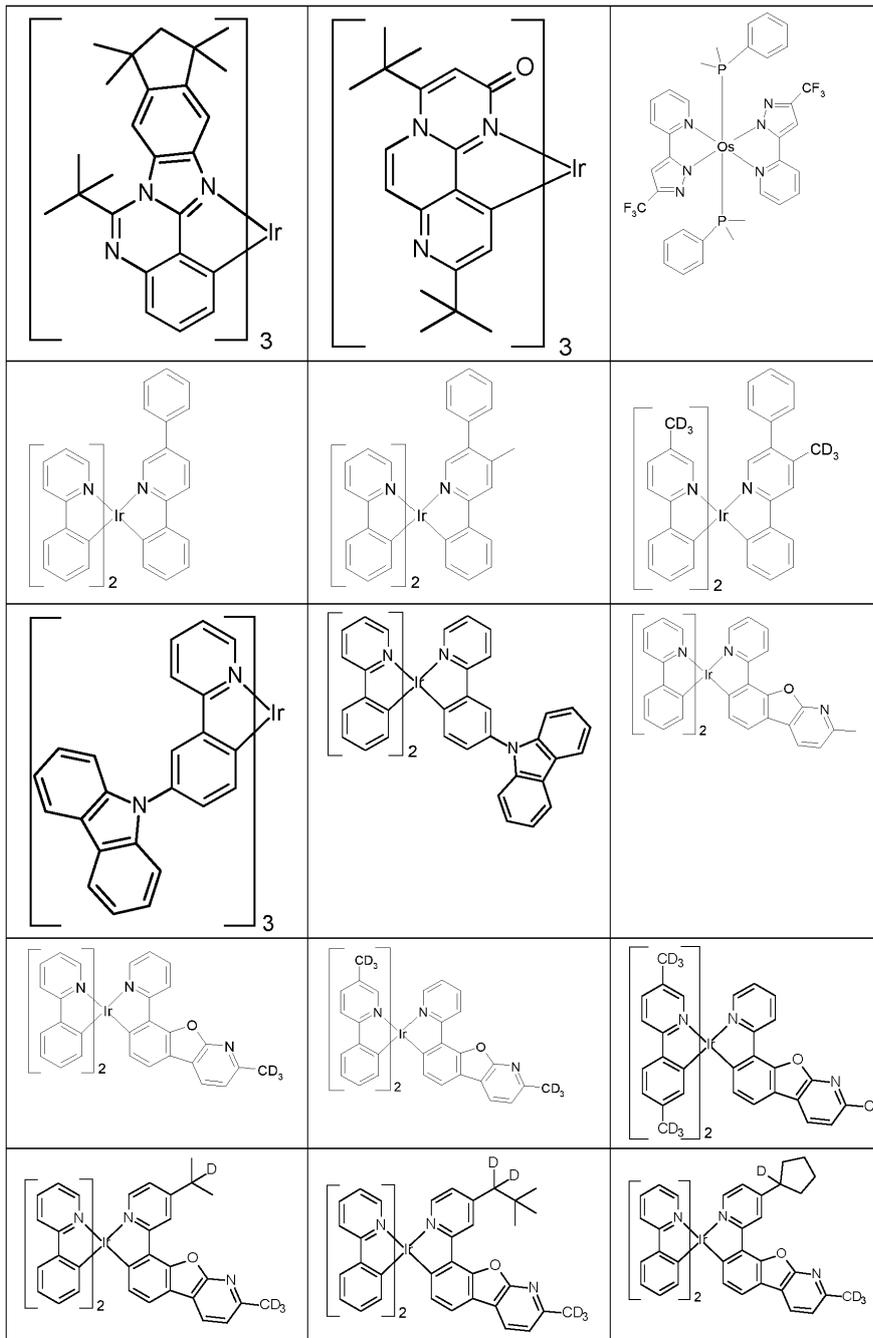
[0169]



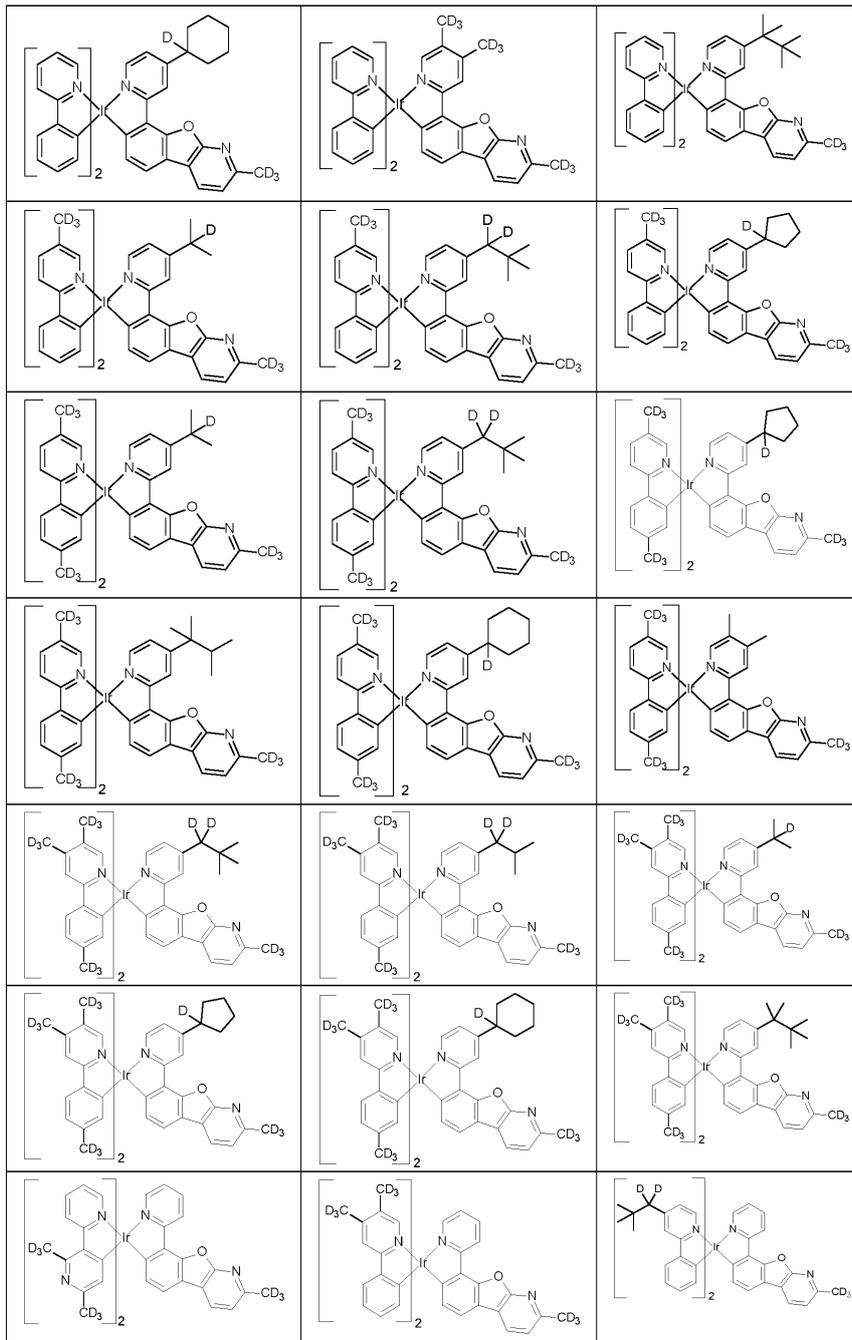
[0170]



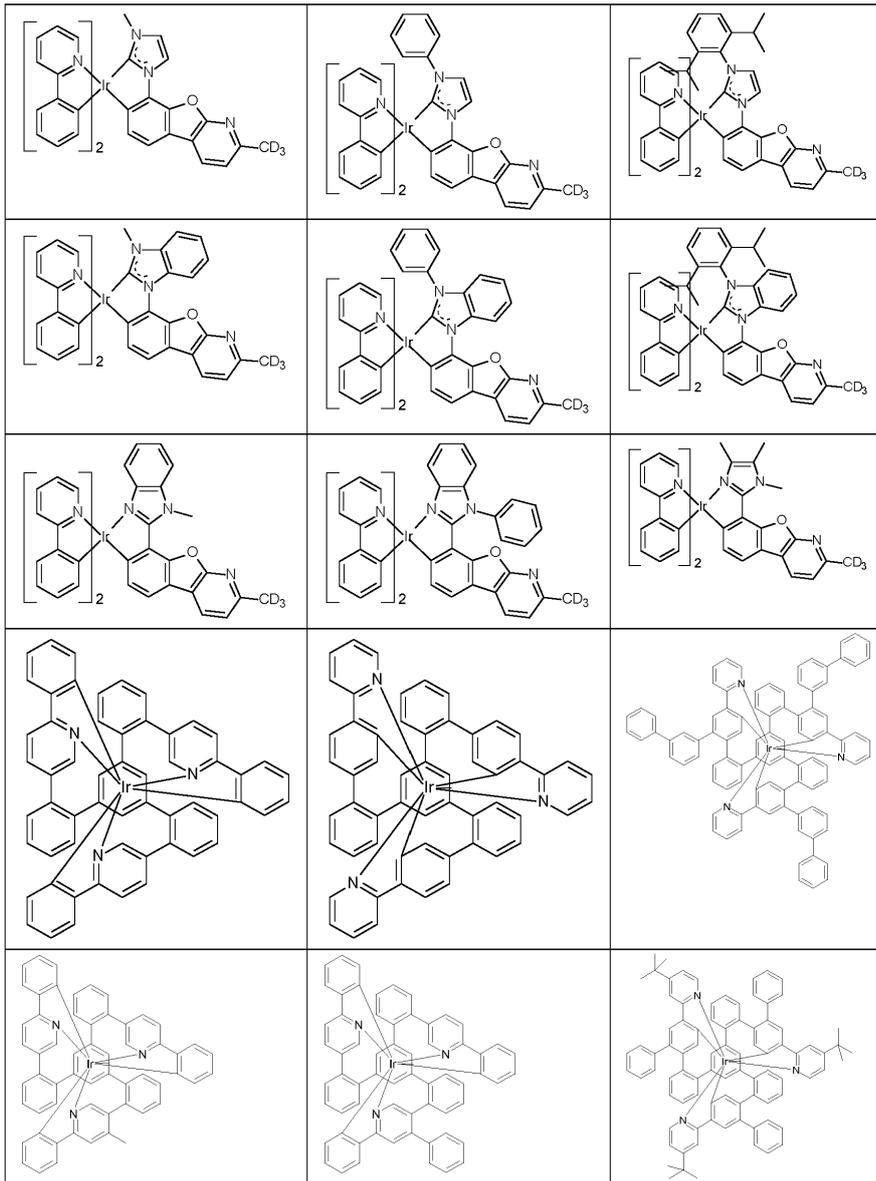
[0171]



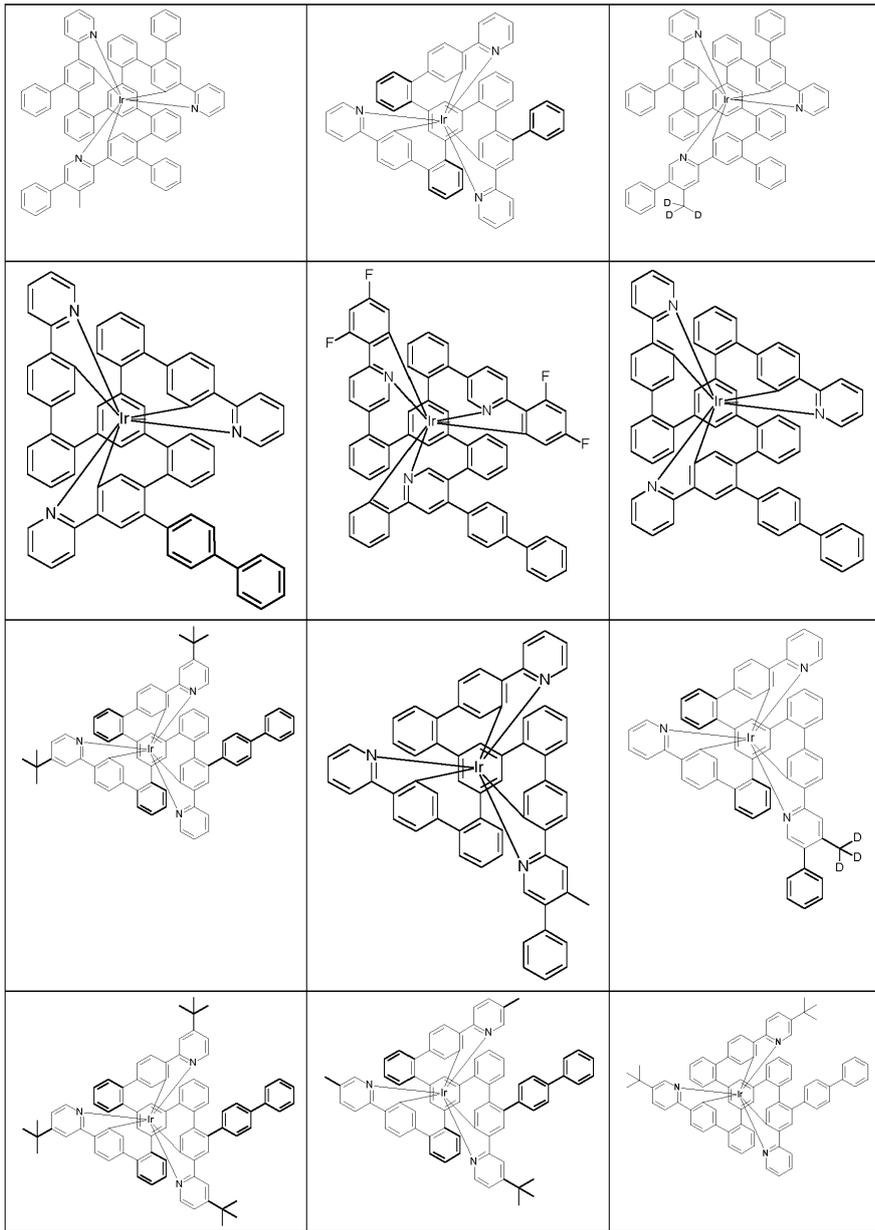
[0172]



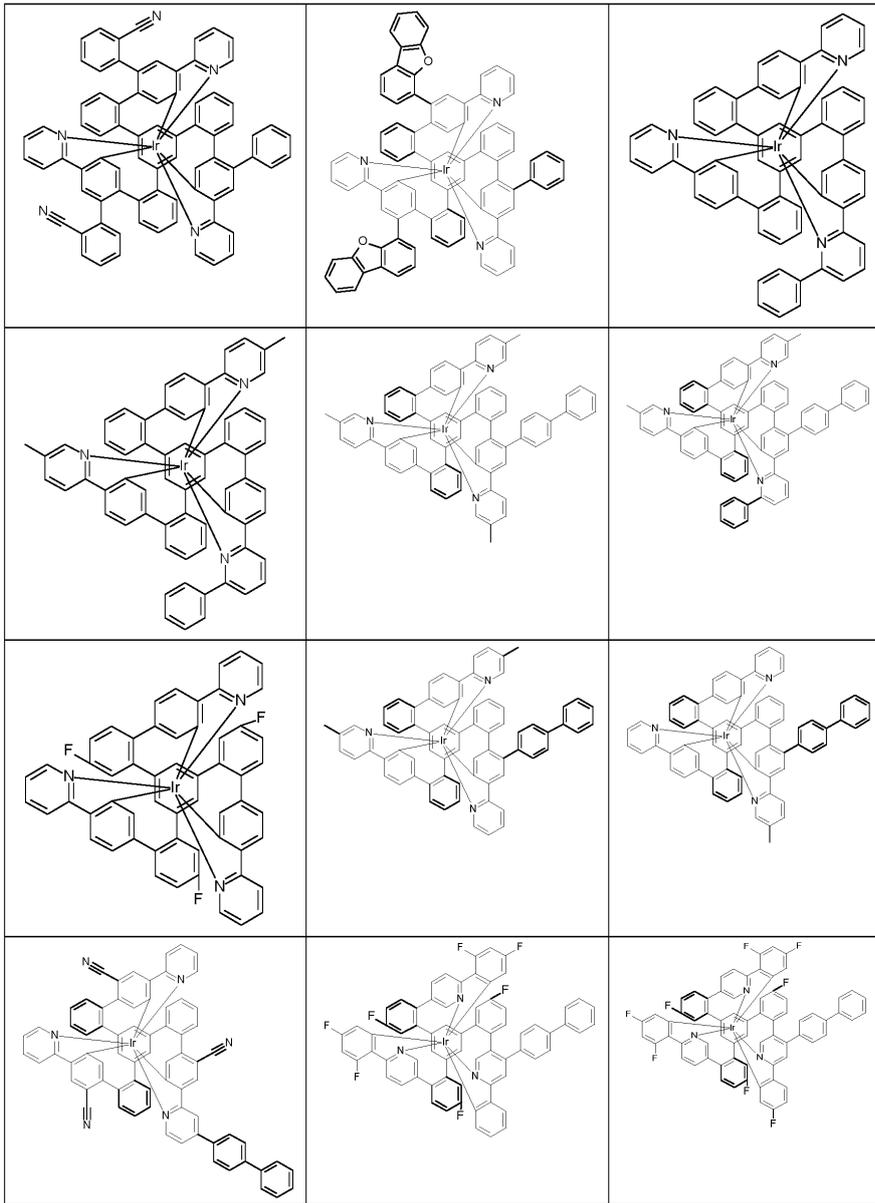
[0173]



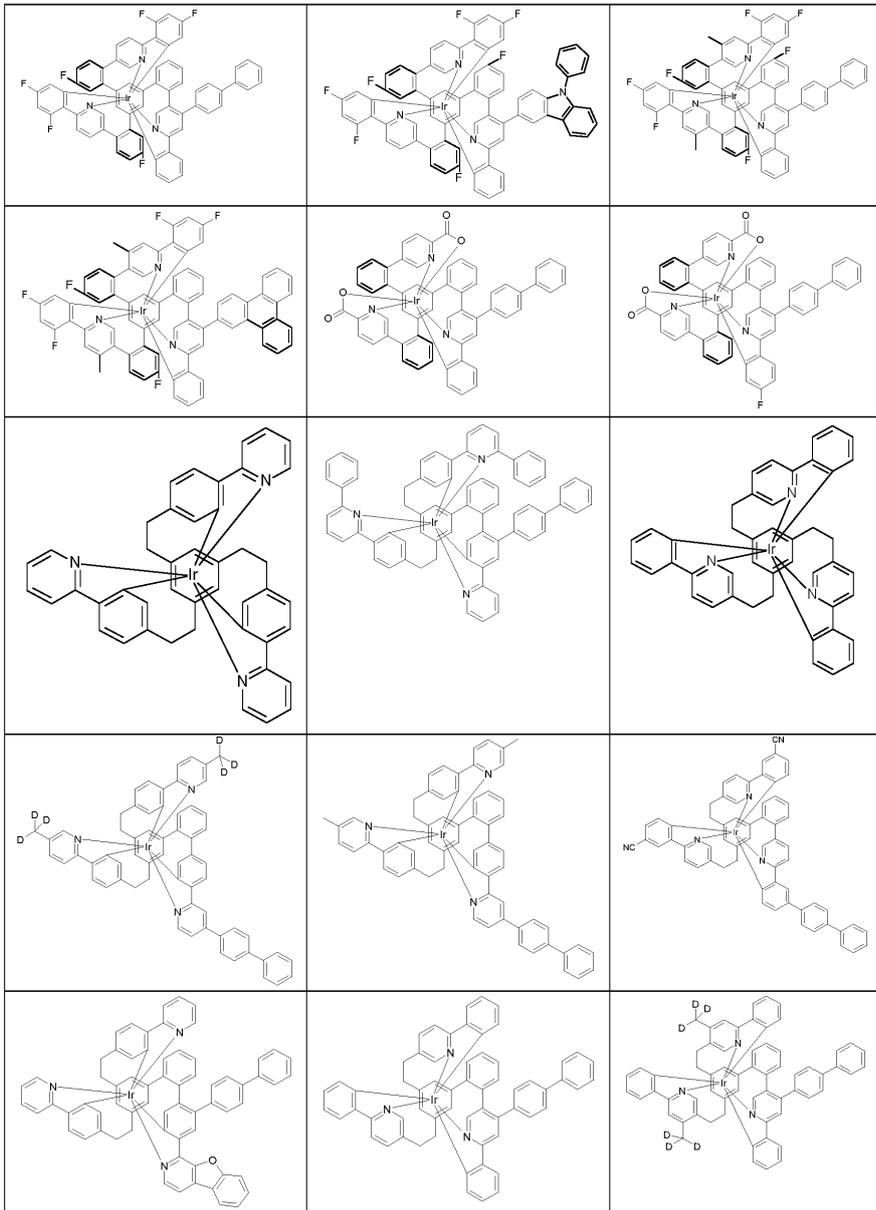
[0174]



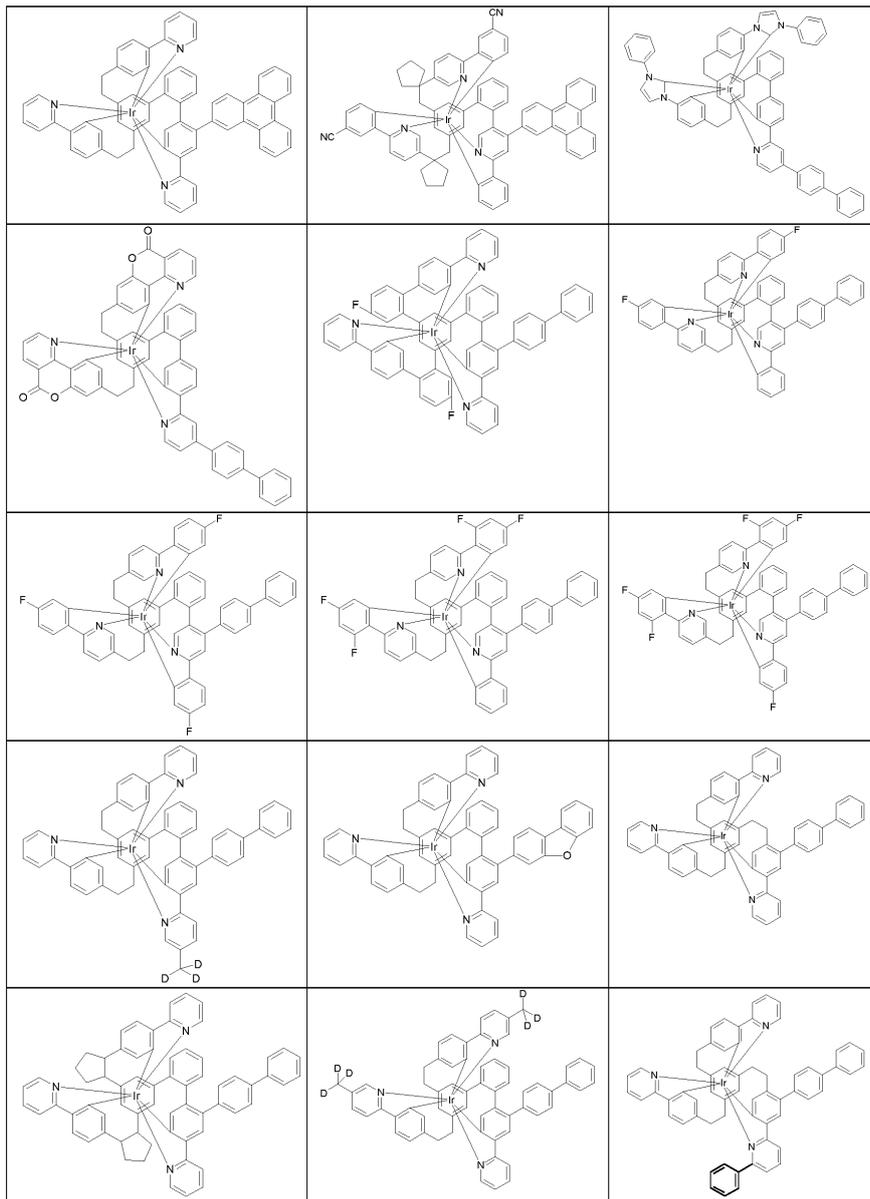
[0175]



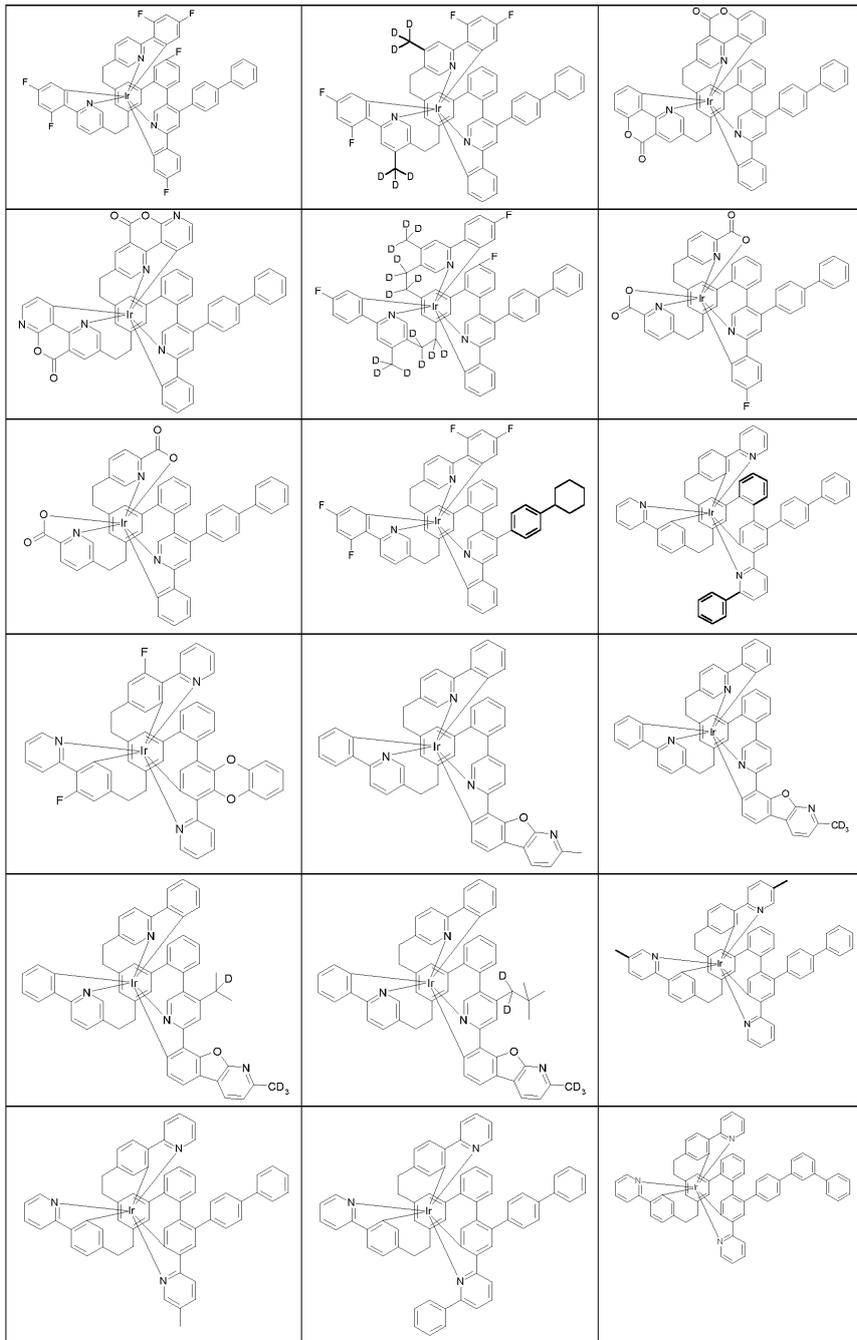
[0176]



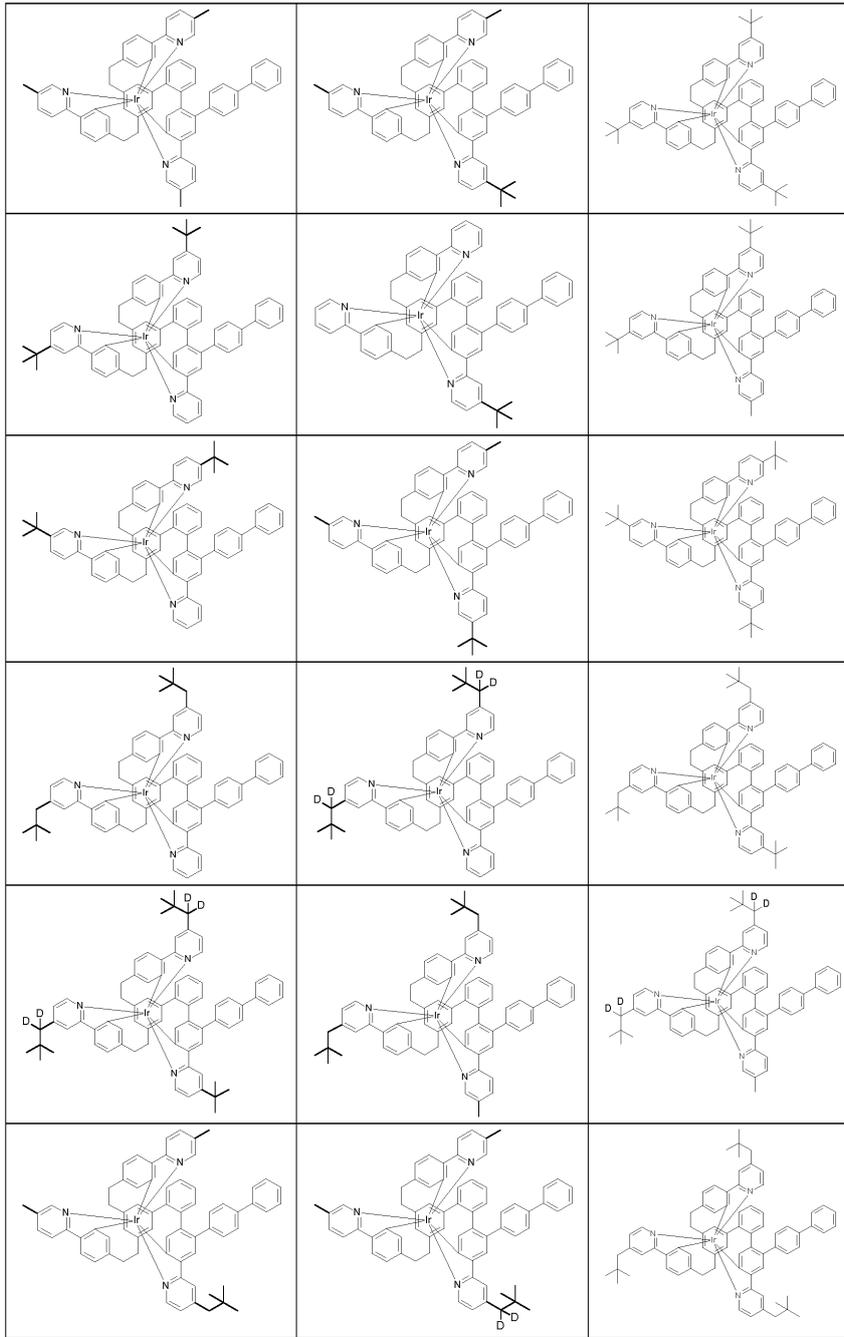
[0177]



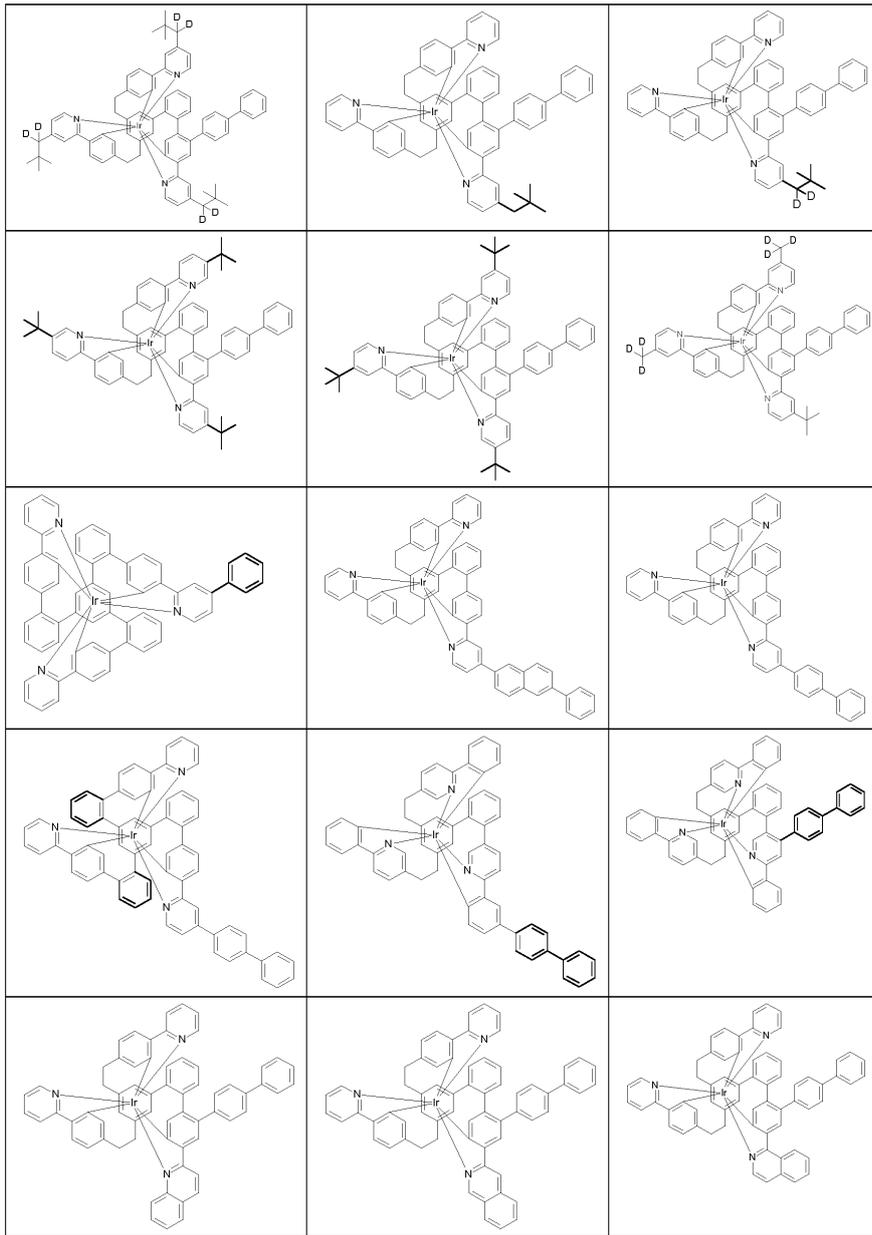
[0178]



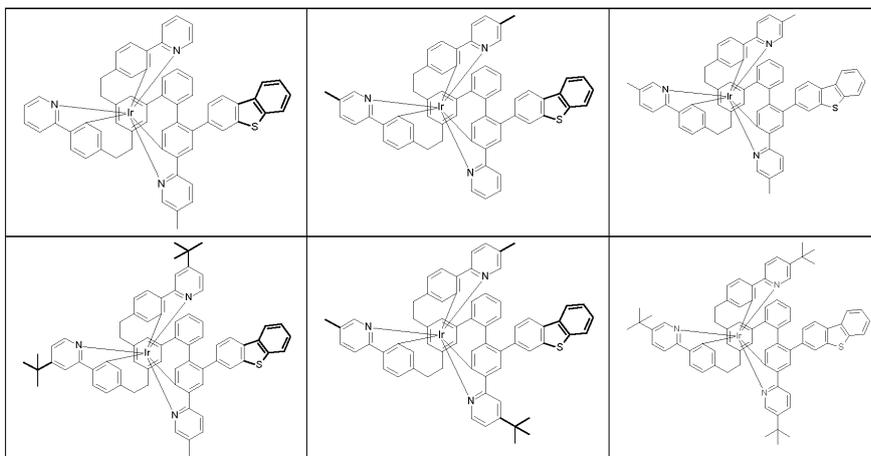
[0179]



[0180]



[0181]



[0182]

[0183]

본 발명의 유기 전계 발광 디바이스의 추가 층에서, 전형적으로 선행기술에 따라 사용된 임의의 재료를 사용할 수 있다. 따라서 당업자는 진보적 능력을 발휘하지 않고서도, 식 (I) 또는 위에 언급된 바람직한 실시형태들의 본 발명의 화합물과 조합하여 유기 전계 발광 디바이스를 위해 알려진 임의의 재료를 사용하는 것이 가능

할 것이다.

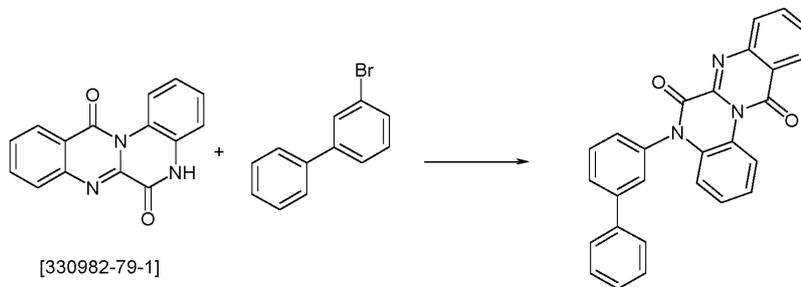
- [0184] 하나 이상의 층이 승화 방법에 의해 코팅되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 디바이스가 또한 바람직하다. 이 경우, 재료는 10^{-5} mbar 미만, 바람직하게는 10^{-6} mbar 미만의 초기 압력에서 진공 승화 시스템에서 증착에 의해 적용된다. 하지만, 또한, 초기 압력은 훨씬 더 낮은, 예를 들어 10^{-7} mbar 미만일 수 있다.
- [0185] 마찬가지로, 하나 이상의 층이 OVPD (organic vapor phase deposition) 방법에 의해 또는 캐리어 기체 승화의 도움으로 코팅되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 디바이스가 바람직하다. 이러한 경우, 재료들은 10^{-5} mbar 내지 1 bar 의 압력에서 적용된다. 이 방법의 특수한 경우는, 재료들이 노즐에 의해 직접 적용되어 구조화되는 OVJP (organic vapor jet printing) 방법이다.
- [0186] 추가적으로, 하나 이상의 층이, 용액으로부터, 예를 들어 스핀 코팅에 의해, 또는 임의의 인쇄 방법, 예를 들어 스크린 인쇄, 플렉소그래픽 인쇄, 오프셋 인쇄, LITI (light-induced thermal imaging, thermal transfer printing), 잉크젯 인쇄 또는 노즐 인쇄에 의해 제조되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 디바이스가 바람직하다. 이 목적을 위해, 예를 들어 적합한 치환을 통해 얻어지는 가용성 (soluble) 화합물이 필요하다.
- [0187] 또한, 예를 들어 하나 이상의 층이 용액으로부터 적용되고 하나 이상의 추가 층이 증착에 의해 적용되는 혼성 방법이 가능하다.
- [0188] 당업자는 일반적으로 이들 방법을 알고 있으며, 본 발명의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 디바이스에 진보적 능력을 발휘하지 않고도 이를 적용할 수 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

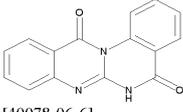
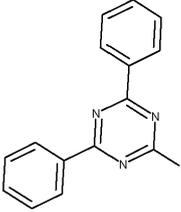
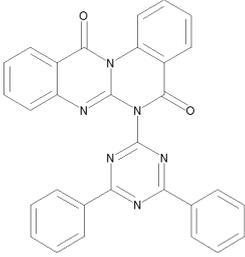
[0189] 실시예

[0190] 이하의 합성은 달리 언급되지 않는 한, 보호성 가스 분위기 하에 수행된다. 반응물은 ALDRICH 또는 ABCR 로부터 공급될 수 있다 (팔라듐(II) 아세테이트, 트리-*o*-톨릴포스핀, 무기 재료, 용매). 문헌으로부터 공지된 반응물질의 경우에 수치는 CAS 번호이다.

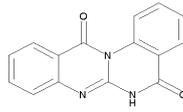
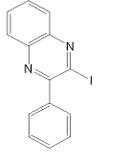
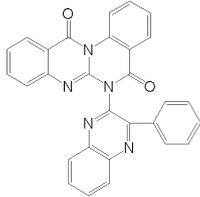
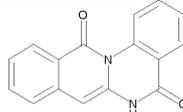
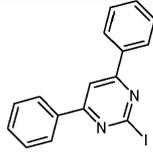
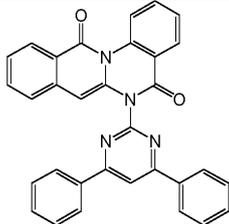
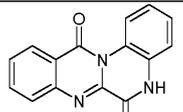
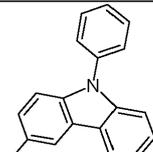
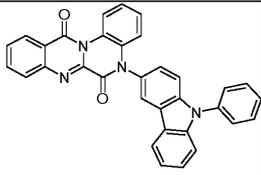
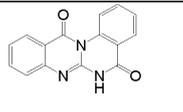
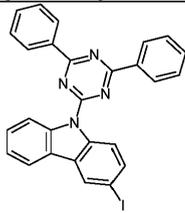
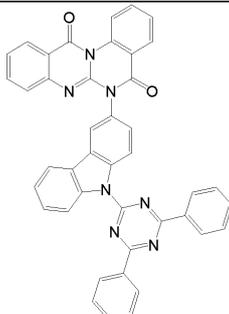
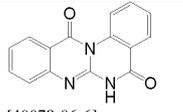
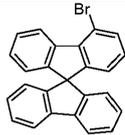
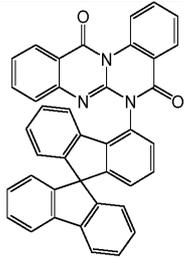
[0191] a) 5-(3-페닐페닐)퀴녹살리노[2,1-*b*]퀴나졸린-6,12-디온



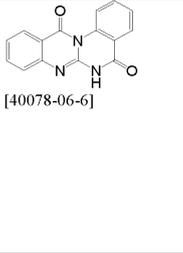
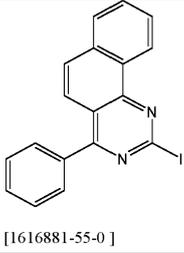
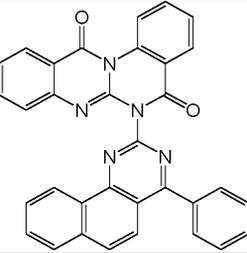
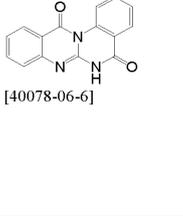
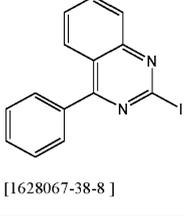
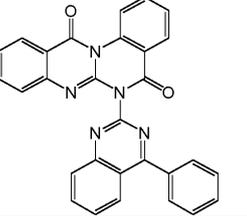
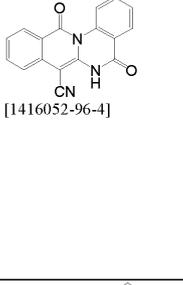
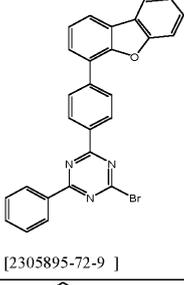
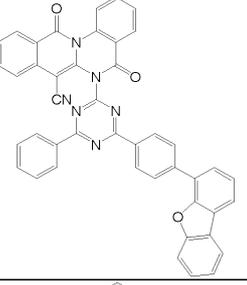
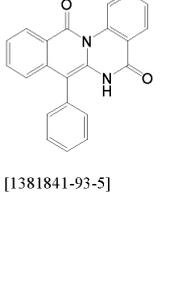
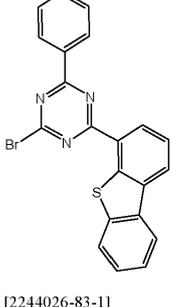
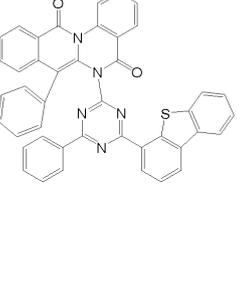
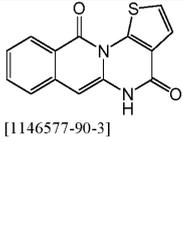
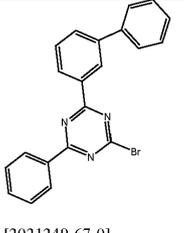
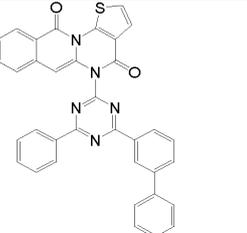
[0194] 하기 화합물이 유사한 방식으로 수득된다:

Ex.	반응물 1	반응물 1	생성물	수율
1a	 [40078-06-6]	 [83819-97-0]		56%

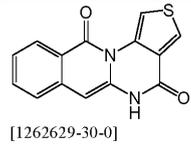
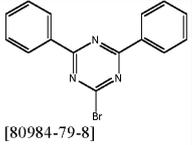
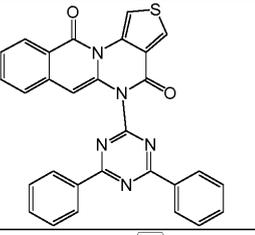
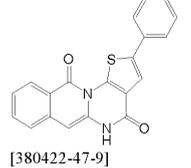
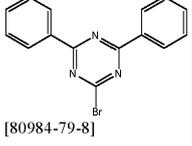
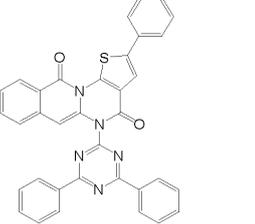
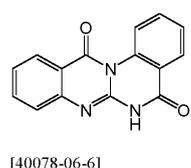
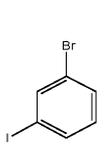
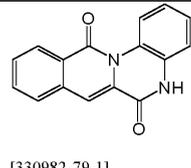
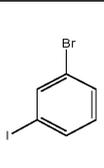
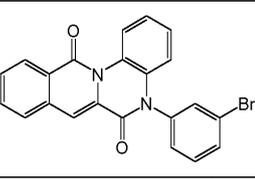
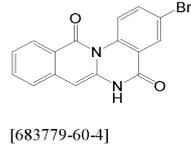
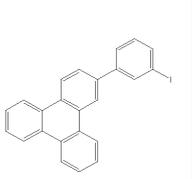
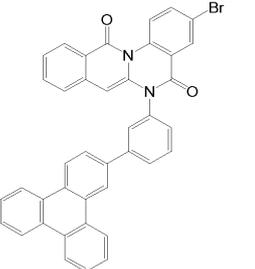
[0195]

2a	 [40078-06-6]	 [1009737-39-6]		52%
3a	 [500198-60-7]	 [374077-23-3]		56%
4a	 [330982-79-1]	 [502161-03-7]		60%
5a	 [40078-06-6]	 [1692900-05-2]		57%
6a	 [40078-06-6]	 [171408-76-7]		61%

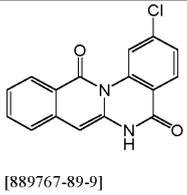
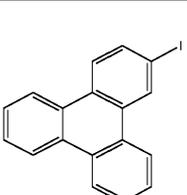
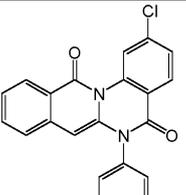
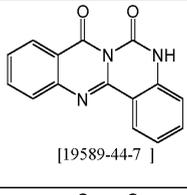
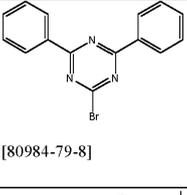
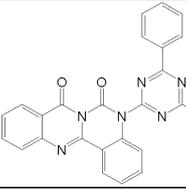
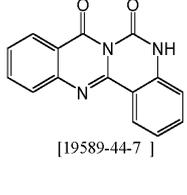
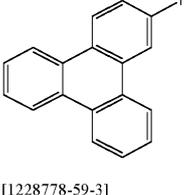
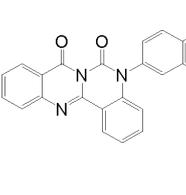
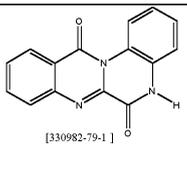
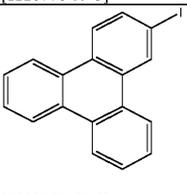
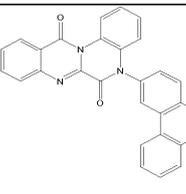
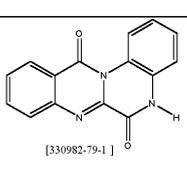
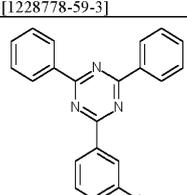
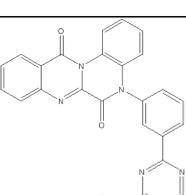
[0196]

<p>7a</p>  <p>[40078-06-6]</p>	 <p>[1616881-55-0]</p>		<p>58%</p>
<p>8a</p>  <p>[40078-06-6]</p>	 <p>[1628067-38-8]</p>		<p>59%</p>
<p>9a</p>  <p>[1416052-96-4]</p>	 <p>[2305895-72-9]</p>		<p>66%</p>
<p>10a</p>  <p>[1381841-93-5]</p>	 <p>[2244026-83-1]</p>		<p>60%</p>
<p>11a</p>  <p>[1146577-90-3]</p>	 <p>[2021249-67-0]</p>		<p>48%</p>

[0197]

12a	 [1262629-30-0]	 [80984-79-8]	 54%
13a	 [380422-47-9]	 [80984-79-8]	 50%
14a	 [40078-06-6]		 53%
15a	 [330982-79-1]		 55%
16a	 [683779-60-4]	 [1395888-84-2]	 60%

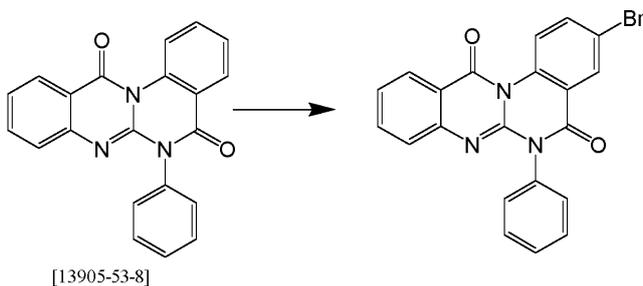
[0198]

17a	 [889767-89-9]	 [1228778-59-3]		59%
18a	 [19589-44-7]	 [80984-79-8]		63%
19a	 [19589-44-7]	 [1228778-59-3]		60%
20a	 [330982-79-1]	 [1228778-59-3]		64%
21a	 [330982-79-1]	 1476799-05-9		67%

[0199]

[0200]

b) 3-브로모-6-페닐-5H-퀴나졸리노[3,2-a]퀴나졸린-5,12(6H)-디온

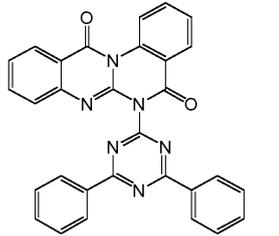
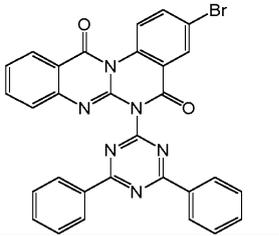
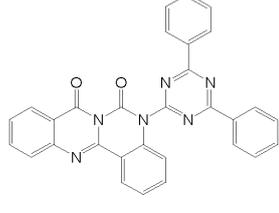
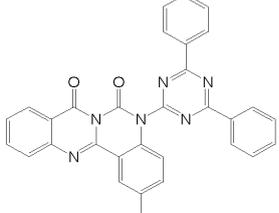


[0201]

[0202]

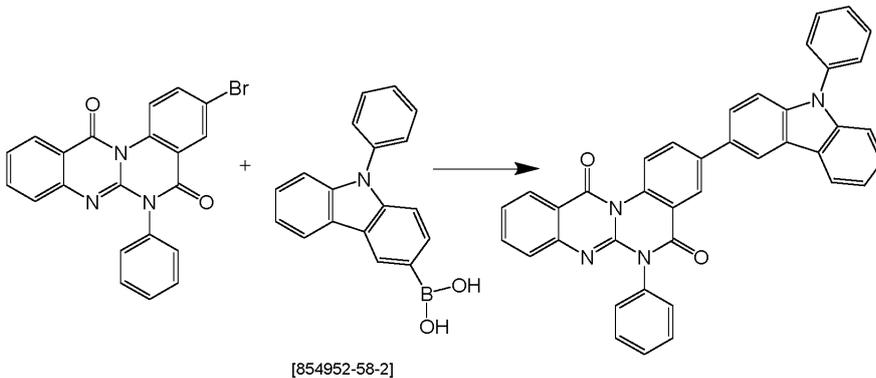
6-페닐-5H-퀴나졸리노[3,2-a]퀴나졸린-5,12(6H)-디온 7.8 g (23 mmol) 을 DMF 150ml에 추가로 충전한다. 이어서, 100 ml 의 DMF 중 4 g (22.5 mmol) 의 NBS 의 용액을 실온의 압 상태에서 적가하고, 혼합물을 실온 이 되게 하고 이 온도에서 4 시간 동안 계속 교반한다. 이어서, 물 150 ml 이 혼합물에 첨가되고 CH₂Cl₂ 로 추출된다. 유기 상을 MgSO₄ 위에서 건조시키고, 용매를 감압하에 제거하였다. 생성물을 고온 헥산으로 추출 교반하고, 흡인 여과한다. 수율: 7.7 g (18.4 mmol), 이론치의 80%, ¹H NMR 에 의한 순도 약 97%.

[0203] 하기 화합물이 유사한 방식으로 수득된다:

Ex.	반응물 1	생성물	수율
1b			85%
2b			79%

[0204]

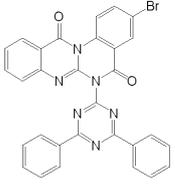
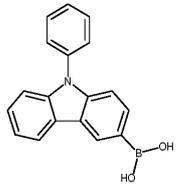
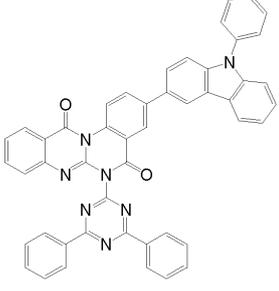
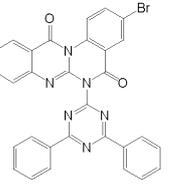
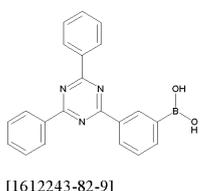
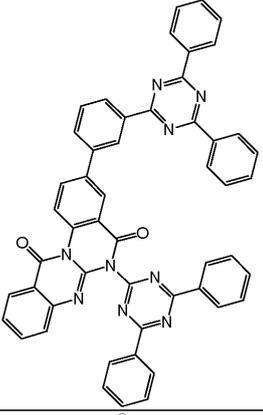
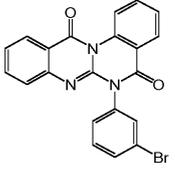
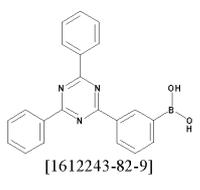
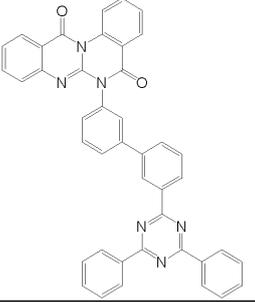
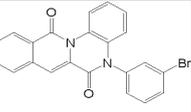
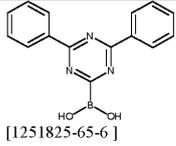
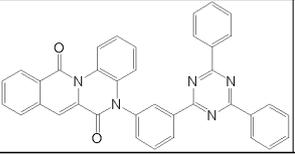
[0205] c) 6-페닐-3-(9-페닐카르바졸-3-일)퀴나졸리노[2,1-b]퀴나졸린-5,12-디온



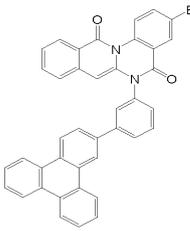
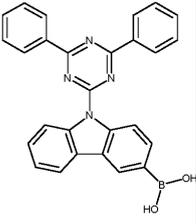
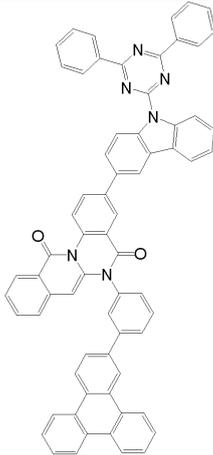
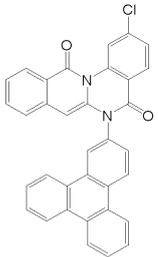
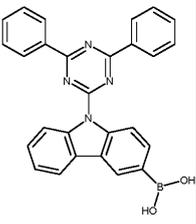
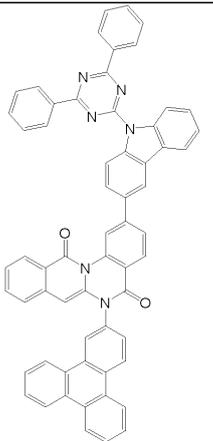
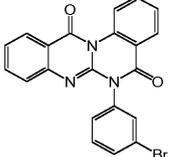
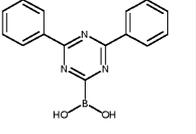
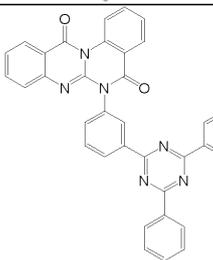
[0206]

[0207] 트리페닐렌-2-보론산 29.9g(110.0mmol), 3-브로모-6-페닐-5H-퀴나졸리노[3,2-a]퀴나졸린-5,12(6H)-디온 46g(110.0mmol) 및 인산삼칼륨 44.6g(210.0mmol) 을 500 ml 의 톨루엔, 500 ml 의 디옥산 및 500 ml 의 물 에 현탁시킨다. 이 현탁액에 913 mg (3.0 mmol) 의 트리-*o*-톨릴포스핀 그리고 다음으로 112 mg (0.5 mmol) 의 팔라듐(II) 아세테이트를 첨가하고, 반응 혼합물을 16 시간 동안 환류하에 가열한다. 냉각 후, 유기 상을 제거하고, 실리카 겔을 통해 여과하고, 매회 200 ml 의 물로 3 회 세척한 다음 농축 건조시킨다. 잔여물을 톨루엔으로부터 그리고 디클로로메탄/이소-프로판올로부터 재결정화하고, 마지막으로 고진공 하에 승화시키며; 순도는 99.9 % 이다. 수율은 54 g (93 mmol) 이며, 이론치의 85% 에 해당한다.

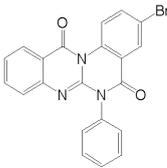
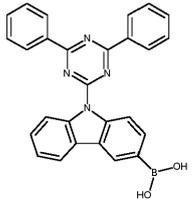
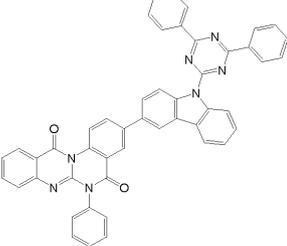
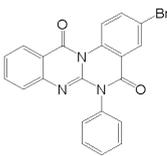
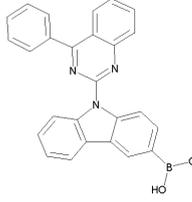
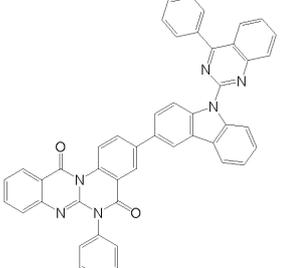
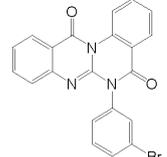
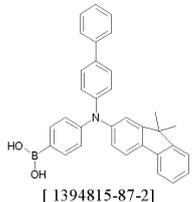
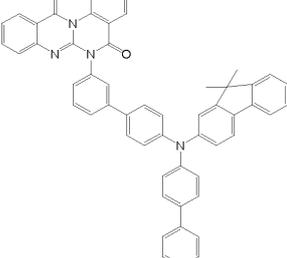
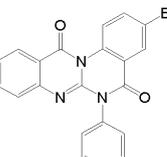
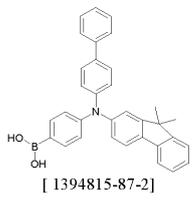
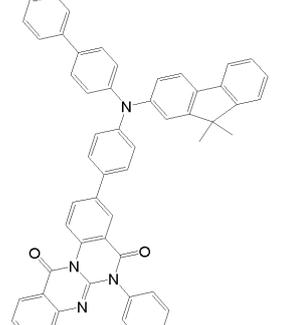
[0208] 하기 화합물이 유사한 방식으로 수득된다:

	반응물 1	반응물 2	생성물	수율
1c		 [854952-58-2]		72%
2c		 [1612243-82-9]		64%
3c		 [1612243-82-9]		67%
4c		 [1251825-65-6]		80%

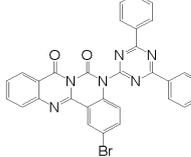
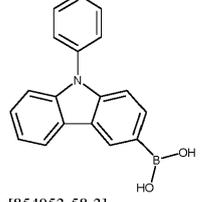
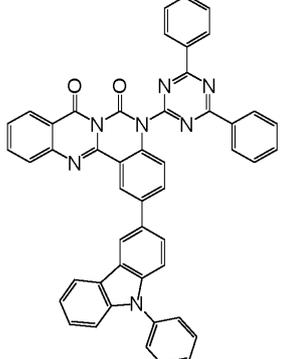
[0209]

<p>5c</p>		 <p>[1266389-18-7]</p>		<p>60%</p>
<p>6c</p>		 <p>[1266389-18-7]</p>		<p>72%</p>
<p>7c</p>		 <p>[1251825-65-6]</p>		<p>83%</p>

[0210]

8c		 <p>[1266389-18-7]</p>	 <p>75%</p>
9c		 <p>[1642121-58-1]</p>	 <p>71%</p>
10c		 <p>[1394815-87-2]</p>	 <p>66%</p>
11c		 <p>[1394815-87-2]</p>	 <p>69%</p>

[0211]

12c		 <p>[854952-58-2]</p>	 <p>65%</p>
-----	-------------------------------------------------------------------------------------	----------------------------------------------------------------------------------------------------------	------------------------------------------------------------------------------------------------

[0212]

[0213] OLED 의 제조

[0214] 이하의 실시예 E1 내지 E9 (표 1 참조) 는 OLED 에서의 본 발명의 재료의 사용을 제시한다.

[0215] 실시예 E1 내지 E9 의 사전 처리:

[0216] 두께 50nm의 구조화된 ITO (indium tin oxide) 로 코팅된 유리 판을 산소 플라즈마로, 다음으로 아르곤 플라즈마로, 코팅 전에, 처리한다. 이들 플라즈마 처리된 유리 플레이트는, OLED들이 적용되는 기관들을

형성한다.

[0217] OLED 는 기본적으로 하기의 층 구조를 갖는다: 기판/선택적 중간층 (IL)/정공 주입층 (HIL)/정공 수송층 (HTL)/전자 차단층 (EBL)/방출층 (EML)/선택적 정공 차단층 (HBL)/전자 수송층 (ETL)/선택적 전자 주입층 (EIL) 및 마지막으로 캐소드. 캐소드는 두께 100 nm 의 알루미늄 층에 의해 형성된다. OLED 의 정확한 구조는 표 1 에서 확인할 수 있다. OLED 의 제조에 필요한 재료를 표 2 에 나타낸다. OLED 의 데이터를 표 3 및 4 에 나열한다.

[0218] 모든 재료는 진공 챔버에서 열 증착에 의해 적용된다. 이러한 경우, 방출층은 항상, 적어도 하나의 매트릭스 재료 (호스트 재료) 및 공증발에 의해 특정 부피 비율로 매트릭스 재료(들)에 첨가되는 방출 도펀트 (방출체)로 이루어진다. IC1:EG1:TEG1 (45%:45%:10%) 과 같은 그러한 형태로 주어진 세부사항은, 여기서 재료 IC1 가 층에서 45% 의 부피 비율로 존재하고 EG1 이 45% 의 부피 비율로, 그리고 TEG1 가 10% 의 부피 비율로 존재한다는 것을 의미한다. 유사하게, 전자 수송 층은 또한 2개의 재료들의 혼합물로 이루어질 수도 있다.

[0219] OLED는 표준 방식으로 특성화된다. 이 목적으로, 전체 발광 스펙트럼, 전류 효율 (CE, cd/A 로 측정됨) 및 외부 양자 효율 (EQE, % 로 측정됨) 이, Lambertian 방출 특성을 가정하여 전류-전압-휘도 특성 (IUL 특성) 으로부터 계산된, 휘도의 함수로서 결정된다. 전체 발광 스펙트럼은 휘도 1000 cd/m² 에서 측정되고 이를 이용하여 CIE 1931 x 및 y 색 좌표가 계산된다. 이에 따라 수득된 결과는 표 3 에서 찾아볼 수 있다.

[0220] **OLED 에서의 본 발명의 재료의 용도**

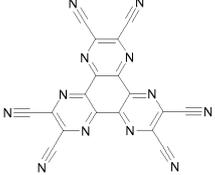
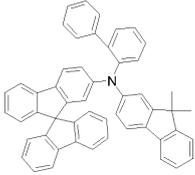
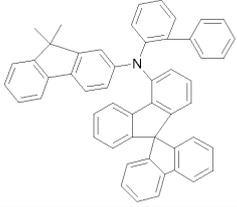
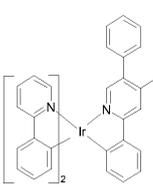
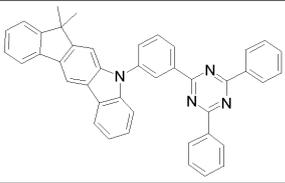
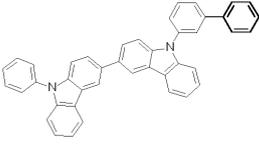
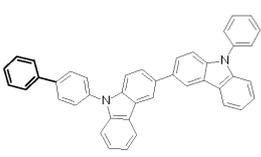
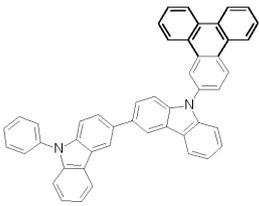
[0221] 본 발명 화합물 EG1 내지 EG7 은 인광 녹색 OLED 의 방출층에서 매트릭스 재료로서 예 E1 내지 E8 에서 사용될 수 있다.

[0222] 표 4 는 일부 예들의 결과를 요약한다. 본 발명의 화합물 EG7 가 전자 수송 재료로 사용될 때, 낮은 전압 및 우수한 효율이 얻어진다.

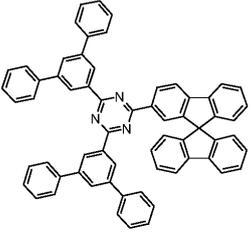
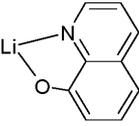
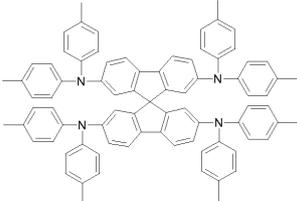
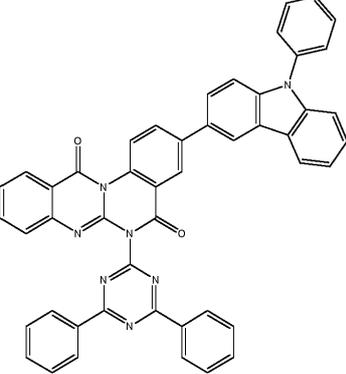
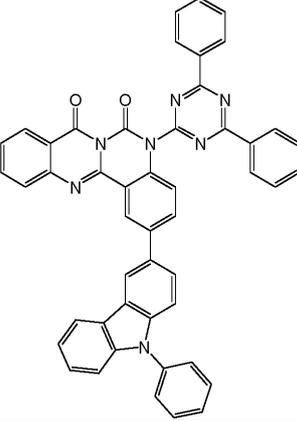
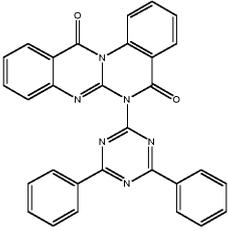
[0223] 표 1: OLED의 구조

Ex.	IL	HIL 두께	HTL 두께	EBL 두께	EML 두께	HBL 두께	ETL 두께	EIL 두께
E1		HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG1:TEG1 (88%:12%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E2		HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG2:TEG1 (88%:12%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E3		HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG1:IC1:TEG1 (49%:44%:7%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E4		HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG3:IC2:TEG1 (44%:44%:12%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E5		HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG4:IC3:TEG1 (49%:44%:7%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E6		HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG5:IC4:TEG1 (49%:44%:7%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E7		HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG6:IC1:TEG1 (49%:44%:7%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E8		HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	EG7:IC1:TEG1 (49%:44%:7%) 40nm	ST2 5nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
E9	SpA1 70nm		HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	EG7:LiQ (50%:50%) 40nm	

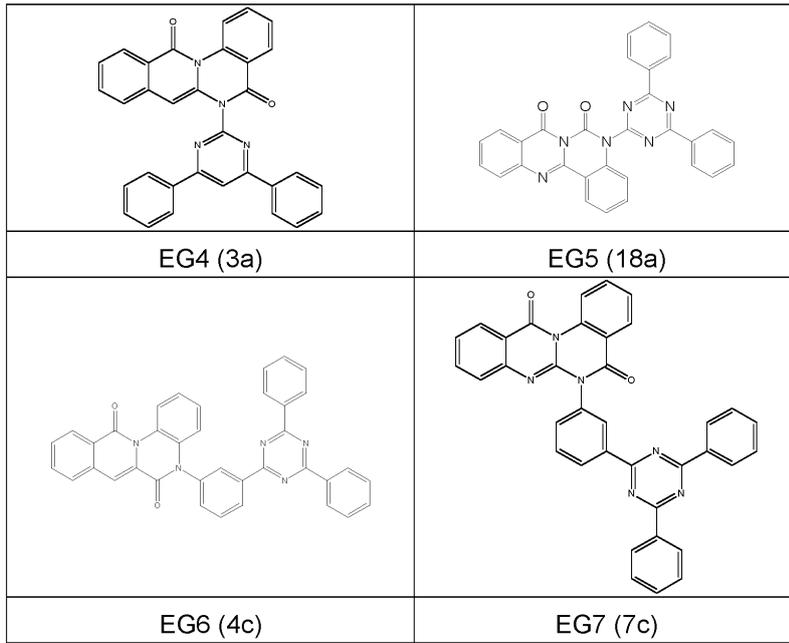
[0224]

	
<p>HATCN</p>	<p>SpMA1</p>
	
<p>SpMA2</p>	<p>TEG1</p>
	
<p>IC1</p>	<p>IC2</p>
	
<p>IC3</p>	<p>IC4</p>

[0225]

	
<p>ST2</p>	<p>LiQ</p>
	
<p>SpA1</p>	<p>EG1 (1C)</p>
	
<p>EG2 (6c)</p>	<p>EG3 (1a)</p>

[0226]



[0227]

[0228]

표 3: OLED 의 데이터

Ex.	U1000 (V)	SE1000 (cd/A)	EQE 1000 (%)	1000 cd/m ² 에서의 CIE x/y
E1	3.6	71	15	0.35/0.61
E2	3.8	68	17	0.34/0.62
E3	3.2	67	17	0.35/0.61
E4	3.1	72	15.5	0.35/0.60
E5	3.1	68	16	0.34/0.62
E6	3.2	67	17	0.35/0.61
E7	3.1	72	18	0.35/0.62
E8	3.1	68	18	0.34/0.61

[0229]

[0230]

표 4: OLED 의 데이터

Ex.	U1000 (V)	CE1000 (cd/A)	LE1000 (lm/W)	EQE 1000 (%)	1000 cd/m ² 에서의 CIE x/y
E9	3.7	62	51	17	0.31/0.64

[0231]