

**(19) 대한민국특허청(KR)**
(12) 공개특허공보(A)**(11) 공개번호** 10-2020-0100699
(43) 공개일자 2020년08월26일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07F 7/08 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류
C07F 7/0816 (2013.01)
C09K 11/06 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2020-7020383

(22) 출원일자(국제) 2018년12월17일
심사청구일자 없음

(85) 번역문제출일자 2020년07월14일

(86) 국제출원번호 PCT/EP2018/085150

(87) 국제공개번호 WO 2019/121483
국제공개일자 2019년06월27일

(30) 우선권주장
17209057.3 2017년12월20일
유럽특허청(EPO)(EP)

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

(72) 발명자
뮌히카-페르나우드 데레사
독일 64283 다름슈타트 하인리히슈트라세 119
아네미앙 르미 마누크
서울특별시 용산구 대사관로11길 42 코퍼어스빌 2
1층 101호
(뒷면에 계속)

(74) 대리인
특허법인코리아나

전체 청구항 수 : 총 20 항

(54) 발명의 명칭 **히테로방향족 화합물****(57) 요약**

본 출원은 특정 화학식에 따른 실라플루오렌 유도체에 관한 것이다. 실라플루오렌 유도체는 전자 디바이스에 사용될 수 있다. 또한, 본 출원은 실라플루오렌 유도체의 제조 방법, 및 실라플루오렌 유도체를 포함하는 전자 디바이스에 관한 것이다.

(52) CPC특허분류

H01L 51/0071 (2013.01)

H01L 51/0094 (2013.01)

H01L 51/5076 (2013.01)

(72) 발명자

부헤러-플리트케어 마르가리타

독일 64409 메셀 로쓰되르퍼 슈트라쎬 47

정 일

경기도 용인시 수지구 포은대로 231 서원마을현대
홈타운아파트 203-304

조 명기

경기도 안양시 만안구 병목안로 61 성원 아파트
1106-202

김 준호

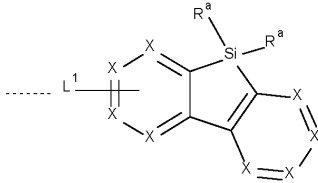
경기도 화성시 동탄중앙로 200 메타폴리스 디-1504

명세서

청구범위

청구항 1

화학식 (A)에 따른 구조에 대해 L¹ 을 통해 결합된 적어도 하나의 전자 수송기를 포함하는 화합물로서,



화학식 (A),

식에서

L¹ 은 단일 결합 또는 6 내지 50 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 및 5 내지 50 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템로부터 선택된 기이고, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R² 에 의해 치환될 수 있고;

X 는 각각의 경우 동일하거나 상이하게, 기 L¹ 이 그 탄소 원자에 결합되는 경우 CR¹ 및 N 또는 C 원자로부터 선택되고;

R^a 는 각각의 경우 동일하거나 상이하게, H, D, F, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시기, 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 시스템에서 선택되고; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^a 는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기 및 상기 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템은 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R² 에 의해 치환될 수 있고, 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기에서의 하나 이상의 CH₂ 기는 -R²C=CR²-, -C≡C-, Si(R²)₂, C=O, C=NR², -C(=O)O-, -C(=O)NR²-, NR², P(=O)(R²), -O-, -S-, SO 또는 SO₂ 에 의해 대체될 수 있고;

R¹ 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, C(=O)R², CN, Si(R²)₃, P(=O)(R²)₂, OR², S(=O)R², S(=O)₂R², 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시기, 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 시스템로부터 선택되고; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R¹ 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 여기서 상기 알킬, 알콕시, 알케닐, 및 알키닐기와, 상기 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템은 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼 R² 에 의해 치환될 수 있고, 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기에서의 하나 이상의 CH₂ 기는 각각의 경우에 -R²C=CR²-, -C≡C-, Si(R²)₂, C=O, C=NR², -C(=O)O-, -C(=O)NR²-, NR², P(=O)(R²), -O-, -S-, SO 또는 SO₂ 에 의해 대체될 수 있고;

R² 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, 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 알콕시기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시기, 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 시스

템에서 선택되고; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^2 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기 및 상기 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템은 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^3 에 의해 치환될 수 있고, 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서의 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 수 있고;

R^3 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알킬기, 6 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템로부터 선택되고; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^3 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 여기서 상기 알킬기, 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 F 및 CN 에 의해 치환될 수 있고; 그리고

점선은 전자 수송기에 대한 기 L^1 의 결합을 나타내는, 화합물.

청구항 2

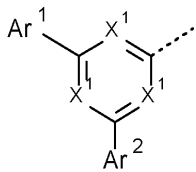
제 1 항에 있어서,

상기 전자 수송기는 피리딘, 피리미딘, 피라진, 피리다진, 트리아진, 예를 들어 1,2,4-트리아진, 1,3,5-트리아진, 벤즈이미다졸, 이미다졸, 퀴놀리네이트, 옥사졸, 퀴나졸린, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 퀴녹살린, 락탐, 피라졸, 티아졸, 벤조티아졸로부터 선택되고, 피리미딘, 트리아진 및/또는 퀴나졸린이 바람직한 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 3

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서,

상기 전자 수송기는 화학식 (B) 에 따른 기이고,



화학식 (B),

식에서 변수 기에 다음이 적용되고:

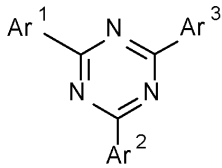
X^1 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, CR^1 및 N 으로부터 선택되고, 단 기 X^1 중 적어도 하나는 N이고, 바람직하게는 기 X^1 중 적어도 2 개 및 보다 바람직하게 모든 기 X^1 은 N이고;

Ar^1 , Ar^2 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R^1 에 의해 치환될 수 있고;

여기서 점선은 화학식 (A) 의 구조에 따른 기에 대한 결합을 나타내고 R^1 은 제 1 항에 정의된 바와 같은, 화합물.

청구항 4

화학식 (I) 의 화합물로서,

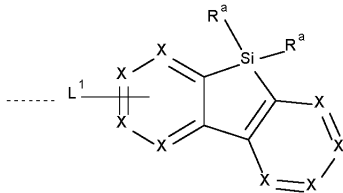


화학식 (I),

식에서 변수 기에 다음이 적용되고:

Ar¹, Ar² 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R¹ 에 의해 치환될 수 있고;

Ar³ 은 하기 화학식 (A) 에 따른 기이고:



화학식 (A),

식에서

L¹ 은 단일 결합 또는 6 내지 50 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 및 5 내지 50 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템로부터 선택된 기이고, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R² 에 의해 치환될 수 있고;

X 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 기 L¹ 이 그 탄소 원자에 결합되는 경우 CR¹ 및 N 또는 C 원자로부터 선택되고;

R^a 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시기, 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 시스템에서 선택되고; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^a 는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기 및 상기 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템은 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼 R² 에 의해 치환될 수 있고, 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기에서의 하나 이상의 CH₂ 기는 각각의 경우에 -R²C=CR²-, -C≡C-, Si(R²)₂, C=O, C=NR², -C(=O)O-, -C(=O)NR²-, NR², P(=O)(R²), -O-, -S-, SO 또는 SO₂ 에 의해 대체될 수 있고;

R¹ 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, C(=O)R², CN, Si(R²)₃, P(=O)(R²)₂, OR², S(=O)R², S(=O)₂R², 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시기, 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 시스템

템로부터 선택되고; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^1 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 여기서 상기 알킬, 알콕시, 알케닐, 및 알키닐기와, 상기 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템은 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있고, 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기에서의 하나 이상의 CH_2 기는 각각의 경우에 $-R^2C=CR^2-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^2)_2$, $C=O$, $C=NR^2$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^2-$, NR^2 , $P(=O)(R^2)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수 있고;

R^2 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H , D , F , $C(=O)R^3$, 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 알콕시기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시기, 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 시스템에서 선택되고; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^2 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기 및 상기 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템은 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^3 에 의해 치환될 수 있고, 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서의 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 수 있고;

R^3 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H , D , F , CN , 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알킬기, 6 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^3 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 여기서 상기 알킬기, 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 F 및 CN 에 의해 치환될 수 있고; 그리고

접선은 화학식 (I)에 따른 트리아진기에 대한 기 L^1 의 결합을 나타내는, 화합물.

청구항 5

제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 화합물, 바람직하게는 화학식 (I) 의 화합물은 제 1 항에 정의된 바와 같은 화학식 (A) 에 따른 정확히 1 개의 기를 포함하는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 6

제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 화합물, 바람직하게는 화학식 (I) 의 화합물은 정확히 1 개의 전자 수송기, 바람직하게는 정확히 1 개의 트리아진기를 포함하는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 7

제 3 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 있어서,

화학식 (I) 및/또는 화학식 (B)에서의 기 Ar^1 은 화학식 (I) 및/또는 화학식 (B)에서의 기 Ar^2 와 상이한 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 8

제 3 항 내지 제 7 항 중 어느 한 항에 있어서,

화학식 (I) 및/또는 화학식 (B)에서의 기 Ar^3 은 화학식 (I) 및/또는 화학식 (B)에서의 기 Ar^1 및/또는 화학식 (I) 및/또는 화학식 (B)에서의 기 Ar^2 와 상이한 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 9

제 3 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 있어서,

화학식 (I) 및/또는 화학식 (B)에서의 기 Ar^2 는 화학식 (I) 및/또는 화학식 (B)에서의 기 Ar^1 보다 많은 방향족 고리 원자를 포함하는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 10

제 3 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 있어서,

화학식 (I) 및/또는 화학식 (B)에서의 기 Ar^1 은 축합 또는 비축합될 수 있는 적어도 2 개의 방향족 고리를 포함하는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 11

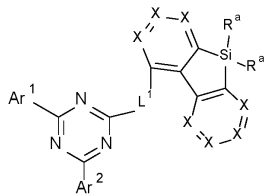
제 3 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 있어서,

화학식 (I) 및/또는 화학식 (B)에서의 기 Ar^2 은 축합 또는 비축합될 수 있는 적어도 2 개의 방향족 고리를 포함하는 것을 특징으로 하는 화합물.

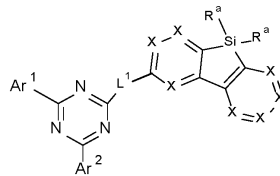
청구항 12

제 4 항 내지 제 11 항 중 어느 한 항에 있어서,

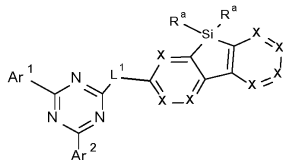
화학식 (I) 의 화합물은 화학식 (I-1), (I-2), (I-3) 및 (I-4) 중 하나를 따르고,



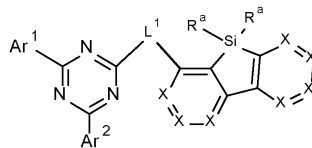
화학식 (I-1)



화학식 (I-2)



화학식 (I-3)



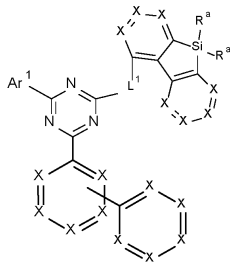
화학식 (I-4)

여기서 발생하는 변수는 제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에서와 같이 정의되고, 화학식 (I-1), (I-3) 및 (I-4) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-1) 및 (I-4) 의 화합물이 특히 바람직한 것을 특징으로 하는 화합물.

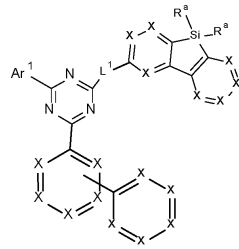
청구항 13

제 4 항 내지 제 12 항 중 어느 한 항에 있어서,

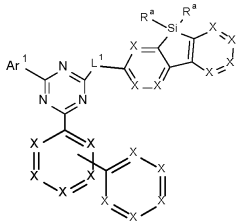
화학식 (I) 의 화합물은 화학식 (I-5), (I-6), (I-7) 및 (I-8) 중 하나를 따르고,



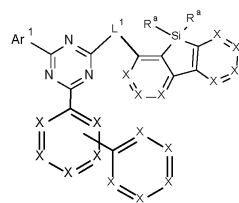
화학식 (I-5)



화학식 (I-6)



화학식 (I-7)



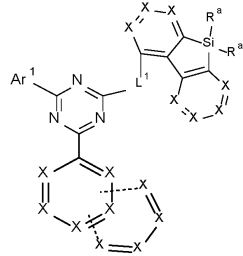
화학식 (I-8)

식에서 발생하는 변수는 제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 정의되고, 화학식 (I-5), (I-7) 및 (I-8) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-5) 및 (I-8) 의 화합물이 특히 바람직한 것을 특징으로 하는 화합물.

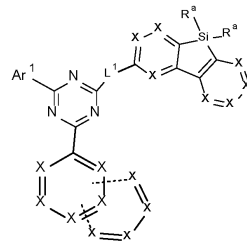
청구항 14

제 4 항 내지 제 13 항 중 어느 한 항에 있어서,

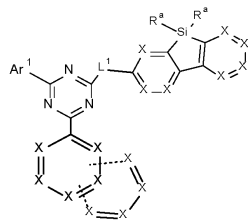
화학식 (I) 의 화합물은 화학식 (I-5a), (I-6a), (I-7a) 및 (I-8a) 중 하나에 상응하고,



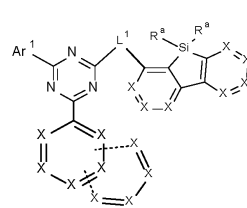
화학식 (I-5a)



화학식 (I-6a)



화학식 (I-7a)



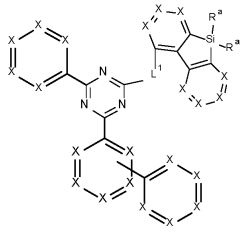
화학식 (I-8a)

식에서 발생하는 변수는 제 1 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에서와 같이 정의되고, 화학식 (I-5a), (I-7a) 및 (I-8a) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-5a) 및 (I-8a) 의 화합물이 특히 바람직한 것을 특징으로 하는 화합물.

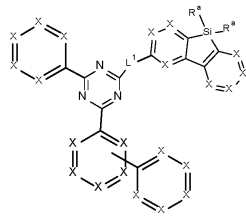
청구항 15

제 4 항 내지 제 14 항 중 어느 한 항에 있어서,

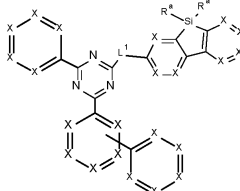
화학식 (I) 의 화합물은 화학식 (I-9), (I-10), (I-11) 및 (I-12) 중 하나에 따르고,



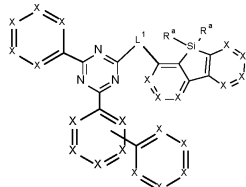
화학식 (I-9)



화학식 (I-10)



화학식 (I-11)



화학식 (I-12)

식에서 발생하는 변수는 제 1 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에서와 같이 정의되고, 화학식 (I-9), (I-11) 및 (I-12) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-9) 및 (I-12) 의 화합물이 특히 바람직한 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 16

제 1 항 내지 제 15 항 중 어느 한 항에 따른 화합물의 제조 방법으로서,

모노- 또는 디할로겐화 실릴 유도체가 할로겐화 비페닐기와 반응하여 실라플루오렌 유도체가 되는 것을 특징으로 하는 화합물의 제조 방법.

청구항 17

제 1 항 내지 제 15 항 중 어느 한 항에 따른 하나 이상의 화합물을 포함하는 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머로서,

상기 폴리머, 올리고머, 또는 덴드리머에 대한 결합(들)은 R^a , R^1 , R^2 또는 R^3 에 의해 치환되는 화학식 (A) 또는 (I) 에서의 임의의 원하는 위치에서 편재화될 수 있는, 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머.

청구항 18

제 1 항 내지 제 17 항 중 어느 한 항에 따른 적어도 하나의 화합물 또는 제 14 항에 따른 적어도 하나의 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머, 및 적어도 하나의 용매를 포함하는, 제형.

청구항 19

제 1 항 내지 제 15 항 중 어느 한 항에 따른 적어도 하나의 화합물, 또는 제 18 항에 따른 적어도 하나의 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머를 포함하는, 전자 디바이스.

청구항 20

전자 디바이스에서의, 제 1 항 내지 제 15 항 중 어느 한 항에 따른 화합물 또는 제 17 항에 따른 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머의 용도.

발명의 설명

기술 분야

본 출원은 특정 화학식에 따른 실라플루오렌 유도체에 관한 것이다. 실라플루오렌 유도체는 전자 디바이스에 사용될 수 있다. 또한, 본 출원은 실라플루오렌 유도체의 제조 방법, 및 실라플루오렌 유도체를 포함하

[0001]

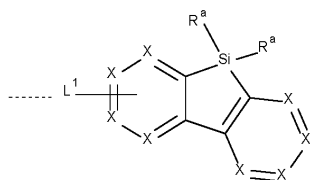
는 전자 디바이스에 관한 것이다.

배경 기술

- [0002] 본 출원에 따른 전자 디바이스는 유기 반도체 재료를 기능적 재료로서 함유하는, 유기 전자 디바이스인 것으로 이해된다. 특히, 전자 디바이스는 유기 전계발광 디바이스 (OLED) 이다. 본 출원의 의미에서, OLED 는 하나 이상의 유기 화합물 층을 포함하고, 전압이 인가되는 경우에 빛을 방출하는 전자 디바이스인 것으로 이해된다. OLED 의 구조뿐 아니라 기본 작동 모드는 물론, OLED 의 제조 방법은 당업자에게 공지되어 있다.
- [0003] 전자 디바이스, 특히 OLED 에 관해서는, OLED 에 사용될 수 있는 대체 화합물을 찾는 것에 대해 큰 관심이 있다. 또한, 특히 디바이스의 수명, 효율 및 작동 전압과 관련하여, 전자 디바이스의 성능을 향상시키는 화합물을 발견하는 것에 대해 큰 관심이 있다. 또한, 가공이 용이하고, 온도 안정성이 있으며, 유리 상태의 안정성이 높은 화합물을 발견하는 것에 대해 큰 관심이 있다. 여전히 지난 수십 년 동안의 강력한 연구 노력에도 불구하고, 이러한 요구는 아직 충족되지 못했다.
- [0004] 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 차단층 및 방출층과 같은 정공 수송 기능을 갖는 층은 OLED 의 성능에 큰 영향을 미치는 것으로 알려져 있다.
- [0005] 따라서, 이러한 층에 사용하기에 적합한 신규 재료, 특히 정공 수송 특성을 갖고 바람직하게는 OLED 의 전술한 특성의 개선을 야기하는 신규 재료에 대한 강한 요구가 있다.
- [0006] 선행 기술에서, 트리아진 유도체는 전자 수송 기능을 갖는 층에 사용하기에 아주 적합한 재료의 부류로서 공지되어 있다. 많은 상이한 구조적 엘리먼트를 갖는 트리아진 유도체, 예를 들어 플루오렌 기 및 스피로비플루오레닐 기가 공지되어 있다.

발명의 내용

- [0007] 본 발명에 따르면, 전자 디바이스, 특히 OLED 디바이스의 성능은 실라플루오렌기 및 트리아진기를 갖는 화합물을 사용함으로써 개선되는 것으로 밝혀졌다. 이러한 실라플루오렌 화합물을 사용하면 다음 효과 중 하나 이상이 달성된다:
 - [0008] - 디바이스 수명 증가
 - [0009] - 디바이스 효율 증가
 - [0010] - 작동 전압 감소
 - [0011] - 재료의 가공성 개선
 - [0012] - 재료의 온도 안정성 개선
 - [0013] - 재료의 유리 상태의 안정성 개선.
- [0014] 따라서, 본 발명은 L¹ 을 통해 화학식 (A)에 따른 구조에 결합된 적어도 하나의 전자 수송기를 포함하는 화합물을 제공한다.



- [0015] **화학식 (A),**
- [0016] 식에서
- [0017] L¹ 은 단일 결합 또는 6 내지 50 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 및 5 내지 50 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템로부터 선택된 기이고, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R² 에 의해 치환될 수 있고;

- [0018] X 는 각각의 경우 동일하거나 상이하게, 기 L^1 이 그 탄소 원자에 결합되는 경우 CR^1 및 N 또는 C 원자로부터 선택되고;
- [0019] R^a 는 각각의 경우 동일하거나 상이하게, H, D, F, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시기, 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 시스템에서 선택되고; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^a 는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기 및 상기 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템은 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있고, 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기에서의 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^2C=CR^2-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^2)_2$, $C=O$, $C=NR^2$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^2-$, NR^2 , $P(=O)(R^2)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수 있고;
- [0020] R^1 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, $C(=O)R^2$, CN, $Si(R^2)_3$, $P(=O)(R^2)_2$, OR^2 , $S(=O)R^2$, $S(=O)_2R^2$, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시기, 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; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^1 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 여기서 상기 알킬, 알콕시, 알케닐, 및 알키닐기와, 상기 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템은 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있고, 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기에서의 하나 이상의 CH_2 기는 각각의 경우에 $-R^2C=CR^2-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^2)_2$, $C=O$, $C=NR^2$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^2-$, NR^2 , $P(=O)(R^2)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수 있고;
- [0021] R^2 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, $C(=O)R^3$, 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 알콕시기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시기, 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 시스템에서 선택되고; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^2 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기 및 상기 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템은 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^3 에 의해 치환될 수 있고, 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서의 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 수 있고;
- [0022] R^3 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알킬기, 6 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^3 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 여기서 상기 알킬기, 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 F 및 CN 에 의해 치환될 수 있고; 그리고
- [0023] 점선은 전자 수송기에 대한 기 L^1 의 결합을 나타낸다.
- [0024] 하기 정의가 일반 정의로서 사용되는 화학 기에 적용된다. 이들은 더 구체적인 정의가 제시되지 않는 한 적용된다.
- [0025] 본 발명의 의미에서 아릴기는 6 내지 50 개, 바람직하게는 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 함유하는데, 이 중 어느 것도 헤테로원자가 아니다. 여기서 아릴기는 단순 방향족 고리, 예를 들어 벤젠, 또는 축합 방향족 폴리사이클, 예를 들어, 나프탈렌, 페난트렌 또는 안트라센을 의미하는 것으로 여겨진다. 본 출원의 의미에서의 축합 방향족 폴리사이클은 서로 축합된 2 개 이상의 단순 방향족 고리로 이루어진다.

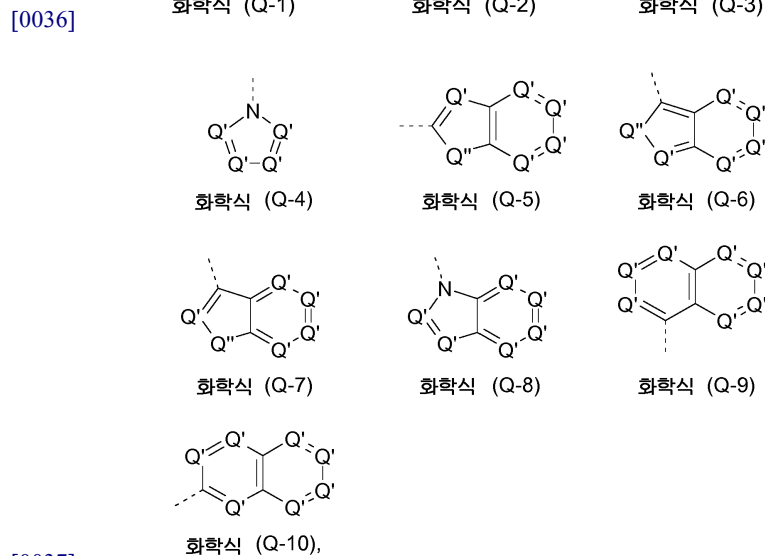
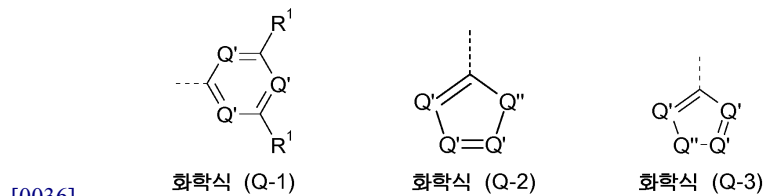
- [0026] 본 발명의 의미에서 헤테로아틸기는 5 내지 50 개, 바람직하게는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 함유하고, 이 중 적어도 하나는 헤테로원자이다. 헤테로원자는 바람직하게 N, O 및 S로부터 선택된다. 여기에서의 헤테로아틸기는 단순 헤테로방향족 고리, 예컨대 피리딘, 피리미딘, 또는 티오펜, 또는 축합 헤테로방향족 폴리사이클, 예컨대 퀴놀린 또는 카르바졸을 의미한다. 본 출원의 의미에서 축합 헤테로방향족 폴리사이클은 서로 축합된 2 개 이상의 단순 헤테로방향족 고리로 이루어진다.
- [0027] 각각의 경우에서 상기 언급된 라디칼로 치환될 수 있고 임의의 원하는 위치를 통해 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템에 연결될 수 있는, 아틸 또는 헤테로아틸 기는, 특히 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 피렌, 디히드로피렌, 크리센, 페릴렌, 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, 나프티이미다졸, 페난트리미다졸, 피리디미다졸, 피라진이미다졸, 퀴놀살린이미다졸, 옥사졸, 벤족사졸, 나프톡사졸, 안트록사졸, 페난트록사졸, 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 유도되는 기를 의미하는 것으로 이해된다.
- [0028] 본 발명의 의미에서의 방향족 고리 시스템은, 고리 시스템에 6 내지 50 개, 바람직하게는 6 내지 40 개의 탄소 원자를 함유하고, 방향족 고리 원자로서 임의의 헤테로원자를 포함하지 않는다. 그러므로, 본 출원의 의미에서의 방향족 고리 시스템은 임의의 헤테로아틸기를 포함하지 않는다. 본 발명의 의미에서의 방향족 고리 시스템은, 반드시 아틸기만을 함유할 필요가 있는 것은 아니고, 그 대신에, 추가로 복수의 아틸기가 하나 이상의 임의적으로 치환된 C, Si, N, O, 또는 S 원자와 같은 비-방향족 단위에 의해 연결될 수 있는 시스템을 의미하도록 의도된다. 비-방향족 단위는 상기 경우에 있어서, 바람직하게는 전체 방향족 고리 시스템의 H 이외의 원자의 총 수에 비해, 10 % 미만의, H 이외의 원자를 포함한다. 따라서, 예를 들어, 9,9'-스피로비플루오렌, 9,9'-디아틸플루오렌, 트리아틸아민, 디아틸 에테르, 스틸벤 등과 같은 시스템은 또한 본 발명의 의미에서 방향족 고리 시스템인 것으로 간주되고, 마찬가지로 둘 이상의 아틸 기가 예를 들어 선형 또는 환형 알킬, 알케닐 또는 알킬닐기, 또는 실릴 기에 의해 연결되는 시스템으로 간주된다. 또한, 2 개 이상의 아틸기가 단일 결합을 통해 서로 연결되는 시스템은 또한 본 발명의 의미에서 방향족 고리 시스템, 예컨대 예를 들어 비페닐 및 터페닐과 같은 시스템이도록 취해진다.
- [0029] 본 발명의 의미에서 헤테로방향족 고리 시스템은 5 내지 50 개, 바람직하게는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 함유하고, 방향족 고리 원자의 적어도 하나는 헤테로원자이다. 헤테로원자는 바람직하게는 N, O, 또는 S로부터 선택된다. 헤테로방향족 고리 시스템은, 방향족 고리 원자 중 하나로서 적어도 하나의 헤테로원자를 연이어야 한다는 차이점을 제외하고는, 상기 방향족 고리 시스템으로서 정의된다. 이는 이에 따라, 방향족 고리 원자로서 임의의 헤테로원자를 포함할 수 없는, 본 출원의 정의에 따른 방향족 고리 시스템과 상이하다.
- [0030] 6 내지 50 개, 바람직하게는 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 또는 5 내지 50 개, 바람직하게는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템은 특히, 상기 언급된 아틸 또는 헤테로아틸기로부터, 또는 비페닐, 터페닐, 쿼터페닐, 플루오렌, 스피로비플루오렌, 디히드로페난트렌, 디히드로피렌, 테트라히드로피렌, 인데노플루오렌, 트록센, 이소트록센, 스피로트록센, 스피로이소트록센, 및 인데노카르바졸로부터 유도되는 기이다.
- [0031] 본 발명의 목적을 위해, 또한 개별적 H 원자 또는 CH₂ 기가 라디칼의 정의 하에 상기 언급된 기에 의해 치환될 수 있는, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기, 또는 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알킬닐기는 바람직하게는, 라디칼 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, s-부틸, t-부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, s-펜틸, 시클로펜틸, 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 옥티닐을 의미하는 것으로 여겨진다.

[0032] 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알콕시 또는 티오알킬 기는 바람직하게는 메톡시, 트리플루오로메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, s-부톡시, t-부톡시, n-펜톡시, s-펜톡시, 2-메틸부톡시, n-헥속시, 시클로헥실옥시, n-헵톡시, 시클로헵틸옥시, n-옥틸옥시, 시클로옥틸옥시, 2-에틸헥실옥시, 펜타플루오로에톡시, 2,2,2-트리플루오로에톡시, 메틸티오, 에틸티오, n-프로필티오, i-프로필티오, n-부틸티오, i-부틸티오, s-부틸티오, t-부틸티오, n-펜틸티오, s-펜틸티오, n-헥실티오, 시클로헥실티오, n-헵틸티오, 시클로헵틸티오, n-옥틸티오, 시클로옥틸티오, 2-에틸헥실티오, 트리플루오로메틸티오, 펜타플루오로에틸티오, 2,2,2-트리플루오로에틸티오, 에테닐티오, 프로페닐티오, 부테닐티오, 펜테닐티오, 시클로펜테닐티오, 헥세닐티오, 시클로헥세닐티오, 헵테닐티오, 시클로헵테닐티오, 옥테닐티오, 시클로옥테닐티오, 에티닐티오, 프로피닐티오, 부티닐티오, 펜티닐티오, 헥시닐티오, 헵티닐티오 또는 옥티닐티오를 의미하는 것으로 이해된다.

[0033] 전자 수송기는 기술 분야에 잘 알려져 있으며 전자를 수송 및/또는 전도하는 화합물의 능력을 촉진시킨다.

[0034] 바람직하게, 전자 수송기는 피리딘, 피리미딘, 피라진, 피리다진, 트리아진, 예를 들어 1,2,4-트리아진, 1,3,5-트리아진, 벤즈이미다졸, 이미다졸, 퀴놀리네이트, 히드록시퀴놀리네이트, 옥사졸, 퀴나졸린, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 퀴녹살린, 락탐, 피라졸, 티아졸, 벤조티아졸로부터 선택되고, 피리딘, 피리미딘, 트리아진 및/또는 퀴나졸린이 바람직하다.

[0035] 전자 수송기가 화학식 (Q-1), (Q-2), (Q-4), (Q-4), (Q-5), (Q-6), (Q-7), (Q-8), (Q-9) 및/또는 (Q-10) 중 적어도 하나의 구조를 갖는 것이 특히 바람직할 수 있다.



[0037]

[0038] 식에서 점선 결합은 결합 위치를 표시하고,

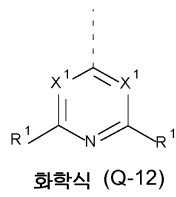
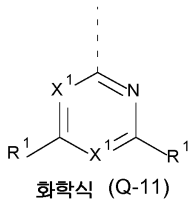
[0039] Q' 는 각각의 경우에, 동일하거나 상이하게, CR¹ 또는 N 을 나타내고, 그리고

[0040] Q'' 는 NR¹, O 또는 S 를 나타내고;

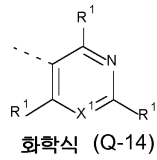
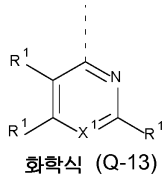
[0041] 여기서 적어도 하나의 Q' 는 N 이고,

[0042] R¹ 은 상기 정의된 바와 같다.

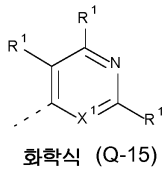
[0043] 전자 수송기가 화학식 (Q-11), (Q-12), (Q-13), (Q-14) 및/또는 (Q-15) 중 적어도 하나의 구조를 갖는 것이 특히 바람직할 수 있다.



[0044]



[0045]

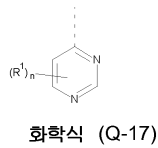
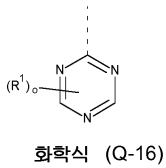


[0046]

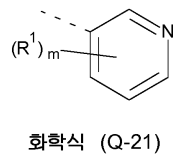
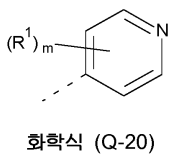
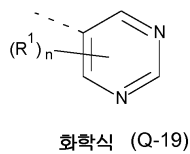
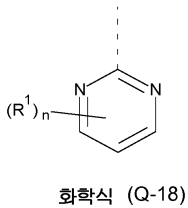
여기서 점선 결합은 결합 위치를 표시하고, X^1 은 N 또는 CR^1 이고 기호 R^1 은 상기에 주어진 의미를 가지며, 여기서 X^1 은 바람직하게는 질소 원자이다.

[0047]

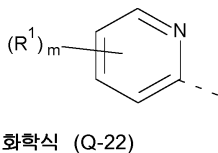
전자 수송기가 화학식 (Q-16), (Q-17), (Q-18), (Q-19), (Q-20), (Q-21) 및/또는 (Q-22) 중 적어도 하나의 구조를 갖는 것이 특히 바람직할 수 있으며,



[0048]



[0049]

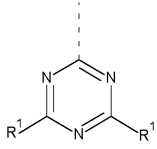


[0050]

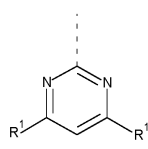
식에서 기호 R^1 은 상기에 주어진 의미를 가지며, 점선 결합은 부착 위치를 표시하고, m은 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1 또는 2이고, n은 0, 1, 2 또는 3, 바람직하게는 0, 1 또는 2 이고, o는 0, 1 또는 2, 바람직하게는 1 또는 2이다. 화학식 (Q-16), (Q-17), (Q-18) 및 (Q-19) 의 구조가 바람직하다.

[0051]

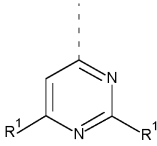
전자 수송기가 화학식 (Q-23), (Q-24) 및/또는 (Q-25) 중 적어도 하나의 구조를 갖는 것이 특히 바람직할 수 있으며,



화학식 (Q-23)



화학식 (Q-24)

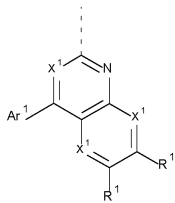


화학식 (Q-25)

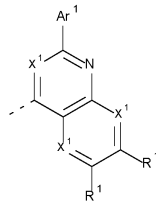
[0052]

[0053] 식에서 기호 R^1 은 상기 주어진 의미를 가지며, 점선 결합은 결합 위치를 표시한다.

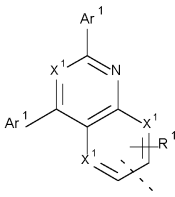
[0054] 전자 수송기가 화학식 (Q-26), (Q-27), (Q-28), (Q-29) 및/또는 (Q-30) 중 적어도 하나의 구조를 갖는 것이 특히 바람직할 수 있다.



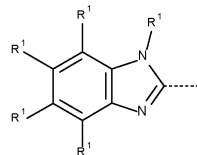
화학식 (Q-26)



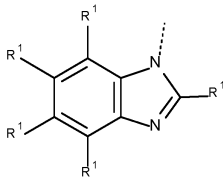
화학식 (Q-27)



화학식 (Q-28)



화학식 (Q-29)

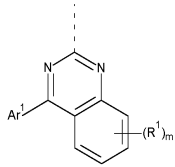


화학식 (Q-30)

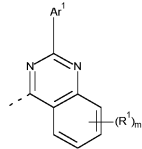
[0055]

[0056] 식에서 점선 결합은 결합 위치를 표시하고, X^1 은 N 또는 CR^1 이고, Ar^1 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R^1 에 의해 치환될 수 있고, 그리고 기호 R^1 은 상기 주어진 의미를 갖는다. 화학식 (Q-26), (Q-27) 및 (Q-28) 의 구조에서, 정확히 1 개의 X^1 은 바람직하게는 질소 원자를 나타낸다.

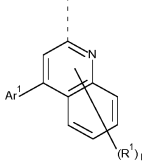
[0057] 전자 수송기가 화학식 (Q-31), (Q-32), (Q-33), (Q-34), (Q-35), (Q-36), (Q-37), (Q-38), (Q-39), (Q-40), (Q-41), (Q-42), (Q-43) 및/또는 (Q-44) 의 적어도 하나의 구조를 갖는 것이 특히 바람직할 수 있다.



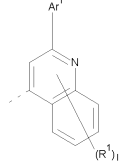
화학식 (Q-31)



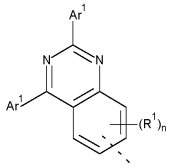
화학식 (Q-32)



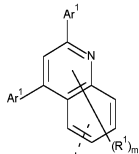
화학식 (Q-33)



화학식 (Q-34)

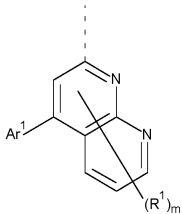


화학식 (Q-35)

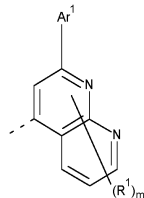


화학식 (Q-36)

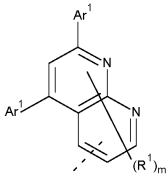
[0058]



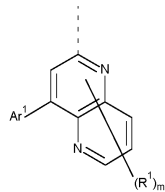
화학식 (Q-37)



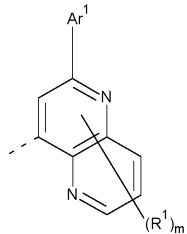
화학식 (Q-38)



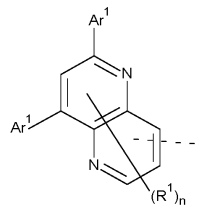
화학식 (Q-39)



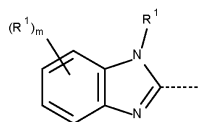
화학식 (Q-40)



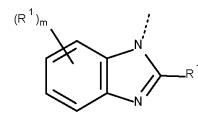
화학식 (Q-41)



화학식 (Q-42)



화학식 (Q-43)



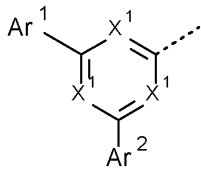
화학식 (Q-44)

[0059]

[0060]

식에서 기호 Ar^1 및 R^1 은 상기에 주어진 의미를 가지며, 점선 결합은 부착 위치를 표시하고, m 은 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1 또는 2 이고, n 은 0, 1, 2 또는 3, 바람직하게는 0 또는 1 이고, l 은 1, 2, 3, 4 또는 5, 바람직하게는 0, 1 또는 2 이다.

[0061] 보다 바람직하게는, 전자 수송기는 화학식 (B)에 따른 기이다



화학식 (B),

[0062]

식에서 변수 기에 다음이 적용되고:

[0063]

X^1 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하계, CR^1 및 N 으로부터 선택되고, 단 기 X^1 중 적어도 하나는 N이고, 바람직하게는 기 X^1 중 적어도 2 개 및 보다 바람직하게 모든 기 X^1 은 N이고;

[0064]

Ar^1 , Ar^2 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하계, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R^1 에 의해 치환될 수 있고;

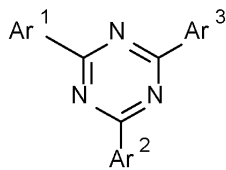
[0065]

[0066]

여기서 점선은 화학식 (A) 의 구조에 따른 기에 대한 결합을 나타내고 R^1 은 특히 화학식 (A) 와 관련하여 상기에 정의된 대로이다.

[0067]

특정 실시형태에서, 본 발명의 화합물은 화학식 (I) 의 화합물이고,



화학식 (I),

[0068]

식에서 변수 기에 다음이 적용되고:

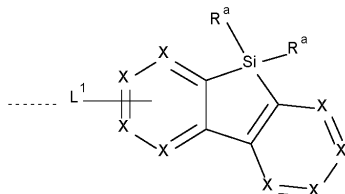
[0069]

Ar^1 , Ar^2 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하계, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R^1 에 의해 치환될 수 있고;

[0070]

[0071]

Ar^3 은 화학식 (A) 에 따른 기이고:



화학식 (A),

[0072]

식에서

[0073]

L^1 은 단일 결합 또는 6 내지 50 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 및 5 내지 50 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템로부터 선택된 기이고, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있고;

[0074]

[0075]

X 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하계, 기 L^1 이 그 탄소 원자에 결합되는 경우 CR^1 및 N 또는 C 원자로부터 선

택되고;

[0076] R^a 는 각각의 경우 동일하거나 상이하게, H, D, F, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시기, 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 시스템에서 선택되고; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^a 는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기 및 상기 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템은 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있고, 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기에서의 하나 이상의 CH_2 기는 $-R^2C=CR^2-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^2)_2$, $C=O$, $C=NR^2$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^2-$, NR^2 , $P(=O)(R^2)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수 있고;

[0077] R^1 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, $C(=O)R^2$, CN , $Si(R^2)_3$, $P(=O)(R^2)_2$, OR^2 , $S(=O)R^2$, $S(=O)_2R^2$, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시기, 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; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^1 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 여기서 상기 알킬, 알콕시, 알케닐, 및 알키닐기와, 상기 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템은 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있고, 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐기에서의 하나 이상의 CH_2 기는 각각의 경우에 $-R^2C=CR^2-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^2)_2$, $C=O$, $C=NR^2$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^2-$, NR^2 , $P(=O)(R^2)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수 있고;

[0078] R^2 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, $C(=O)R^3$, 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 알콕시기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시기, 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 시스템에서 선택되고; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^2 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기 및 상기 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템은 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^3 에 의해 치환될 수 있고, 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알키닐 기에서의 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 수 있고;

[0079] R^3 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, CN , 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알킬기, 6 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템으로부터 선택되고; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^3 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 여기서 상기 알킬기, 방향족 고리 시스템 및 헤테로방향족 고리 시스템은 F 및 CN 에 의해 치환될 수 있고; 그리고

[0080] 점선은 화학식 (I)에 따른 트리아진기에 대한 기 L^1 의 결합을 나타낸다.

[0081] 화학식 (A)에서 방향족 고리당, 기 X 로부터 선택된 2 개 이하의 기, 바람직하게는 기 X 로부터 선택된 하나 이하의 기가 N 인 것이 바람직하다. 또한, 화학식 (A)에서 기 X 로부터 선택된 2 개 이하의 기가 N 인 것이 바람직하다. X 가 CR^1 인 것이 보다 바람직하다.

[0082] 바람직하게는, 본 발명의 화합물, 바람직하게는 화학식 (I) 의 화합물은 상기 정의된 바와 같이 화학식 (A) 에 따른 정확히 하나의 기를 포함한다.

[0083] 바람직한 실시형태에 따르면, 본 발명의 화합물, 바람직하게는 화학식 (I) 의 화합물은 정확히 하나의 전자 수송기, 바람직하게는 정확히 하나의 트리아진기를 포함한다.

[0084] 보다 바람직하게는, 화학식 (I) 의 화합물은 상기 정의된 바와 같이 정확히 하나의 전자 수송기, 바람직하게는 정확히 하나의 트리아진기 및 정확히 하나의 기를 포함한다.

[0085] 특정 실시형태에서, 화학식 (B), 바람직하게는 화학식 (I)에서의 기 Ar^1 은 화학식 (B), 바람직하게는 화학식 (I)에서의 기 Ar^2 와 상이한 것이 바람직하다.

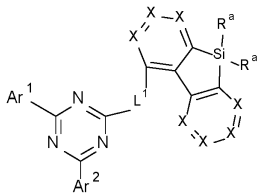
[0086] 바람직하게는, 화학식 (I)에서의 기 Ar^3 은 화학식 (I)에서의 Ar^1 및 화학식 (I)에서의 기 Ar^2 와 상이하다.

[0087] 바람직한 실시형태에서, 화학식 (B), 바람직하게는 화학식 (I)에서의 기 Ar^2 는 화학식 (B), 바람직하게는 화학식 (I)에서의 기 Ar^1 보다 많은 방향족 고리 원자를 포함한다.

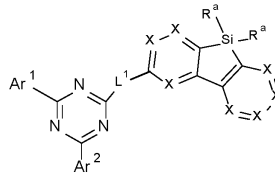
[0088] 바람직하게는, 화학식 (B), 바람직하게는 화학식 (I)에서의 기 Ar^1 은 적어도 2 개의 방향족 고리를 포함한다. 이들 방향족 고리는 축합 또는 비축합될 수 있으며, 바람직하게는 이들 고리는 비축합된다.

[0089] 바람직하게는, 화학식 (B), 바람직하게는 화학식 (I)에서의 기 Ar^2 는 적어도 2 개의 방향족 고리를 포함한다. 이들 방향족 고리는 축합 또는 비축합될 수 있으며, 바람직하게는 이들 고리는 비축합된다.

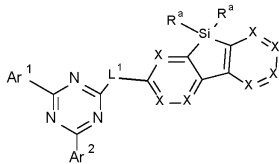
[0090] 특정 실시형태에서, 화학식 (I) 의 화합물은 바람직하게는 화학식 (I-1), (I-2), (I-3) 및 (I-4)중 하나를 따른다.



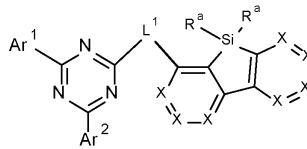
화학식 (I-1)



화학식 (I-2)



화학식 (I-3)



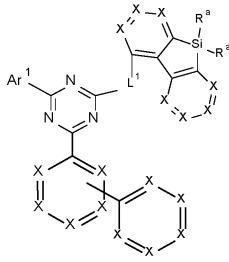
화학식 (I-4)

[0091]

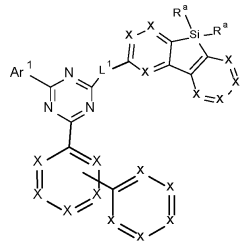
[0092] 식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A) 에서와 같이 정의되고, 여기서 화학식 (I-1), (I-3) 및 (I-4) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-1) 및 (I-4) 의 화합물이 특히 바람직하다.

[0093] 특정 실시형태에 따르면, 상술 및 후술되는 기 Ar^2 는 바람직하게는 페닐, 비페닐, 분지형 터페닐, 비분지형 터페닐, 분지형 쿼터페닐, 비분지형 쿼터페닐, 플루오레닐, 나프틸, 안트라세닐, 피리딜, 퀴놀리닐, 디벤조푸라닐, 디벤조티오페닐, 카르바졸릴, 플루오레닐-페닐레닐, 디벤조푸라닐-페닐레닐, 디벤조티오페닐-페닐레닐, 페난트레닐 및 트리페닐릴로부터 선택되고, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R^1 로 치환될 수 있고; 기 Ar^2 는 보다 바람직하게 비페닐, 분지형 터페닐, 비분지형 터페닐, 분지형 쿼터페닐, 비분지형 쿼터페닐, 플루오레닐, 나프틸, 안트라세닐, 피리딜, 퀴놀리닐, 디벤조푸라닐, 디벤조티오페닐, 카르바졸릴, 플루오레닐-페닐레닐, 디벤조푸라닐-페닐레닐, 디벤조티오페닐-페닐레닐, 페난트레닐 및 트리페닐릴로부터 선택되고, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R^1 로 치환될 수 있다.

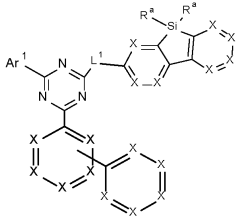
[0094] 특정 실시형태에서, 화학식 (I) 의 화합물은 바람직하게는 화학식 (I-5), (I-6), (I-7) 및 (I-8) 중 하나를 따른다.



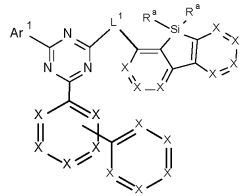
화학식 (I-5)



화학식 (I-6)



화학식 (I-7)



화학식 (I-8)

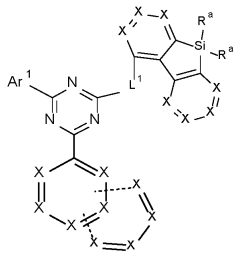
[0095]

[0096]

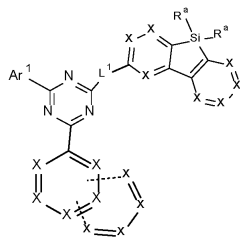
식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A) 에서와 같이 정의되고, 여기서 화학식 (I-5), (I-7) 및 (I-8) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-5) 및 (I-8) 의 화합물이 특히 바람직하다.

[0097]

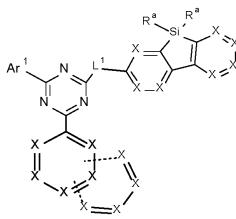
추가 실시형태에서, 화학식 (I) 의 화합물은 바람직하게는 화학식 (I-5a), (I-6a), (I-7a) 및 (I-8a) 중 하나를 따른다.



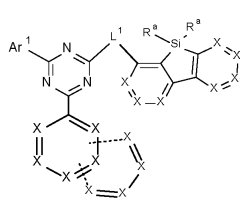
화학식 (I-5a)



화학식 (I-6a)



화학식 (I-7a)



화학식 (I-8a)

[0098]

[0099]

식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 화학식 (I) 및 (A) 에서와 같이 정의되고, 점선은 축합 고리를 형성하기 위해 방향족 고리에 대한 결합을 정의하며, 화학식 (I-5a), (I-7a) 및 (I-8a) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-5a) 및 (I-8a) 의 화합물이 특히 바람직하다.

[0100]

특정 실시형태에 따르면, 상술 및 후술되는 기 Ar¹ 은 페닐, 비페닐, 분지형 테페닐, 비분지형 테페닐, 분지형 쿼터페닐, 비분지형 쿼터페닐, 플루오레닐, 나프틸, 안트라세닐, 피리딜, 퀴놀리닐, 디벤조푸라닐, 디벤조티오펜, 카르바졸릴, 플루오레닐-페닐레닐, 디벤조푸라닐-페닐레닐, 디벤조티오펜-페닐레닐, 페난트레닐 및 트리페닐릴로부터 선택되고, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R¹ 에 의해 치환될 수 있다.

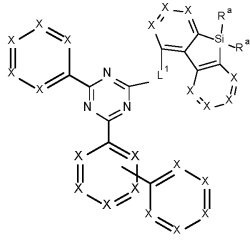
[0101]

특정 실시형태에 따르면, 상술 및 후술되는 기 Ar¹ 및 Ar² 중 하나는 적어도 하나의 질소 원자, 바람직하게는 정확히 하나의 질소 원자를 포함하고, 보다 바람직하게는 기 Ar¹ 및 Ar² 중 하나는 하나 이상의 라디칼 R¹ 에 의해 치환될 수 있는 피리딜 잔기를 나타낸다.

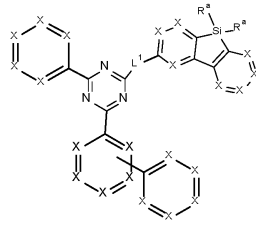
[0102]

본 발명의 일 실시형태에서, 화학식 (I) 의 화합물은 바람직하게는 화학식 (I-9), (I-10), (I-11) 및 (I-12) 중

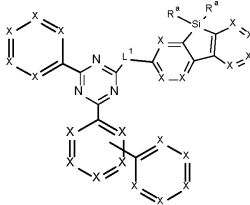
하나를 따른다.



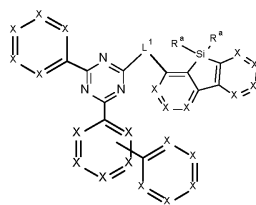
화학식 (I-9)



화학식 (I-10)



화학식 (I-11)



화학식 (I-12)

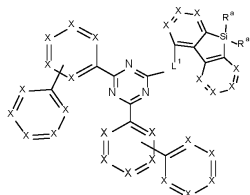
[0103]

[0104]

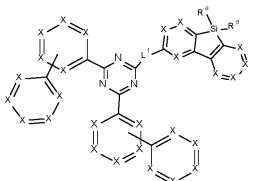
식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A) 에서와 같이 정의되고, 여기서 화학식 (I-9), (I-11) 및 (I-12) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-9) 및 (I-12) 의 화합물이 특히 바람직하다.

[0105]

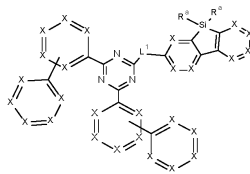
본 발명의 다른 실시형태에서, 화학식 (I) 의 화합물은 바람직하게는 화학식 (I-9a), (I-10a), (I-11a) 및 (I-12a) 중 하나를 따르고,



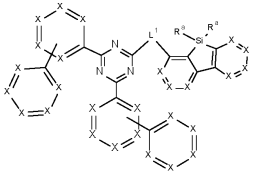
화학식 (I-9a)



화학식 (I-10a)



화학식 (I-11a)



화학식 (I-12a)

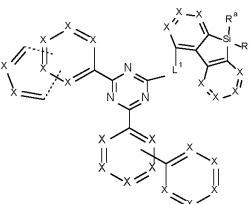
[0106]

[0107]

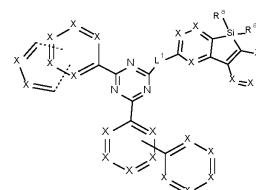
식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A) 에서와 같이 정의되고, 여기서 화학식 (I-9a), (I-11a) 및 (I-12a) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-9a) 및 (I-12a) 의 화합물이 특히 바람직하다.

[0108]

본 발명의 추가 실시형태에서, 화학식 (I) 의 화합물은 바람직하게는 화학식 (I-9b), (I-10b), (I-11b) 및 (I-12b) 중 하나를 따른다.

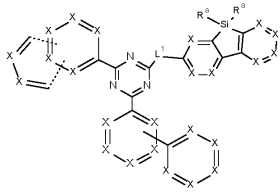


화학식 (I-9b)

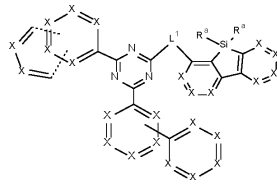


화학식 (I-10b)

[0109]



화학식 (I-11b)



화학식 (I-12b)

[0110]

[0111]

여기서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A)에서와 같이 정의되고, 점선은 축합 고리를 형성하기 위한 방향족 고리에 대한 결합을 정의하며, 여기서 화학식 (I-9b), (I-11b) 및 (I-12b)의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-9b) 및 (I-12b)의 화합물이 특히 바람직하다.

[0112]

본 발명의 추가 실시형태에 따르면, 화학식 (I), (I-1), (I-2), (I-3), (I-4), (I-5), (I-6), (I-7), (I-8), (I-5a), (I-6a), (I-7a), (I-8a), (I-9), (I-10), (I-11), (12), (I-9a), (I-10a), (I-11a), (12a), (I-9b), (I-10b), (I-11b) 및 (I-12b)의 구조의 트리아진기는 피리딘 또는 피리미딘기로 대체된다. 피리딘기를 포함하는 화합물의 측면에서 피리미딘기를 갖는 화합물이 바람직하다. 그러나, 트리아진기를 갖는 화학식 (I), (I-1), (I-2), (I-3), (I-4), (I-5), (I-6), (I-7), (I-8), (I-5a), (I-6a), (I-7a), (I-8a), (I-9), (I-10), (I-11), (12), (I-9a), (I-10a), (I-11a), (12a), (I-9b), (I-10b), (I-11b) 및 (I-12b)의 구조의 화합물이 가장 바람직하다.

[0113]

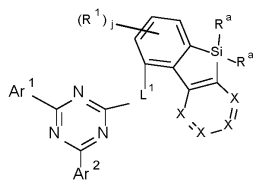
화학식 (I), (I-1), (I-2), (I-3), (I-4), (I-5), (I-6), (I-7), (I-8), (I-5a), (I-6a), (I-7a), (I-8a), (I-9), (I-10), (I-11), (12), (I-9a), (I-10a), (I-11a), (12a), (I-9b), (I-10b), (I-11b) 및 (I-12b)의 구조에서, 바람직하게는 최대 6 개, 바람직하게는 최대 4 개, 더욱 바람직하게는 최대 2 개의 기 X가 질소 원자를 나타낸다. 더욱 바람직하게는, 화학식 (I), (I-1), (I-2), (I-3), (I-4), (I-5), (I-6), (I-7), (I-8), (I-5a), (I-6a), (I-7a), (I-8a), (I-9), (I-10), (I-11), (12), (I-9a), (I-10a), (I-11a), (12a), (I-9b), (I-10b), (I-11b) 및 (I-12b)의 구조의 화합물은 최대 6 개, 바람직하게는 최대 4 개, 더욱 바람직하게는 최대 2 개의 기 X가 CH 및/또는 CD와 다른 기를 나타내는 것을 특징으로 한다.

[0114]

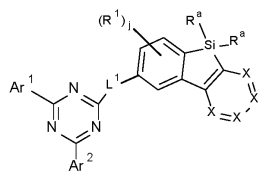
추가 실시형태에서, 화학식 (I), (I-1), (I-2), (I-3), (I-4), (I-5), (I-6), (I-7), (I-8), (I-5a), (I-6a), (I-7a), (I-8a), (I-9), (I-10), (I-11), (12), (I-9a), (I-10a), (I-11a), (12a), (I-9b), (I-10b), (I-11b) 및 (I-12b)의 바람직한 화합물에서, 기 X 중 적어도 하나는 질소 원자를 나타내고, 보다 바람직하게는 기 X 중 정확히 하나는 질소 원자를 나타낸다.

[0115]

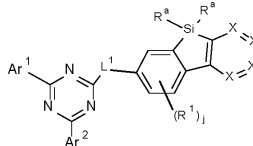
본 발명의 일 실시형태에서, 화학식 (I)의 화합물은 바람직하게는 화학식 (I-13), (I-14), (I-15) 및 (I-16)의 화합물을 따른다.



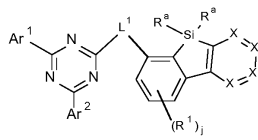
화학식 (I-13)



화학식 (I-14)



화학식 (I-15)



화학식 (I-16)

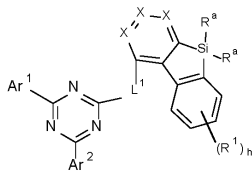
[0116]

[0117]

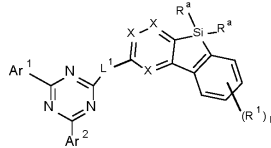
식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A)에서와 같이 정의되고, 인덱스 j는 0, 1, 2 또는 3, 바람직하게는 0, 1 또는 2이며, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이고, 여기서 화학식 (I-13), (I-15) 및 (I-16)의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-13) 및 (I-16)의 화합물이 특히 바람직하다.

[0118]

본 발명의 다른 실시형태에서, 화학식 (I)의 화합물은 바람직하게는 화학식 (I-17), (I-18), (I-19) 및 (I-20) 중 하나를 따른다.

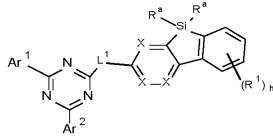


화학식 (I-17)

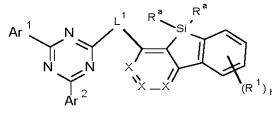


화학식 (I-18)

[0119]



화학식 (I-19)



화학식 (I-20)

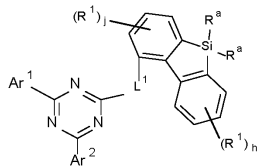
[0120]

[0121]

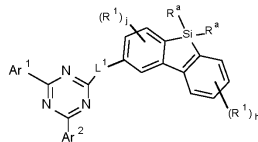
식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A) 에서와 같이 정의되고, 인덱스 h 는 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이고, 여기서 화학식 (I-17), (I-19) 및 (I-20) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-17) 및 (I-20) 의 화합물이 특히 바람직하다.

[0122]

본 발명의 추가 실시형태에서, 화학식 (I) 의 화합물은 바람직하게는 화학식 (I-21), (I-22), (I-23) 및 (I-24) 중 하나를 따른다.

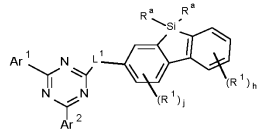


화학식 (I-21)

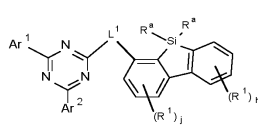


화학식 (I-22)

[0123]



화학식 (I-23)



화학식 (I-24)

[0124]

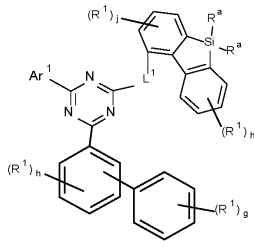
식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A) 에서와 같이 정의되고, 인덱스 j 는 0, 1, 2 또는 3, 바람직하게는 0, 1 또는 2 이며, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이고, 인덱스 h 는 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이며, 여기서 화학식 (I-21), (I-23) 및 (I-24) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-21) 및 (I-24) 의 화합물이 특히 바람직하다.

[0125]

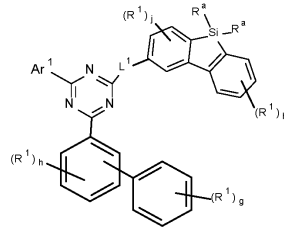
기 Ar¹ 및 Ar² 에 관한 바람직한 실시형태는 또한 화학식 (I-13) 내지 (I-24) 의 화합물에도 적용된다. 결과적으로, 다음 구조가 특히 바람직하다.

[0126]

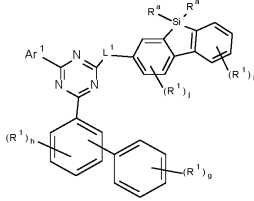
본 발명의 일 실시형태에서, 화학식 (I) 의 화합물은 바람직하게는 화학식 (I-25), (I-26), (I-27) 및 (I-28) 중 하나를 따른다.



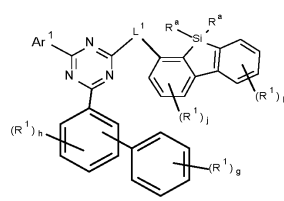
화학식 (I-25)



화학식 (I-26)



화학식 (I-27)



화학식 (I-28)

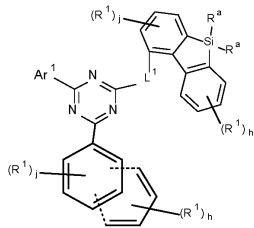
[0127]

[0128]

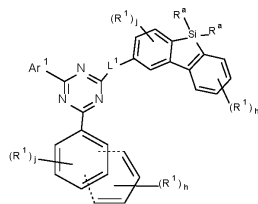
식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A) 에서와 같이 정의되고, 인덱스 j 는 0, 1, 2 또는 3, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이고, 인덱스 h 는 각각의 경우 동일하거나 상이하게 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이고 인덱스 g 는 0, 1, 2, 3, 4 또는 5, 바람직하게는 0, 1, 2 또는 3, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이며, 여기서 화학식 (I-25), (I-27) 및 (I-28) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-25) 및 (I-28) 의 화합물이 특히 바람직하다.

[0129]

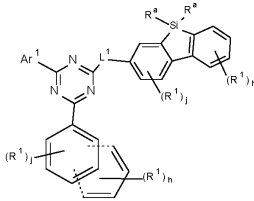
본 발명의 다른 실시형태에서, 화학식 (I) 의 화합물은 바람직하게는 화학식 (I-25a), (I-26a), (I-27a) 및 (I-28a) 중 하나를 따른다.



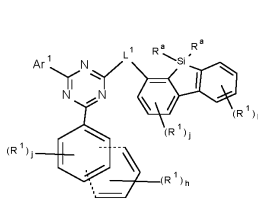
화학식 (I-25a)



화학식 (I-26a)



화학식 (I-27a)



화학식 (I-28a)

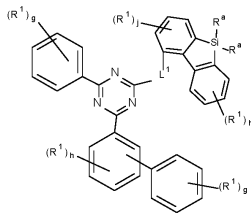
[0130]

[0131]

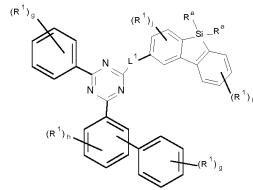
식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A) 에서와 같이 정의되고, 점선은 축합 고리를 형성하기 위한 방향족 고리에 대한 결합을 정의하고, 인덱스 j 는 0, 1, 2 또는 3, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1이고, 인덱스 h는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1이며, 여기서 화학식 (I-25a), (I-27a) 및 (I-28) 의 화합물이 바람직하고, 화학식 (I-25a) 및 (I-28a) 의 화합물이 특히 바람직하다.

[0132]

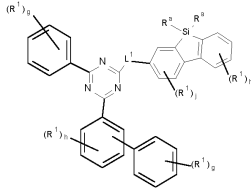
본 발명의 추가 실시형태에서, 화학식 (I) 의 화합물은 바람직하게는 화학식 (I-29), (I-30), (I-31) 및 (I-32) 중 하나를 따른다.



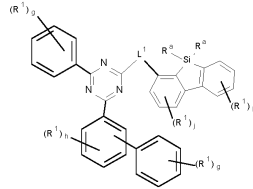
화학식 (I-29)



화학식 (I-30)



화학식 (I-31)



화학식 (I-32)

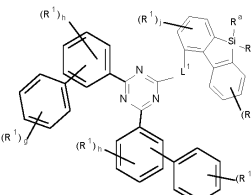
[0133]

[0134]

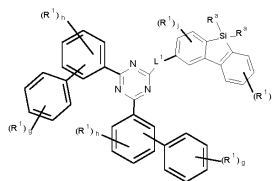
식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A) 에서와 같이 정의되고, 인덱스 j 는 0, 1, 2 또는 3, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이고, 인덱스 h 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이고 인덱스 g 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 0, 1, 2, 3, 4 또는 5, 바람직하게는 0, 1, 2 또는 3, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이며, 여기서 화학식 (I-29), (I-31) 및 (I-32) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-29) 및 (I-32) 의 화합물이 특히 바람직하다.

[0135]

본 발명의 일 실시형태에서, 화학식 (I) 의 화합물은 바람직하게는 화학식 (I-29a), (I-30a), (I-31a) 및 (I-32a) 중 하나를 따른다.

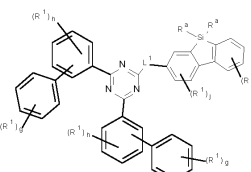


화학식 (I-29a)

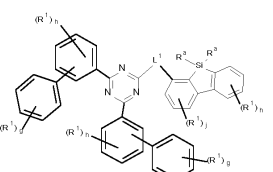


화학식 (I-30a)

[0136]



화학식 (I-31a)



화학식 (I-32a)

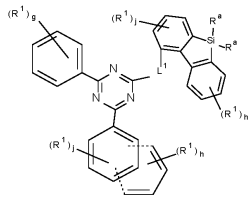
[0137]

[0138]

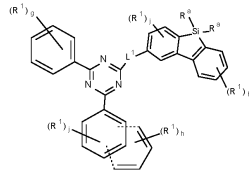
식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A) 에서와 같이 정의되고, 인덱스 j 는 0, 1, 2 또는 3, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이고, 인덱스 h 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이고 인덱스 g 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 0, 1, 2, 3, 4 또는 5, 바람직하게는 0, 1, 2 또는 3, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이며, 여기서 화학식 (I-29a), (I-31a) 및 (I-32a) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-29a) 및 (I-32a) 의 화합물이 특히 바람직하다.

[0139]

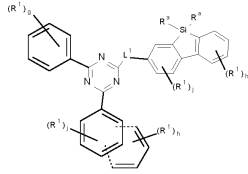
본 발명의 다른 실시형태에서, 화학식 (I) 의 화합물은 바람직하게는 화학식 (I-29b), (I-30b), (I-31b) 및 (I-32b) 중 하나를 따른다.



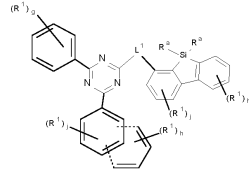
화학식 (I-29b)



화학식 (I-30b)



화학식 (I-31b)



화학식 (I-32b)

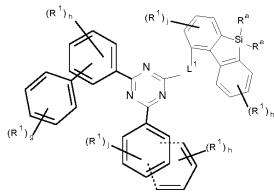
[0140]

[0141]

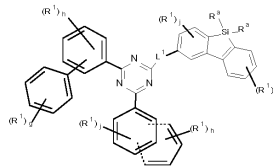
식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A) 에서와 같이 정의되고, 점선은 축합 고리를 형성하기 위한 방향족 고리에 대한 결합을 정의하고, 인덱스 j 는 0, 1, 2 또는 3, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이고, 인덱스 h 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이고 인덱스 g 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 0, 1, 2, 3, 4 또는 5, 바람직하게는 0, 1, 2 또는 3, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이며, 여기서 화학식 (I-29b), (I-31b) 및 (I-32b) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-29b) 및 (I-32b) 의 화합물이 특히 바람직하다.

[0142]

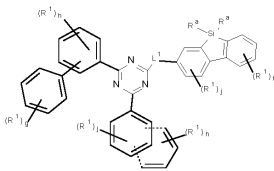
본 발명의 추가의 실시형태에서, 화학식 (I) 의 화합물은 바람직하게는 화학식 (I-29c), (I-30c), (I-31c) 및 (I-32c) 중 하나를 따르고,



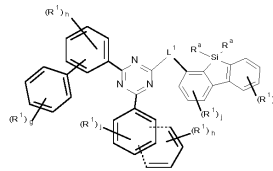
화학식 (I-29c)



화학식 (I-30c)



화학식 (I-31c)



화학식 (I-32c)

[0143]

[0144]

식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A) 에서와 같이 정의되고, 점선은 축합 고리를 형성하기 위한 방향족 고리에 대한 결합을 정의하고, 인덱스 j 는 0, 1, 2 또는 3, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이고, 인덱스 h 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이고 인덱스 g 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 0, 1, 2, 3, 4 또는 5, 바람직하게는 0, 1, 2 또는 3, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이며, 여기서 화학식 (I-29c), (I-31c) 및 (I-32c) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-29c) 및 (I-32c) 의 화합물이 특히 바람직하다.

[0145]

바람직하게는, 화학식 (I-13) 내지 (I-32b) 의 구조에서 인덱스 h, j 및 g 의 합은 최대 3 이고, 바람직하게는 최대 2 이고, 그리고 보다 바람직하게는 최대 1 이다.

[0146]

본 발명의 추가 실시형태에 따르면, 화학식 (I-13) 내지 (I-32), (I-13a) 내지 (I-32a), (I-29b) 내지 (I-32b), (I-29c) 내지 (I-32c) 의 구조의 트리아진기는 피리딘 또는 피리미딘기로 대체된다. 피리딘기를 포함하는 화합물의 측면에서 피리미딘기를 갖는 화합물이 바람직하다. 그러나, 트리아진기를 갖는 화학식 (I-13) 내지 (I-32), (I-13a) 내지 (I-32a), (I-29b) 내지 (I-32b), (I-29c) 내지 (I) 의 구조의 화합물이 가장 바람직하다.

[0147]

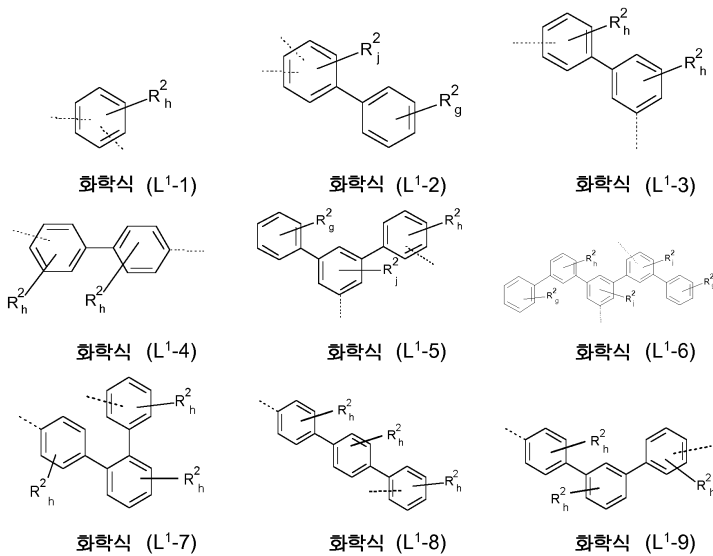
화학식 (I-1) 내지 (I-32c) 의 화합물과 관련하여, 잔기 Ar¹ 및/또는 Ar² 에서의 적어도 2 개의 방향족 및/또는

헤테로방향족 고리를 갖는 화합물이 바람직하다. 보다 바람직하게는, 적어도 2 개의 비축합 방향족 및/또는 헤테로방향족 고리를 갖는 화합물이 축합 고리를 갖는 화합물보다 바람직하다. 또한, 방향족 고리가 헤테로방향족 고리보다 바람직하다. 결과적으로, 화학식 (I-5) 내지 (I-8) 의 구조가 화학식 (I-5a) 내지 (I-8a) 의 구조보다 바람직하다. 또한, 화학식 (I-9) 내지 (I-12a) 의 구조가 화학식 (I-9b) 내지 (I-12b) 의 구조보다 바람직하다. 또한, 화학식 (I-25) 내지 (I-28) 의 구조가 화학식 (I-25a) 내지 (I-28a) 의 구조보다 바람직하다. 또한, 화학식 (I-29) 내지 (I-32a) 의 구조가 화학식 (I-29b) 내지 (I-32c) 의 구조보다 바람직하다.

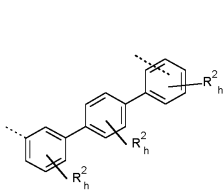
[0148] L^1 은 바람직하게는 일 결합 또는 페닐, 비페닐, 분지형 터페닐, 비분지형 터페닐, 분지형 쿼터페닐, 비분지형 쿼터페닐, 플루오레닐, 나프틸, 안트라세닐, 피리딜, 퀴놀리닐, 디벤조푸라닐, 디벤조티오펜, 카르바졸릴, 플루오레닐-페닐레닐, 디벤조푸라닐-페닐레닐, 디벤조티오펜-페닐레닐, 페난트레닐 및 트리페닐릴로부터 유도된 2 가기로부터 선택되고 (이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R^2 로 치환될 수 있음), 바람직하게는 일 결합 또는 각각이 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있는 페닐 또는 비페닐로부터 선택된 기이다. 특히 바람직하게는, L^1 은 일 결합 또는 파라-페닐렌, 메타-페닐렌, 오르토-페닐렌, 파라-비페닐렌, 메타-비페닐렌, 및 오르토-비페닐렌으로부터 선택된 2 가기이며, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있다.

[0149] 바람직하게는, 기 L^1 은, 예를 들어 화학식 (I), (I-1) 내지 (I-32), (A-1) 내지 (A-6) 및/또는 (I-37) 내지 (I-48) 에 도시된 바와 같이, 기 L^1 이 결합되는 2 개의 아릴 또는 헤테로아릴기와 연속 공액을 형성하다. 방향족 또는 헤테로방향족 시스템의 연속 공액은 인접한 방향족 또는 헤테로방향족 고리 사이에 직접 결합이 형성되자마자 형성된다. 예를 들어 S, N 또는 O 원자 또는 카르보닐 기를 통해, 발생하는 위에 언급된 공액 기들 사이의 추가 결합은 공액에 해롭지 않다.

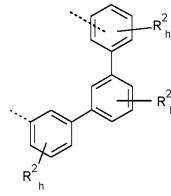
[0150] L^1 은 바람직하게는 일 결합 또는 화학식 (L¹-1) 내지 (L¹-108) 중 하나로부터 선택되는 기이다:



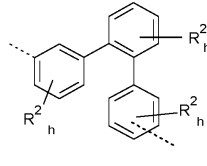
[0151]



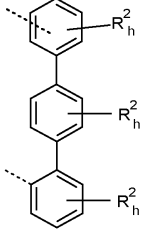
화학식 (L¹-10)



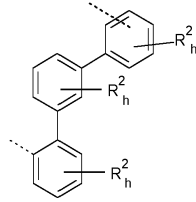
화학식 (L¹-11)



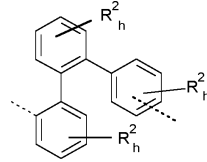
화학식 (L¹-12)



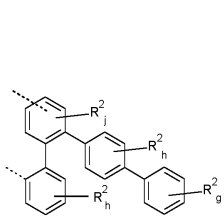
화학식 (L¹-13)



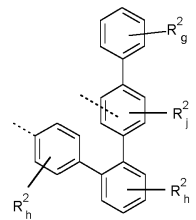
화학식 (L¹-14)



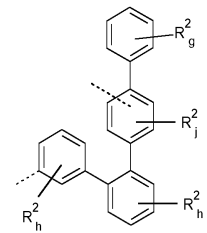
화학식 (L¹-15)



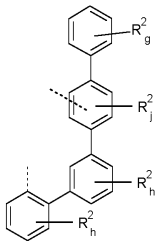
화학식 (L¹-16)



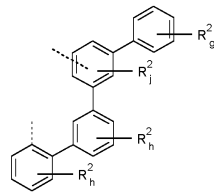
화학식 (L¹-17)



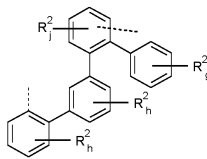
화학식 (L¹-18)



화학식 (L¹-19)

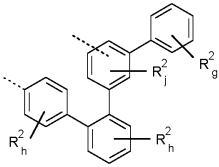


화학식 (L¹-20)

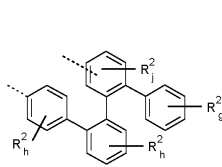


화학식 (L¹-21)

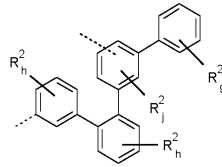
[0152]



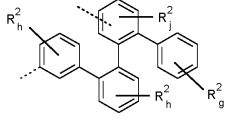
화학식 (L1-22)



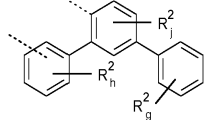
화학식 (L1-23)



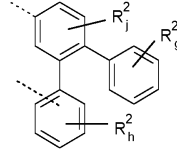
화학식 (L1-24)



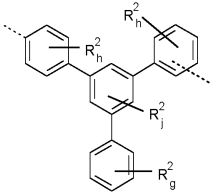
화학식 (L1-25)



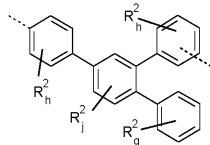
화학식 (L1-26)



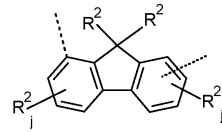
화학식 (L1-27)



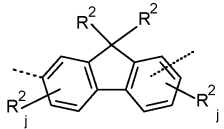
화학식 (L1-28)



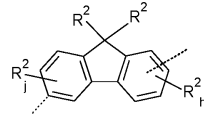
화학식 (L1-29)



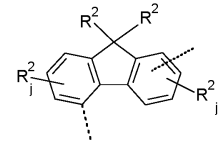
화학식 (L1-30)



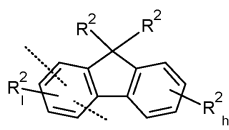
화학식 (L1-31)



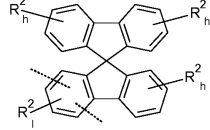
화학식 (L1-32)



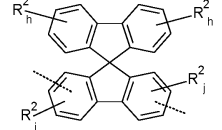
화학식 (L1-33)



화학식 (L1-34)

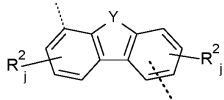


화학식 (L1-35)

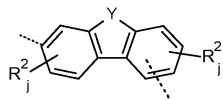


화학식 (L1-36)

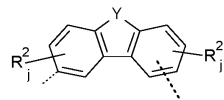
[0153]



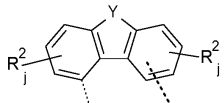
화학식 (L¹-37)



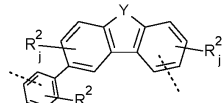
화학식 (L¹-38)



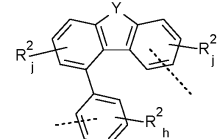
화학식 (L¹-39)



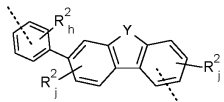
화학식 (L¹-40)



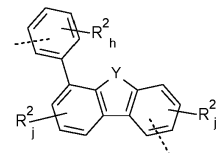
화학식 (L¹-41)



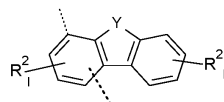
화학식 (L¹-42)



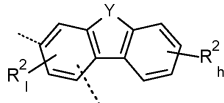
화학식 (L¹-43)



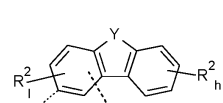
화학식 (L¹-44)



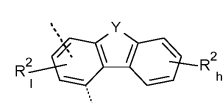
화학식 (L¹-45)



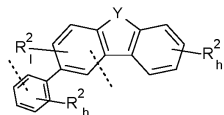
화학식 (L¹-46)



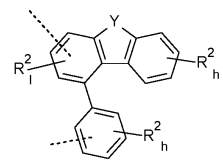
화학식 (L¹-47)



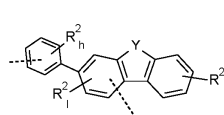
화학식 (L¹-48)



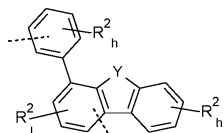
화학식 (L¹-49)



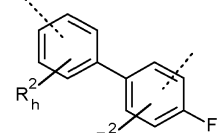
화학식 (L¹-50)



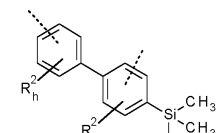
화학식 (L¹-51)



화학식 (L¹-52)

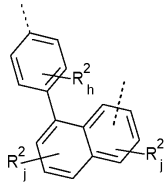


화학식 (L¹-53)

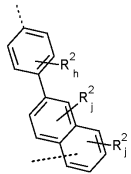


화학식 (L¹-54)

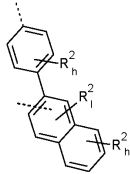
[0154]



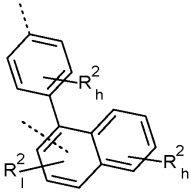
화학식 (L¹-55)



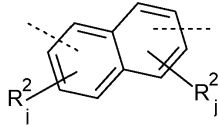
화학식 (L¹-56)



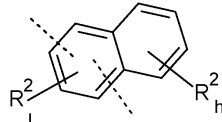
화학식 (L¹-57)



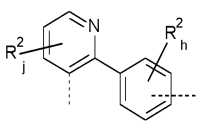
화학식 (L¹-58)



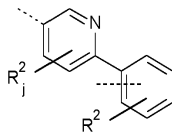
화학식 (L¹-59)



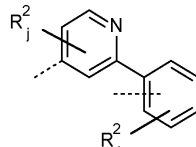
화학식 (L¹-60)



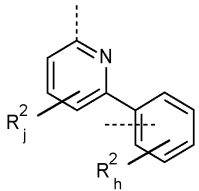
화학식 (L¹-61)



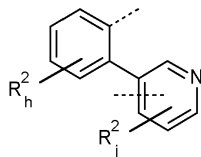
화학식 (L¹-62)



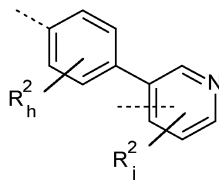
화학식 (L¹-63)



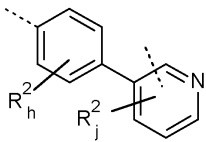
화학식 (L¹-64)



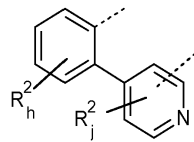
화학식 (L¹-65)



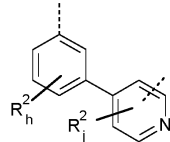
화학식 (L¹-66)



화학식 (L¹-67)

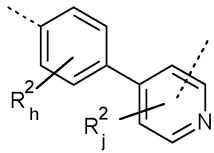


화학식 (L¹-68)

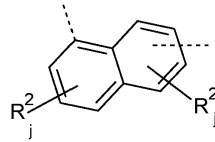


화학식 (L¹-69)

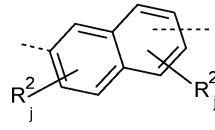
[0155]



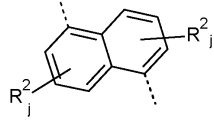
화학식 (L¹-70)



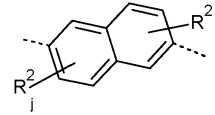
화학식 (L¹-71)



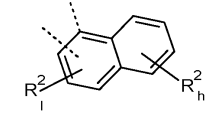
화학식 (L¹-72)



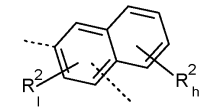
화학식 (L¹-73)



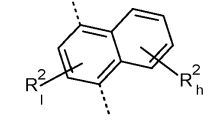
화학식 (L¹-74)



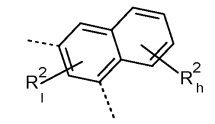
화학식 (L¹-75)



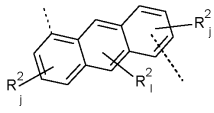
화학식 (L¹-76)



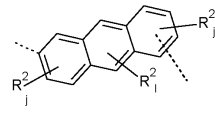
화학식 (L¹-77)



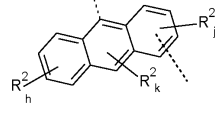
화학식 (L¹-78)



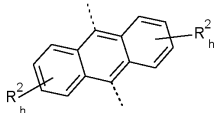
화학식 (L¹-79)



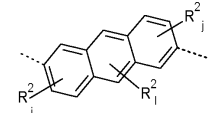
화학식 (L¹-80)



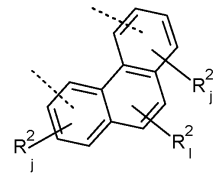
화학식 (L¹-81)



화학식 (L¹-82)

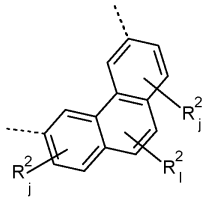


화학식 (L¹-83)

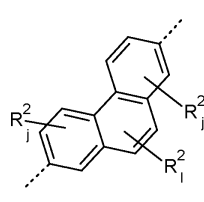


화학식 (L¹-84)

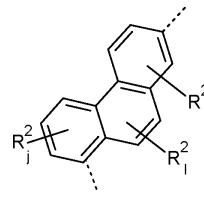
[0156]



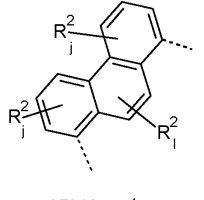
화학식 (L¹-85)



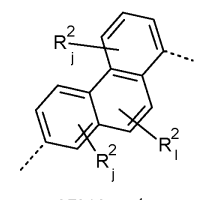
화학식 (L¹-86)



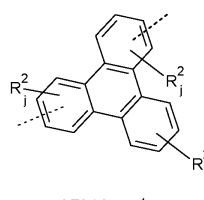
화학식 (L¹-87)



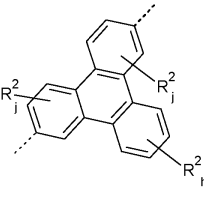
화학식 (L¹-88)



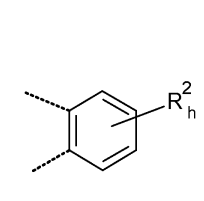
화학식 (L¹-89)



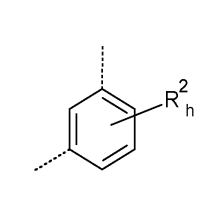
화학식 (L¹-90)



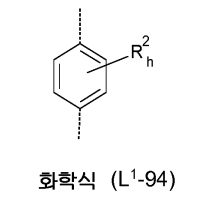
화학식 (L¹-91)



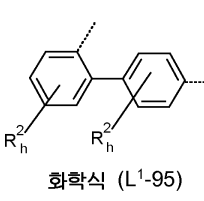
화학식 (L¹-92)



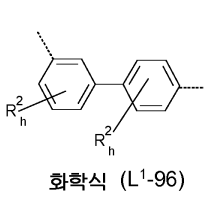
화학식 (L¹-93)



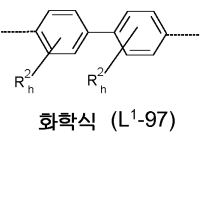
화학식 (L¹-94)



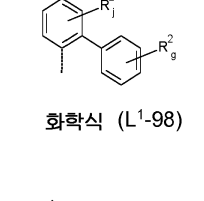
화학식 (L¹-95)



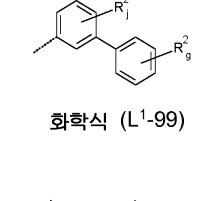
화학식 (L¹-96)



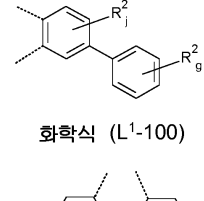
화학식 (L¹-97)



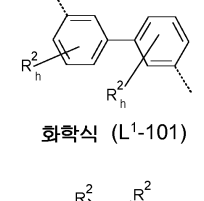
화학식 (L¹-98)



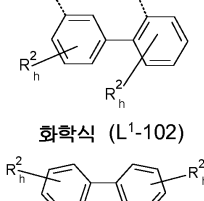
화학식 (L¹-99)



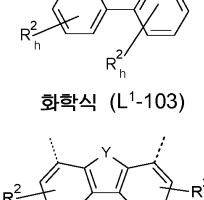
화학식 (L¹-100)



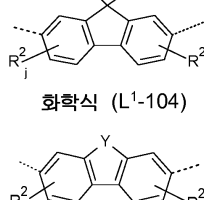
화학식 (L¹-101)



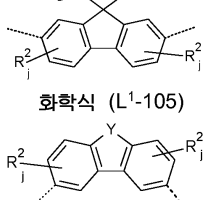
화학식 (L¹-102)



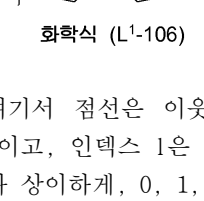
화학식 (L¹-103)



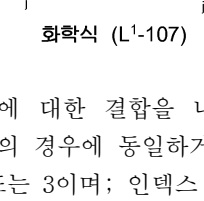
화학식 (L¹-104)



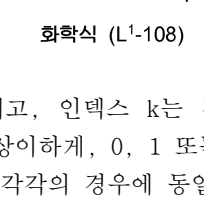
화학식 (L¹-105)



화학식 (L¹-106)



화학식 (L¹-107)



화학식 (L¹-108)

[0157]

[0158]

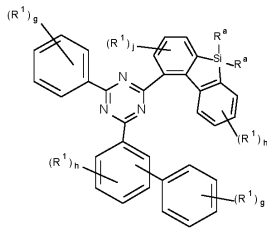
[0159]

여기서 점선은 이웃 기에 대한 결합을 나타내고, 인덱스 k는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 0 또는 1이고, 인덱스 l은 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 0, 1 또는 2이고, 인덱스 j는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 0, 1, 2 또는 3이며; 인덱스 h는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 0, 1, 2, 3 또는 4이고, 인덱스 g는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 0, 1, 2, 3, 4에서 5이고; 기호는 Y, O, S 또는 NR², 바람직하게는 O 또는 S를 나타내고; 그리고 기호 R²는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A)에서와 같이 정의된다.

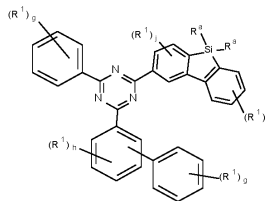
[0160] 바람직하게는, 화학식 (L¹-1) 내지 (L¹-108) 의 구조에서 인덱스 l, g, h 및 j 의 합은 최대 3, 바람직하게는 최대 2, 그리고 보다 바람직하게 최대 1 이다.

[0161] 바람직한 실시형태에 따르면, 상술 및 후술되는 기 L¹ 은 일 결합 또는 구조 (L¹-1) 내지 (L¹-78) 및 (L¹-92) 내지 (L¹-108) 로부터 선택되고, 바람직하게는 일 결합 또는 (L¹-1) 내지 (L¹-54) 및 (L¹-92) 내지 (L¹-103) 으로부터 선택되며, 가장 바람직하게는 일 결합이다.

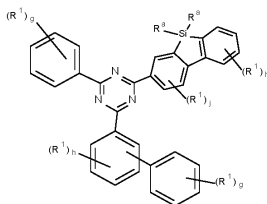
[0162] 본 발명의 매우 바람직한 실시형태에서, 화학식 (I) 의 화합물은 바람직하게는 화학식 (I-33), (I-34), (I-35) 및 (I-36) 중 하나를 따른다.



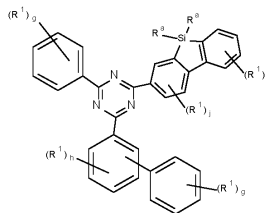
화학식 (I-33)



화학식 (I-34)



화학식 (I-35)



화학식 (I-36)

[0163]

[0164] 식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A) 에서와 같이 정의되고, 인덱스 j 는 0, 1, 2 또는 3, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이고, 인덱스 h 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이고, 인덱스 g 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 0, 1, 2, 3, 4 또는 5, 바람직하게는 0, 1, 2 또는 3, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이며, 여기서 화학식 (I-33), (I-35) 및 (I-36) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-33) 및 (I-36) 의 화합물이 특히 바람직하다.

[0165] 바람직하게는, 화학식 (I-33), (I-34), (I-35) 및 (I-36) 의 구조에서 인덱스 g, h 및 j 의 합은 최대 3 이고, 바람직하게는 최대 2 이고, 그리고 보다 바람직하게는 최대 1 이다.

[0166] 본 발명의 추가 실시형태에 따르면, 화학식 (I-33), (I-34), (I-35) 및 (I-36) 의 구조의 트리아진기는 피리딘 또는 피리미딘기로 대체된다. 피리딘기를 포함하는 화합물의 측면에서 피리미딘기를 갖는 화합물이 바람직하다. 그러나, 트리아진기를 갖는 화학식 (I-33), (I-34), (I-35) 및 (I-36) 의 구조의 화합물이 가장 바람직하다.

[0167] R^a 는 바람직하게는 각각의 경우에, F, 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 시스템에서 선택되고; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^a 는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 상기 알킬기 및 상기 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템은 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼 R^a 에 의해 치환될 수 있다. 두 개 이상의 라디칼 R^a 이 서로 연결되어 고리를 형성한다면, 이 고리는 바람직하게는 2 개의 라디칼 R^a 가 스피로 원자로서 결합된 규소 원자를 갖는 실라-시클로알킬 고리이고, 실라-시클로알킬 고리는 바람직하게는 실라-시클로프로필, 실라-시클로부틸, 실라-시클로펜틸, 및 실라-시클로헥실로부터, 가장 바람직하게는 실라-시클로펜틸 및 실라-시클로헥실로부터 선택된다. 대안적으로 및 동등하게 바람직하게는, 2 개 이상의 라디칼 R^a 가 서로 연결되어 고리를 형성한다면, 실라-스피로비플루오렌은 2 개의 라디칼 R^a 이 실라-스피로비플루오렌의 중심 규소 원자로서 결합된 규소 원자와 함께, 화학식

(I) 의 화합물로서 형성된다.

[0168] 더욱 바람직하게는, R^a 는 각각의 경우 동일하거나 상이하게, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기, 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템에서 선택되고, 상기 알킬기 및 상기 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템은 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있다.

가장 바람직하게는, R^a 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 페닐, 비페닐, 터페닐, 플루오레닐 및 나프틸로부터 선택되며, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있으나, 바람직하게는 비치환된다.

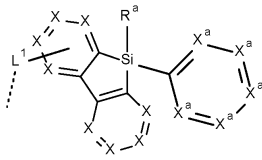
[0169] 추가 실시형태에 따르면, 잔기 R^a 중 적어도 하나는 페닐, 비페닐, 분지형 터페닐, 비분지형 터페닐, 분지형 퀴터페닐, 비분지형 퀴터페닐, 플루오레닐, 나프틸, 안트라세닐, 피리딜, 퀴놀리닐, 디벤조푸라닐, 디벤조티오펜닐, 카르바졸릴, 플루오레닐-페닐레닐, 디벤조푸라닐-페닐레닐, 디벤조티오펜닐-페닐레닐, 페난트레닐 및 트리페닐릴로부터 선택되고, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있다.

[0170] 다른 실시형태에서, 잔기 R^a 중 적어도 하나는 1 내지 12 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기, 3 내지 12 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시기, 2 내지 12 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알킬닐기로부터 선택되고, 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^a 는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 여기서 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알킬닐기는 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있고, 여기서 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알킬닐기에서의 하나 이상의 CH_2 기는 각각의 경우에 $-R^2C=CR^2-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^2)_2$, $C=O$, $C=NR^2$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^2-$, NR^2 , $P(=O)(R^2)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 에 의해 대체될 수 있고, 바람직하게 R^a 는 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 3 내지 12 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기로부터 선택되고, 보다 바람직하게는 R^a 는 메틸, 에틸, 프로필 또는 부틸로부터 선택된다.

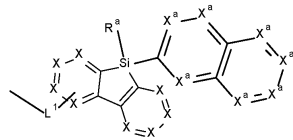
[0171] 또 다른 실시형태에서, 두 잔기 R^a 는 바람직하게는 동일하다.

[0172] 또한, 특정 실시형태에서, 두 잔기 R^a 는 바람직하게는 상이하고, 더욱 바람직하게 하나의 R^a 는 페닐, 비페닐, 분지형 터페닐, 비분지형 터페닐, 분지형 퀴터페닐, 비분지형 퀴터페닐, 플루오레닐, 나프틸, 안트라세닐, 피리딜, 퀴놀리닐, 디벤조푸라닐, 디벤조티오펜닐, 카르바졸릴, 플루오레닐-페닐레닐, 디벤조푸라닐-페닐레닐, 디벤조티오펜닐-페닐레닐, 페난트레닐 및 트리페닐릴로부터 선택되고, 이들 각각은 하나 이상의 라디칼 R^2 로 치환될 수 있고, 하나의 잔기는 1 내지 12 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시기, 3 내지 12 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시기, 2 내지 12 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알킬닐기로부터 선택되고, 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^a 는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 여기서 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알킬닐기는 각각의 경우에 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있고, 그리고 상기 알킬, 알콕시, 알케닐 및 알킬닐기에서의 하나 이상의 CH_2 기는 각각의 경우에 $-R^2C=CR^2-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^2)_2$, $C=O$, $C=NR^2$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^2-$, NR^2 , $P(=O)(R^2)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 로 대체될 수 있고, 바람직하게 R^a 는 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 3 내지 12 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기로부터 선택되고, 보다 바람직하게는 R^a 는 메틸, 에틸, 프로필 또는 부틸로부터 선택된다.

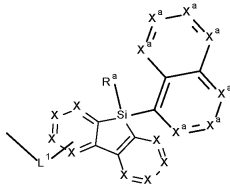
[0173] 본 발명의 일 실시형태에서, 화학식 (A) 의 구조는 화학식 (A-1), (A-2), (A-3), (A-4), (A-5) 및 (A-6) 중 하나를 따른다.



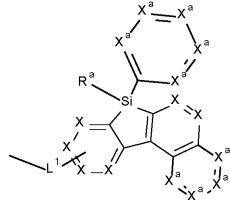
화학식 (A-1)



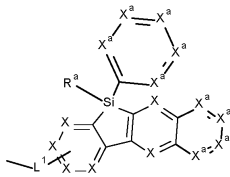
화학식 (A-2)



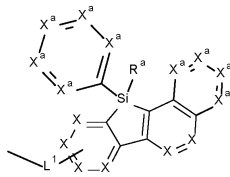
화학식 (A-3)



화학식 (A-4)



화학식 (A-5)



화학식 (A-6)

[0174]

[0175]

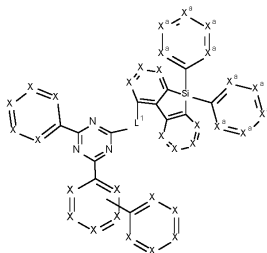
식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A)에서와 같이 정의된 바와 같고 X^a 는 N 또는 CR^2 이고, 바람직하게는 CR^2 이다.

[0176]

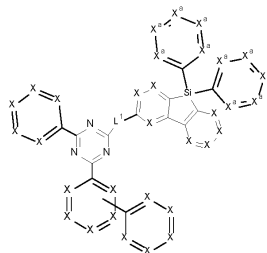
화학식 (A-1), (A-2), (A-3), (A-4), (A-5) 및 (A-6) 의 구조에서, 기 X 및 X^a 중 바람직하게는 최대 6 개, 바람직하게는 최대 4 개, 보다 바람직하게는 최대 2 개는 질소 원자를 나타낸다. 더욱 바람직하게는, 화학식 (A-1), (A-2), (A-3), (A-4), (A-5) 및 (A-6) 의 구조의 화합물은 기 X 및 X^a 중 최대 6 개, 바람직하게는 최대 4 개, 보다 바람직하게는 최대 2 개는 CH 및/또는 CD와 다른 기를 나타낸다.

[0177]

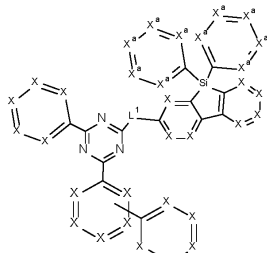
본 발명의 일 실시형태에서, 화학식 (I) 의 화합물은 바람직하게는 화학식 (I-41), (I-42), (I-43) 및 (I-44) 중 하나를 따른다.



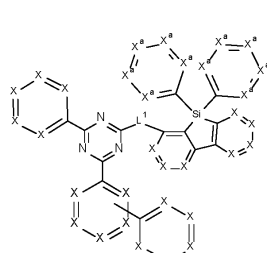
화학식 (I-41)



화학식 (I-42)



화학식 (I-43)



화학식 (I-44)

[0178]

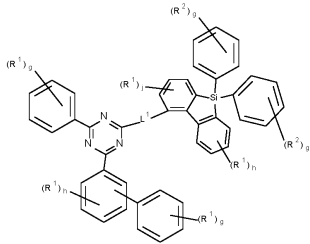
[0179]

식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 화학식 (I) 및 (A) 에서와 같이 정의되고, X^a 는 N 또는 CR^2 , 바람직하게는 CR^2 이고, 여기서 화학식 (I-41), (I-43) 및 (I-44) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-41) 및 (I-44)

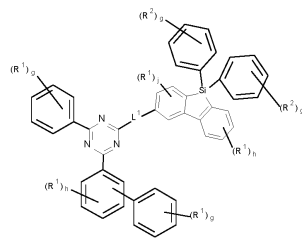
의 화합물이 특히 바람직하다.

[0180] 화학식 (I-41), (I-42), (I-43) 및 (I-44) 의 구조에서, 기 X 및 X^a 중 바람직하게는 최대 6 개, 바람직하게는 최대 4 개, 보다 바람직하게는 최대 2 개는 질소 원자를 나타낸다. 더욱 바람직하게는, 화학식 (I-41), (I-42), (I-43) 및 (I-44) 의 구조의 화합물은 기 X 및 X^a 중 최대 6 개, 바람직하게는 최대 4 개, 보다 바람직하게는 최대 2 개는 CH 및/또는 CD와 다른 기를 나타낸다.

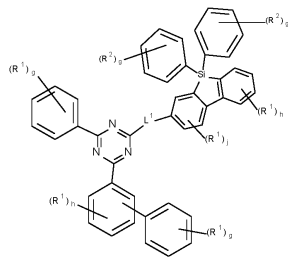
[0181] 본 발명의 다른 실시형태에서, 화학식 (I) 의 화합물은 바람직하게는 화학식 (I-45), (I-46), (I-47) 및 (I-48) 중 하나를 따른다.



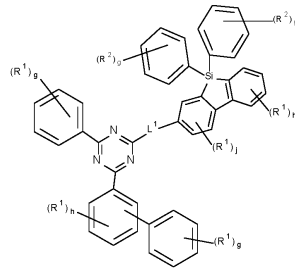
화학식 (I-45)



화학식 (I-46)



화학식 (I-47)

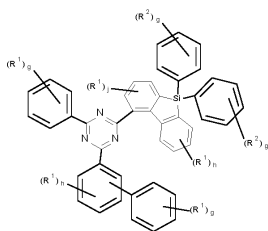


화학식 (I-48)

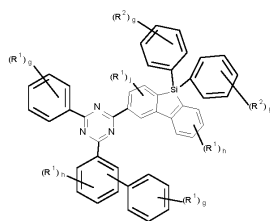
[0182]

[0183] 식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A) 에서와 같이 정의되고, 인덱스 j 는 0, 1, 2 또는 3, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이고, 인덱스 h 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이고, 인덱스 g 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 0, 1, 2, 3, 4 또는 5, 바람직하게는 0, 1, 2 또는 3, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이며, 여기서 화학식 (I-45), (I-47) 및 (I-48) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-45) 및 (I-48) 의 화합물이 특히 바람직하다.

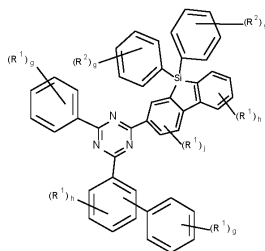
[0184] 본 발명의 추가의 실시형태에서, 화학식 (I) 의 화합물은 바람직하게는 화학식 (I-49), (I-50), (I-51) 및 (I-52) 중 하나를 따른다.



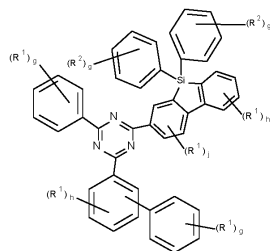
화학식 (I-49)



화학식 (I-50)



화학식 (I-51)



화학식 (I-52)

[0185]

[0186] 식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A) 에서와 같이 정의되고, 인덱스 j 는 0, 1, 2 또는 3, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이고, 인덱스 h 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1 또는 2, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이고, 인덱스 g 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게 0, 1, 2, 3, 4 또는 5, 바람직하게는 0, 1, 2 또는 3, 보다 바람직하게는 0 또는 1 이며, 여기서 화학식 (I-49), (I-51) 및 (I-52) 의 화합물이 바람직하고 화학식 (I-49) 및 (I-52) 의 화합물이 특히 바람직하다.

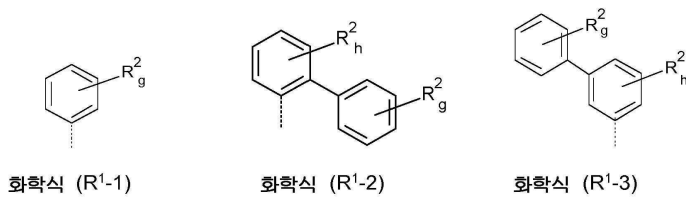
[0187] 바람직하게는, 화학식 (I-45) 내지 (I-52) 의 구조에서 인덱스 g , h 및 j 의 합은 최대 3, 바람직하게는 최대 2, 그리고 보다 바람직하게 최대 1 이다.

[0188] 본 발명의 추가 실시형태에 따르면, 화학식 (I-41), (I-42), (I-43), (I-44), (I-45), (I-46), (I-47), (I-48), (I-49), (I-50), (I-51) 및 (I-52)는 피리딘 또는 피리미딘기로 대체된다. 피리딘기를 포함하는 화합물의 측면에서 피리미딘기를 갖는 화합물이 바람직하다. 그러나, 트리아진기를 갖는 화학식 (I-41), (I-42), (I-43), (I-44), (I-45), (I-46), (I-47), (I-48), (I-49), (I-50), (I-51) 및 (I-52) 가 가장 바람직하다.

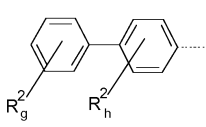
[0189] R^1 은 바람직하게는 각각의 경우 동일하거나 상이하게, H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템에서 선택되고; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^1 은 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 상기 알킬기 및 상기 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템은 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있다. 가장 바람직하게는, R^1 은 H 이다.

[0190] 추가 실시형태에서, R^1 은 각각의 경우 동일하거나 상이하게, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기, 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템에서 선택되고, 상기 알킬기 및 상기 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템은 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있다.

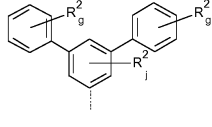
[0191] 화학식 (A), (A-1) 내지 (A-6), (I) 및/또는 (I-1) 내지 (I-52)에 따른 구조에서 하나 이상의 기 R^a 및/또는 R^1 은 바람직하게는 화학식 (R¹-1) 내지 (R¹-92)로부터 선택된 기로 표시된다.



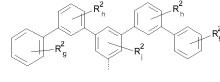
[0192]



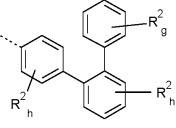
화학식 (R¹-4)



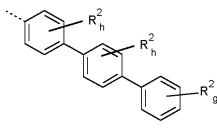
화학식 (R¹-5)



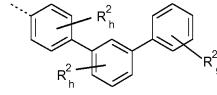
화학식 (R¹-6)



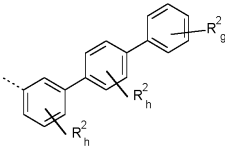
화학식 (R¹-7)



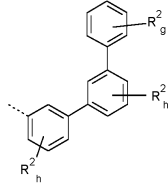
화학식 (R¹-8)



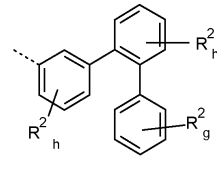
화학식 (R¹-9)



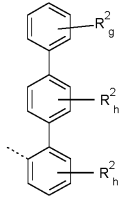
화학식 (R¹-10)



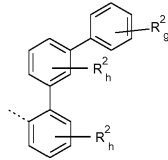
화학식 (R¹-11)



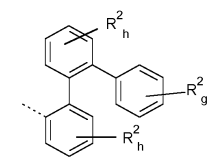
화학식 (R¹-12)



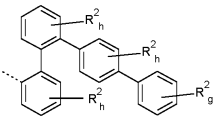
화학식 (R¹-13)



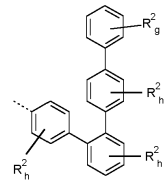
화학식 (R¹-14)



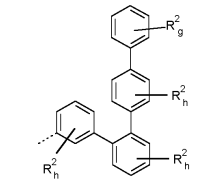
화학식 (R¹-15)



화학식 (R¹-16)

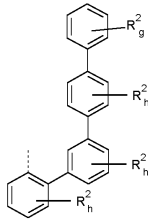


화학식 (R¹-17)

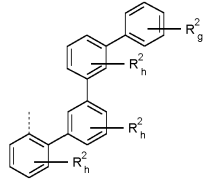


화학식 (R¹-18)

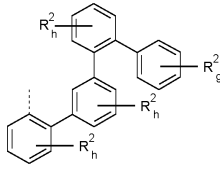
[0193]



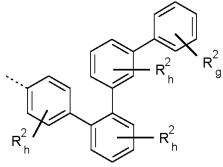
화학식 (R¹-19)



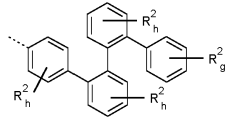
화학식 (R¹-20)



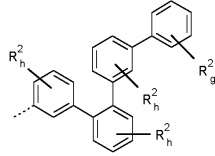
화학식 (R¹-21)



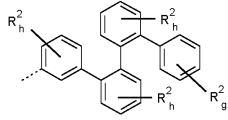
화학식 (R¹-22)



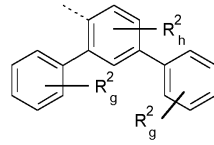
화학식 (R¹-23)



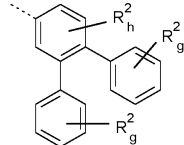
화학식 (R¹-24)



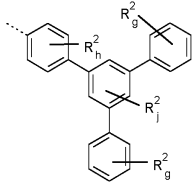
화학식 (R¹-25)



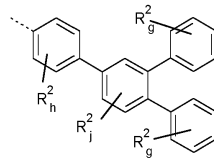
화학식 (R¹-26)



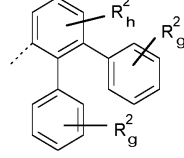
화학식 (R¹-27)



화학식 (R¹-28)

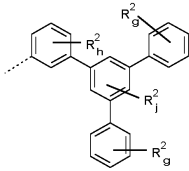


화학식 (R¹-29)

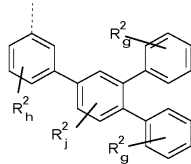


화학식 (R¹-30)

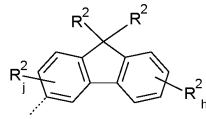
[0194]



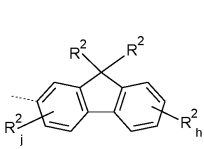
화학식 (R¹-31)



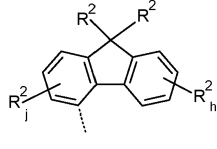
화학식 (R¹-32)



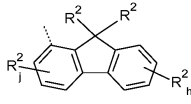
화학식 (R¹-33)



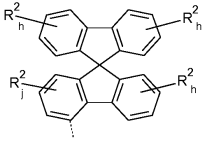
화학식 (R¹-34)



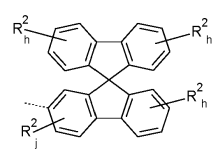
화학식 (R¹-35)



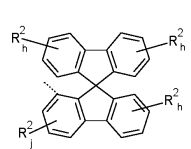
화학식 (R¹-36)



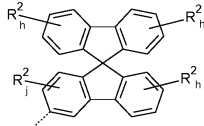
화학식 (R¹-37)



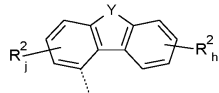
화학식 (R¹-38)



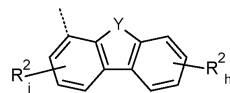
화학식 (R¹-39)



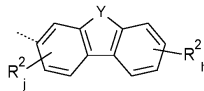
화학식 (R¹-40)



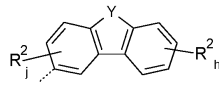
화학식 (R¹-41)



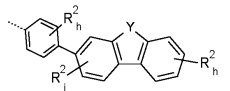
화학식 (R¹-42)



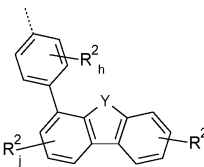
화학식 (R¹-43)



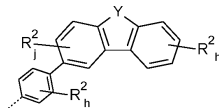
화학식 (R¹-44)



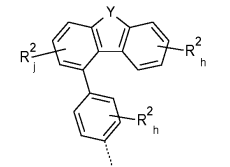
화학식 (R¹-45)



화학식 (R¹-46)

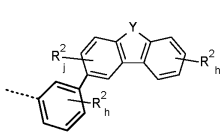


화학식 (R¹-47)

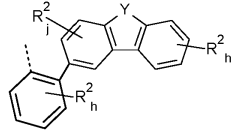


화학식 (R¹-48)

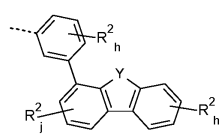
[0195]



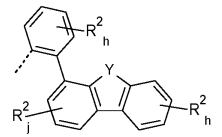
화학식 (R¹-49)



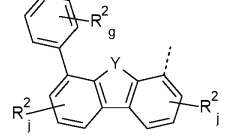
화학식 (R¹-50)



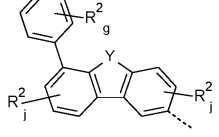
화학식 (R¹-51)



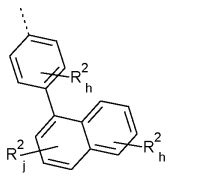
화학식 (R¹-52)



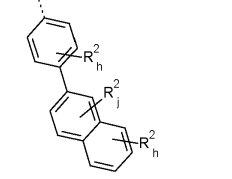
화학식 (R¹-53)



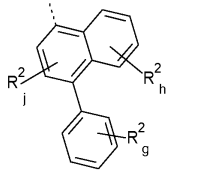
화학식 (R¹-54)



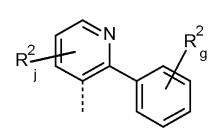
화학식 (R¹-55)



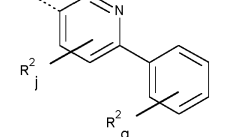
화학식 (R¹-56)



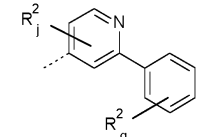
화학식 (R¹-57)



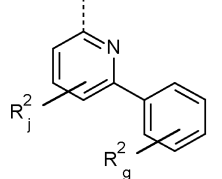
화학식 (R¹-58)



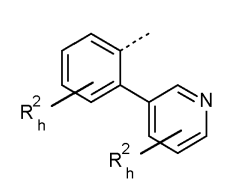
화학식 (R¹-59)



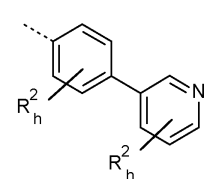
화학식 (R¹-60)



화학식 (R¹-61)

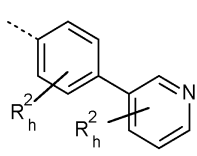


화학식 (R¹-62)

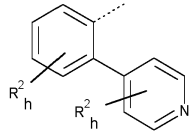


화학식 (R¹-63)

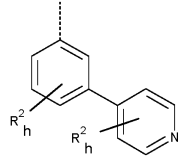
[0196]



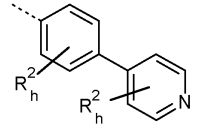
화학식 (R¹-64)



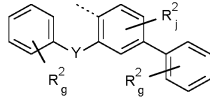
화학식 (R¹-65)



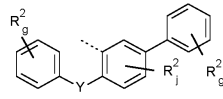
화학식 (R¹-66)



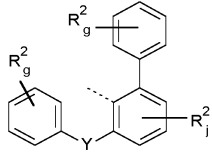
화학식 (R¹-67)



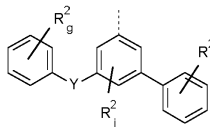
화학식 (R¹-68)



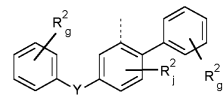
화학식 (R¹-69)



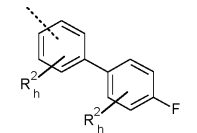
화학식 (R¹-70)



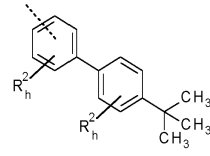
화학식 (R¹-71)



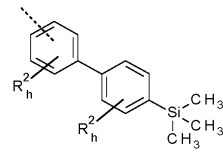
화학식 (R¹-72)



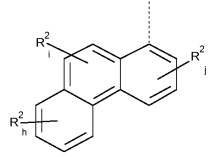
화학식 (R¹-73)



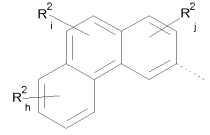
화학식 (R¹-74)



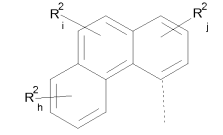
화학식 (R¹-75)



화학식 (R¹-76)

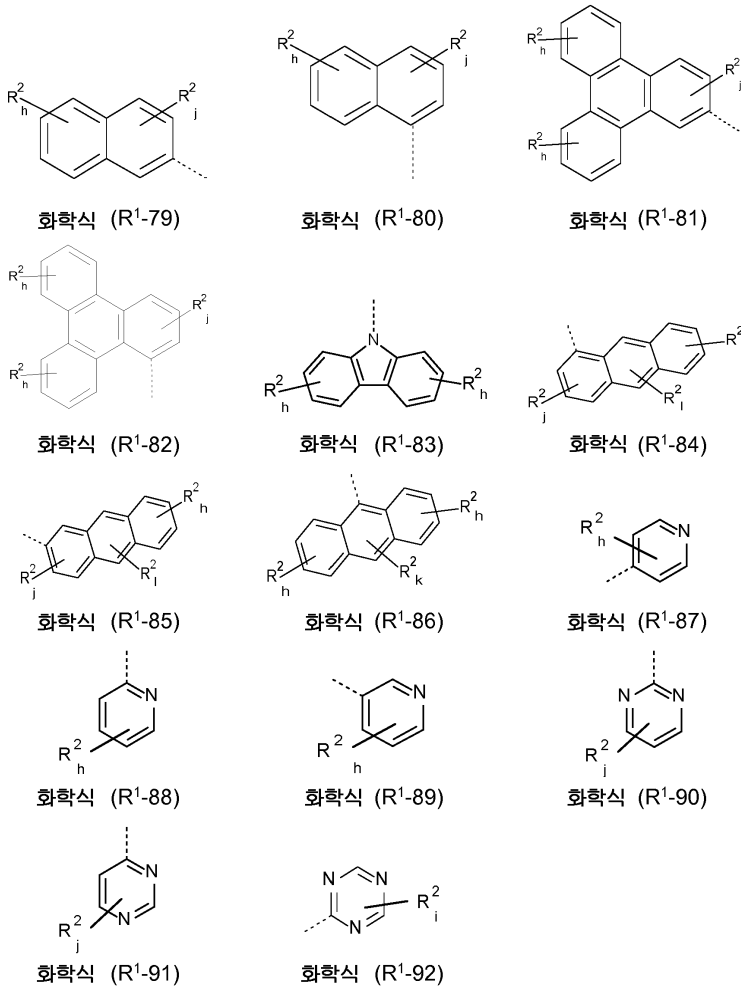


화학식 (R¹-77)



화학식 (R¹-78)

[0197]



[0198]

[0199] 식에서 기호는 하기 의미를 갖는다:

[0200] Y 는 O, S 또는 NR², 바람직하게는 O 또는 S 이고;

[0201] k 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 0 또는 1 이고;

[0202] i 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 0, 1 또는 2 이고;

[0203] j 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 0, 1, 2 또는 3 이고;

[0204] h 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 0, 1, 2, 3 또는 4 이고;

[0205] g 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, 0, 1, 2, 3 또는 5 이고;

[0206] 점선은 이웃 기에 대한 결합 부위를 나타내고; 그리고

[0207] R² 는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A) 에서와 같이 정의된다.

[0208] 바람직하게는, 화학식 (R¹-1) 내지 (R¹-92) 의 구조에서 인덱스 g, h, j, i 및 k 의 합은 최대 3, 바람직하게는 최대 2, 그리고 보다 바람직하게 최대 1 이다.

[0209] 상술 및 후술되는 기 Ar¹ 및 Ar² 는 치환기로서 잔기 R¹ 을 포함할 수 있다. 바람직하게는, 상술 및 후술되는 기 Ar¹ 및 Ar² 는 상기 언급되며 R² 대신에 잔기 R¹ 을 갖는 화학식 (R¹-1) 내지 (R¹-92) 의 구조로부터 유도된다. 화학식 (R¹-1) 내지 (R¹-92) 의 구조와 관련하여 언급된 선호도는 상술 및 후술되는 기 Ar¹ 및 Ar² 에 대해 적절한 방식으로 적용된다.

[0210] R² 는 바람직하게는 각각의 경우 동일하거나 상이하게, H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알

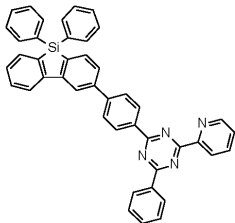
킬기, 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템에서 선택되고; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^2 는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 상기 알킬기 및 상기 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템은 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^3 에 의해 치환될 수 있지만, 비치환되는 것이 바람직하다.

[0211] R^2 는 바람직하게는 각각의 경우에 동일하거나 상이하게, H, D, F, CN, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기, 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬기, 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 및 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템에서 선택되고; 여기서 2 개 이상의 라디칼 R^2 는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고; 상기 알킬기 및 상기 방향족 및 헤테로방향족 고리 시스템은 각각의 경우 하나 이상의 라디칼 R^3 에 의해 치환될 수 있지만, 비치환되는 것이 바람직하다. 가장 바람직하게는, R^2 은 H 이다.

[0212] 상술 및 후술되는 바와 같이, 2 개 이상의 기 R^a , R^1 , R^2 , 및/또는 R^3 은 고리를 형성할 수 있다. 특히 R^1 , R^2 , R^3 , 및/또는 R^a 로부터 선택될 수 있는 2 개의 라디칼이 서로 고리를 형성하는 경우, 이는 단환 또는 다환의, 지방족, 헤테로지방족, 방향족 또는 헤테로방향족일 수 있다. 서로 고리 시스템을 형성하는 라디칼은 인접할 수 있다, 즉 이들 라디칼은 서로 직접 결합되거나 서로 이격될 수 있는 탄소 원자 또는 동일 탄소 원자에 부착된다.

[0213] 바람직한 실시형태에서, 2 개 이상의 기 R^a , R^1 , R^2 , 및/또는 R^3 은 특히 화학식 (I), (A), (I-1) 내지 (I-52), (A-1) 내지 (A-6), (L^1 -1) 내지 (L^1 -108) 및/또는 (R^1 -1) 내지 (R^1 -92) 의 구조에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리를 형성하지 않는다. 바람직한 실시형태에서, 2 개 이상의 기 R^a , R^1 , R^2 및/또는 R^3 은 특히 화학식 (I), (A), (I-1) 내지 (I-52), (A-1) 내지 (A-6), (L^1 -1) 내지 (L^1 -108) 및/또는 (R^1 -1) 내지 (R^1 -92) 의 구조에서 고리를 형성하지 않는다.

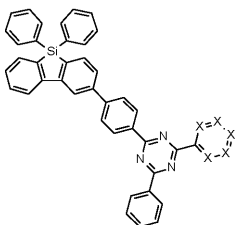
[0214] 특정 실시형태에 따르면, 화학식 (C) 의 화합물은 본 발명에서 제외된다:



화학식 (B)

[0215]

[0216] 추가의 바람직한 실시형태에 따르면, 화학식 (C-1) 의 화합물은 본 발명에서 제외된다:

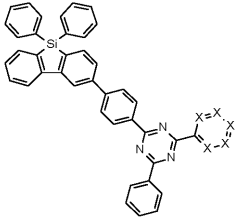


화학식 (C-1)

[0217]

[0218] 식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A)에서와 같이 정의되고 기 X 중 적어도 하나는 질소 원자를 나타낸다.

[0219] 추가의 바람직한 실시형태에 따르면, 화학식 (C-2) 의 화합물은 본 발명에서 제외된다:

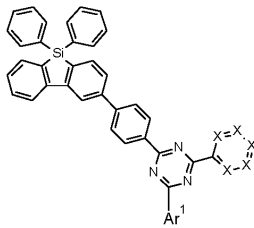


화학식 (C-2)

[0220]

식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A)에서와 같이 정의되고 기 X 중 적어도 하나는 질소 원자를 나타낸다.

[0222] 추가의 바람직한 실시형태에 따르면, 화학식 (C-3) 의 화합물은 본 발명에서 제외된다:

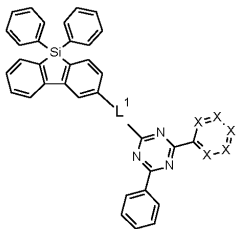


화학식 (C-3)

[0223]

식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A)에서와 같이 정의되고 기 X 중 적어도 하나는 질소 원자를 나타낸다.

[0225] 추가의 바람직한 실시형태에 따르면, 화학식 (C-4) 의 화합물은 본 발명에서 제외된다:

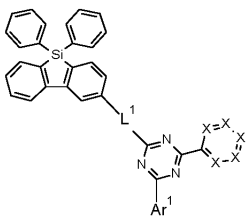


화학식 (C-4)

[0226]

식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A)에서와 같이 정의되고 기 X 중 적어도 하나는 질소 원자를 나타낸다.

[0228] 추가의 바람직한 실시형태에 따르면, 화학식 (C-5) 의 화합물은 본 발명에서 제외된다:



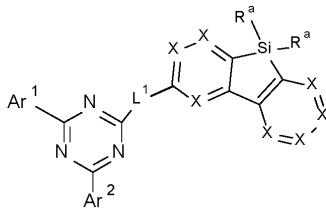
화학식 (C-5)

[0229]

식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A)에서와 같이 정의되고 기 X 중 적어도 하나는 질소 원자를 나타낸다.

[0231] 실라플루오렌기의 3 위치에 치환을 갖는 화합물보다 1-, 2-또는 4-위치에서 실라플루오렌기의 치환을 갖는 화학식 (I) 의 화합물이 바람직하다.

[0232] 추가의 바람직한 실시형태에 따르면, 화학식 (C-6) 의 화합물은 본 발명에서 제외된다:



화학식 (C-6)

[0233]

[0234] 식에서 발생하는 변수는 상기에서와 같이, 특히 화학식 (I) 및 (A)에서와 같이 정의된다.

[0235] 본 발명의 일 실시형태에서, 화학식 (I), (I-1), (I-2), (I-3), (I-4)에 따른 화합물이 바람직하고, 기 X 중 최대 6 개, 바람직하게는 최대 4 개, 더욱 바람직하게는 최대 2 개는 CH 및/또는 CD와 상이한 기를 나타내고, 여기서 R^a 는 동일하게 다음 특징 및/또는 잔기를 갖는다:

[0236]

Ar ¹ , Ar ²	R ^a	L ¹	바람직하게
R ¹⁻¹ 내지 R ¹⁻⁹²	R ¹⁻¹ 내지 R ¹⁻⁹²	결합 또는 L ¹⁻¹ 내지 L ¹⁻¹⁰⁸	L ¹⁻¹ 내지 L ¹⁻⁷⁰
R ¹⁻¹ 내지 R ¹⁻⁴	R ¹⁻¹ 내지 R ¹⁻⁹²	결합 또는 L ¹⁻¹ 내지 L ¹⁻⁶	결합
R ¹⁻¹ 내지 R ¹⁻⁹²	R ¹⁻¹ 내지 R ¹⁻⁴ , 바람직하게 R ¹⁻¹	결합 또는 L ¹⁻¹ 내지 L ¹⁻¹⁰⁸	L ¹⁻¹ 내지 L ¹⁻⁷⁰
R ¹⁻¹ 내지 R ¹⁻⁴	R ¹⁻¹ 내지 R ¹⁻⁴ , 바람직하게 R ¹⁻¹	결합 또는 L ¹⁻¹ 내지 L ¹⁻⁶	결합

[0237] 본 발명의 일 실시형태에서, 화학식 (I), (I-1), (I-2), (I-3), (I-4)에 따른 화합물이 바람직하고, 기 X 중 최대 6 개, 바람직하게는 최대 4 개, 더욱 바람직하게는 최대 2 개는 CH 및/또는 CD와 상이한 기를 나타내고, 여기서 R^a 는 동일하게 다음 특징 및/또는 잔기를 갖는다:

[0238]

Ar ¹ , Ar ²	R ^a (기타)	L ¹	바람직하게
R ¹⁻¹ 내지 R ¹⁻⁹²	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합 또는 L ¹⁻¹ 내지 L ¹⁻¹⁰⁸	L ¹⁻¹ 내지 L ¹⁻⁷⁰
R ¹⁻¹ 내지 R ¹⁻⁴	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합 또는 L ¹⁻¹ 내지 L ¹⁻⁶	결합
R ¹⁻¹ 내지 R ¹⁻⁹²	1 내지 4 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합 또는 L ¹⁻¹ 내지 L ¹⁻¹⁰⁸	L ¹⁻¹ 내지 L ¹⁻⁷⁰
R ¹⁻¹ 내지 R ¹⁻⁴	1 내지 4 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합 또는 L ¹⁻¹ 내지 L ¹⁻⁶	결합

[0239] 본 발명의 일 실시형태에서, 화학식 (I), (I-1), (I-2), (I-3), (I-4)에 따른 화합물이 바람직하고, 기 X 중 최대 4 개, 바람직하게는 최대 2 개, 더욱 바람직하게는 최대 1 개는 다음 특징 및/또는 잔기를 갖는 CH 및/또는 CD와 상이한 기를 나타낸다:

[0240]

Ar ¹	Ar ²	R ^a	L ¹
R ¹⁻¹ 내지 R ¹⁻⁹²	R ¹⁻¹ 내지 R ¹⁻⁹²	R ¹⁻¹ 내지 R ¹⁻⁹² 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합 또는 L ¹⁻¹ 내지 L ¹⁻¹⁰⁸
R ¹⁻¹	R ¹⁻¹	R ¹⁻¹ 내지 R ¹⁻⁹² 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합

R ¹ -1	R ¹ -1	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -1	R ¹ -1	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -2
R ¹ -1	R ¹ -1	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -3
R ¹ -1	R ¹ -1	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -4
R ¹ -2	R ¹ -1	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -2	R ¹ -1	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -2	R ¹ -1	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -2
R ¹ -2	R ¹ -1	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -3
R ¹ -2	R ¹ -1	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -4
R ¹ -3	R ¹ -1	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -3	R ¹ -1	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -3	R ¹ -1	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -2
R ¹ -3	R ¹ -1	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -3
R ¹ -3	R ¹ -1	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -4
R ¹ -4	R ¹ -1	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -4	R ¹ -1	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -4	R ¹ -1	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -2

[0241]

R ¹ -4	R ¹ -1	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -3
R ¹ -4	R ¹ -1	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -4
R ¹ -1	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -1	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -1	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -2
R ¹ -1	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -3
R ¹ -1	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -4
R ¹ -2	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -2	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -2	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -2
R ¹ -2	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -3
R ¹ -2	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -4
R ¹ -3	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -3	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -3	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -2
R ¹ -3	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -3
R ¹ -3	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -4

[0242]

R ¹ -4	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -4	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -4	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -2
R ¹ -4	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -3
R ¹ -4	R ¹ -87	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -4
R ¹ -1	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -1	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -1	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -2
R ¹ -1	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -3
R ¹ -1	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -4
R ¹ -2	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -2	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -2	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -2
R ¹ -2	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -3
R ¹ -2	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -4
R ¹ -3	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -3	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1

[0243]

R ¹ -3	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -2
R ¹ -3	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -3
R ¹ -3	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -4
R ¹ -4	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -4	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -4	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -2
R ¹ -4	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -3
R ¹ -4	R ¹ -88	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -4
R ¹ -1	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -1	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -1	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -2
R ¹ -1	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -3
R ¹ -1	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -4
R ¹ -2	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -2	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -2	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -2
R ¹ -2	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -3

[0244]

R ¹ -2	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -4
R ¹ -3	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -3	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -3	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -2
R ¹ -3	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -3
R ¹ -3	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -4
R ¹ -4	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -4	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -4	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -2
R ¹ -4	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -3
R ¹ -4	R ¹ -89	R ¹ -1 내지 R ¹ -92 또는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -4
R ¹ -1	R ¹ -1	R ¹ -1	결합 또는 L ¹ -1 내지 L ¹ -108
R ¹ -1	R ¹ -1	양자 모두 R ¹ -1	결합 또는 L ¹ -1 내지 L ¹ -108
R ¹ -1	R ¹ -1	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합 또는 L ¹ -1 내지 L ¹ -108
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -1	R ¹ -1	결합
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -1	R ¹ -1	L ¹ -1
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -1	R ¹ -1	L ¹ -92
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -1	R ¹ -1	L ¹ -93
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -1	R ¹ -1	L ¹ -94
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -87	R ¹ -1	결합
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -87	R ¹ -1	L ¹ -1
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -87	R ¹ -1	L ¹ -92
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -87	R ¹ -1	L ¹ -93
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -87	R ¹ -1	L ¹ -94
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -88	R ¹ -1	결합
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -88	R ¹ -1	L ¹ -1

[0245]

R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -88	R ¹ -1	L ¹ -92
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -88	R ¹ -1	L ¹ -93
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -88	R ¹ -1	L ¹ -94
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -89	R ¹ -1	결합
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -89	R ¹ -1	L ¹ -1
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -89	R ¹ -1	L ¹ -92
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -89	R ¹ -1	L ¹ -93
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -89	R ¹ -1	L ¹ -94
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -1	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -1	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -1	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -92
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -1	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -93
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -1	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -94
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -87	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -87	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -87	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -92
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -87	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -93
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -87	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -94
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -88	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -88	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -88	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -92
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -88	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -93
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -88	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -94
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -89	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -89	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -89	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -92
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -89	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -93
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -89	1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -94
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -1	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합

[0246]

R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -1	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -1	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -92
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -1	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -93
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -1	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -94
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -87	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -87	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -87	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -92
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -87	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -93
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -87	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -94
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -88	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -88	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -88	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -92
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -88	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -93
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -88	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -94
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -89	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	결합
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -89	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -1
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -89	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -92

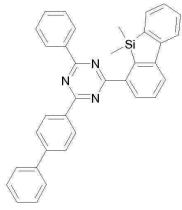
[0247]

R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -89	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -93
R ¹ -1 내지 R ¹ -92	R ¹ -89	하나는 R ¹ -1 이고, 다른 하나는 1 내지 20 개의 C-원자를 갖는 알킬기	L ¹ -94

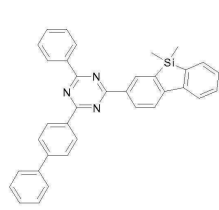
[0248]

[0249]

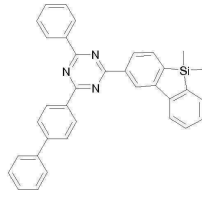
화학식 (I) 에 따른 바람직한 화합물은 하기에 도시된다:



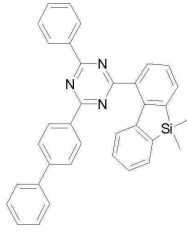
화학식 1



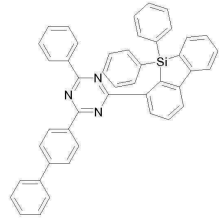
화학식 2



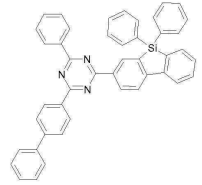
화학식 3



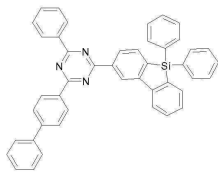
화학식 4



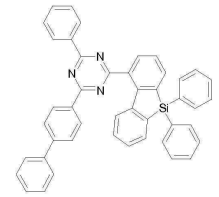
화학식 5



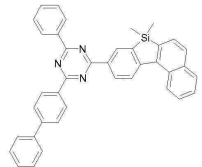
화학식 6



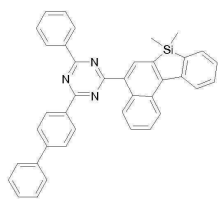
화학식 7



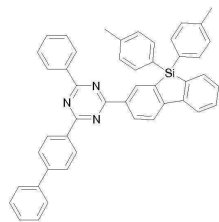
화학식 8



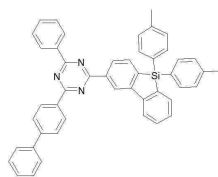
화학식 9



화학식 10

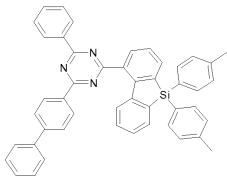


화학식 11

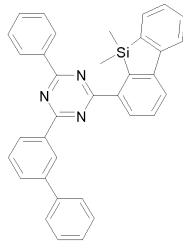


화학식 12

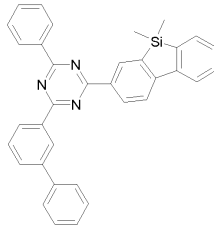
[0250]



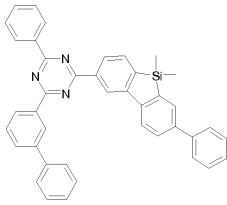
화학식 13



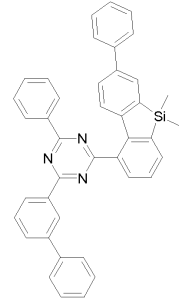
화학식 14



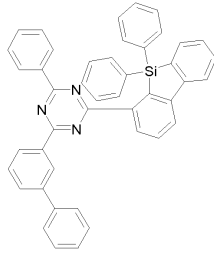
화학식 15



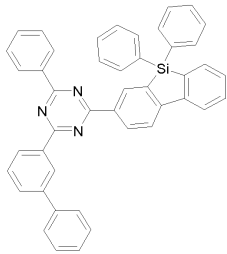
화학식 16



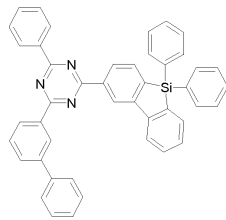
화학식 17



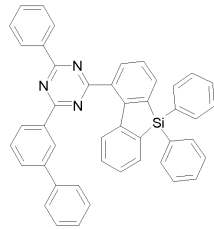
화학식 18



화학식 19

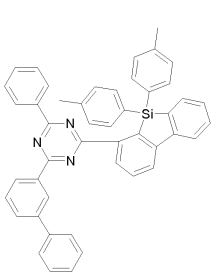


화학식 20

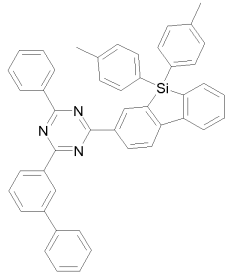


화학식 21

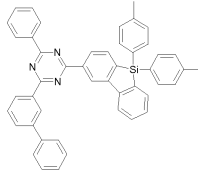
[0251]



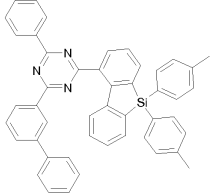
화학식 22



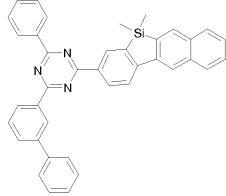
화학식 23



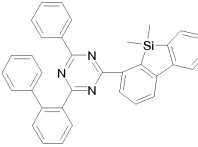
화학식 24



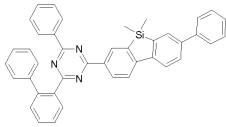
화학식 25



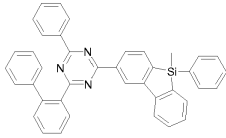
화학식 26



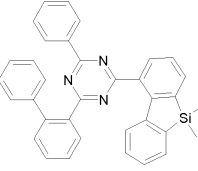
화학식 27



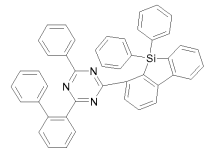
화학식 28



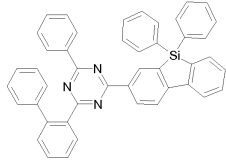
화학식 29



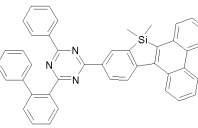
화학식 30



화학식 31

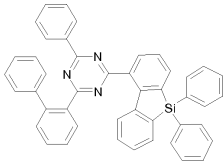


화학식 32

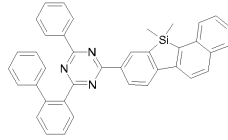


화학식 33

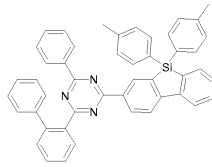
[0252]



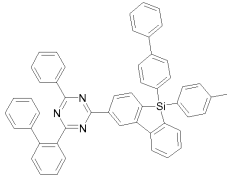
화학식 34



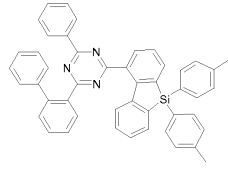
화학식 35



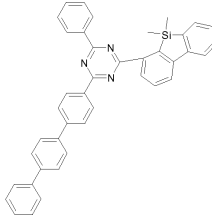
화학식 36



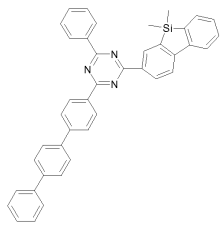
화학식 37



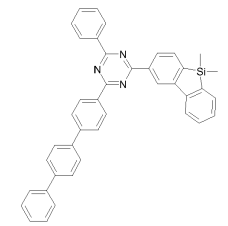
화학식 38



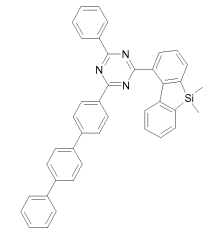
화학식 39



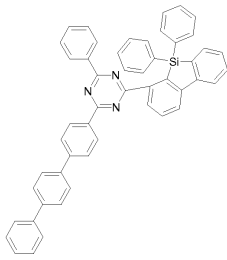
화학식 40



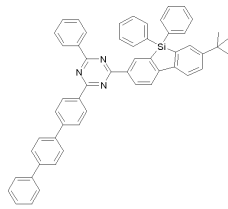
화학식 41



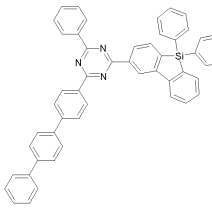
화학식 42



화학식 43

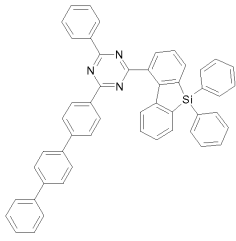


화학식 44

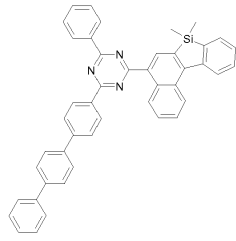


화학식 45

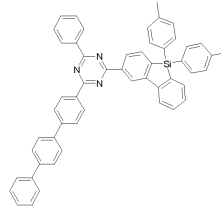
[0253]



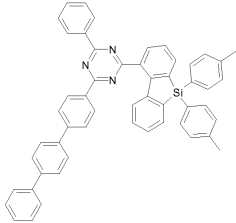
화학식 46



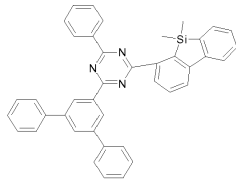
화학식 47



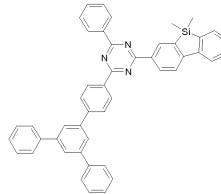
화학식 48



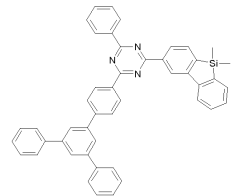
화학식 49



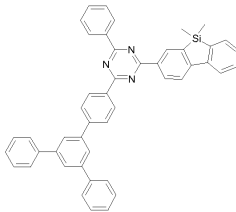
화학식 50



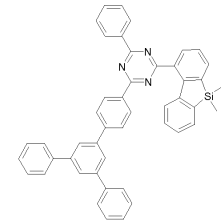
화학식 51



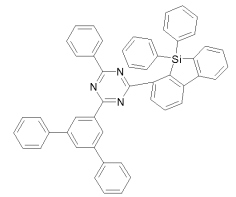
화학식 52



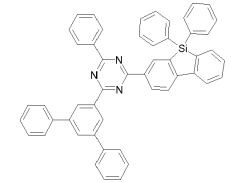
화학식 53



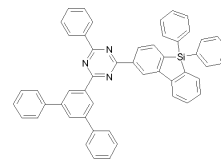
화학식 54



화학식 55

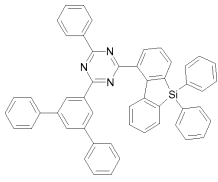


화학식 56

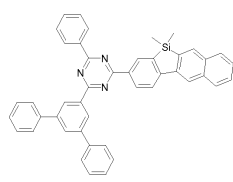


화학식 57

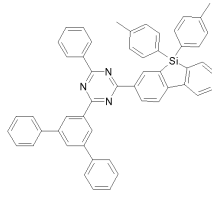
[0254]



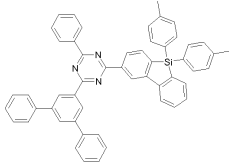
화학식 58



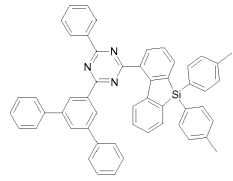
화학식 59



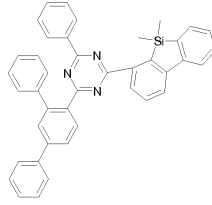
화학식 60



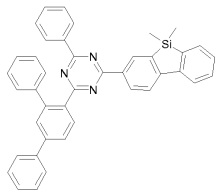
화학식 61



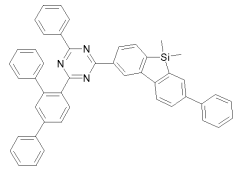
화학식 62



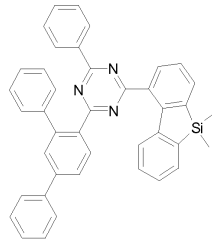
화학식 63



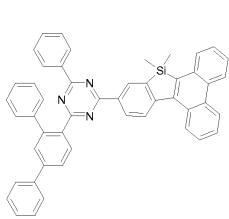
화학식 64



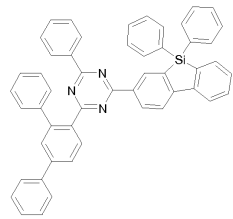
화학식 65



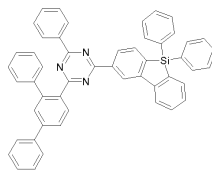
화학식 66



화학식 67

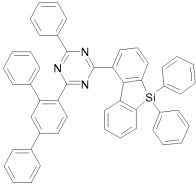


화학식 68

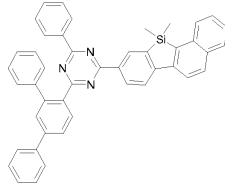


화학식 69

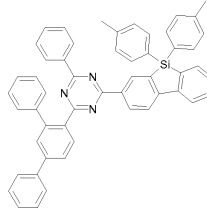
[0255]



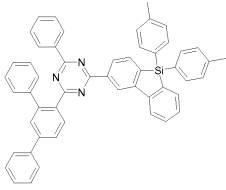
화학식 70



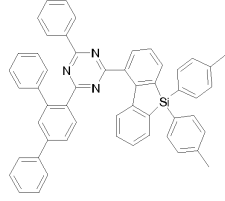
화학식 71



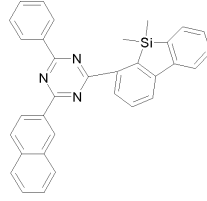
화학식 72



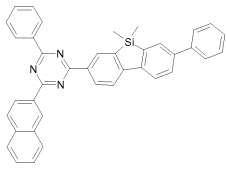
화학식 73



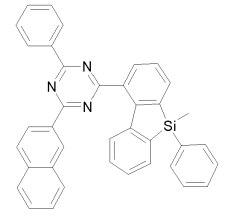
화학식 74



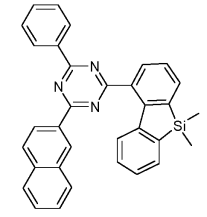
화학식 75



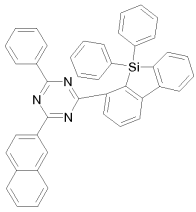
화학식 76



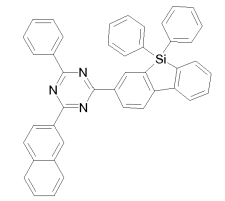
화학식 77



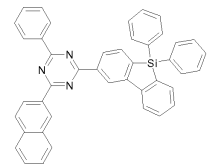
화학식 78



화학식 79

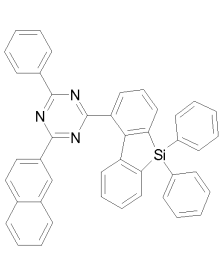


화학식 80

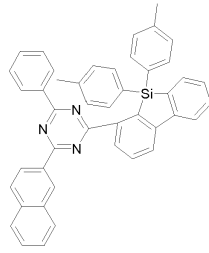


화학식 81

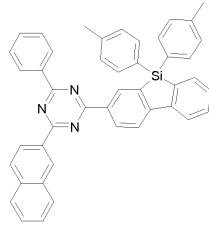
[0256]



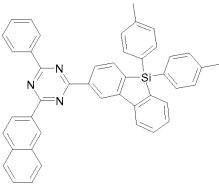
화학식 82



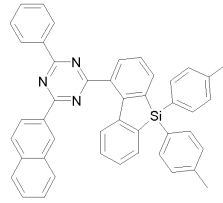
화학식 83



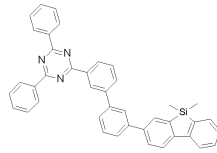
화학식 84



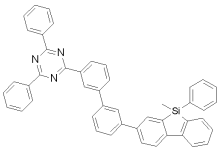
화학식 85



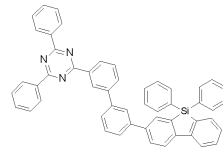
화학식 86



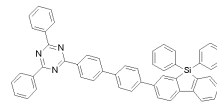
화학식 87



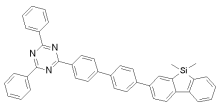
화학식 88



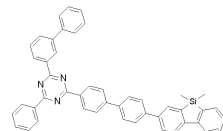
화학식 89



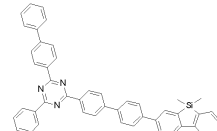
화학식 90



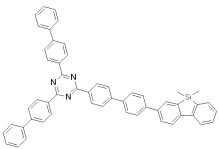
화학식 91



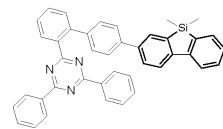
화학식 92



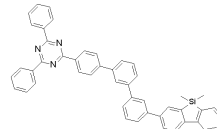
화학식 93



화학식 94

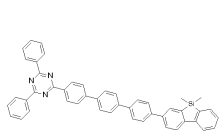


화학식 95

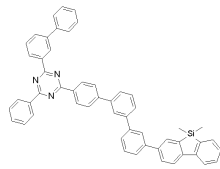


화학식 96

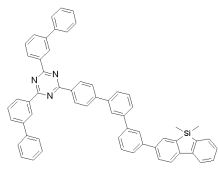
[0257]



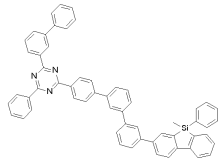
화학식 97



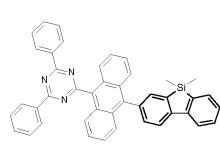
화학식 98



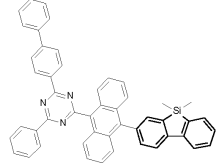
화학식 99



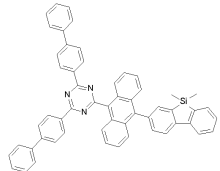
화학식 100



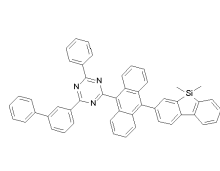
화학식 101



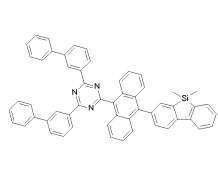
화학식 102



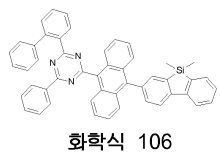
화학식 103



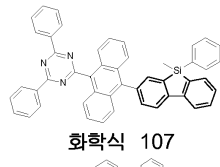
화학식 104



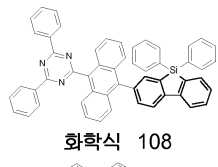
화학식 105



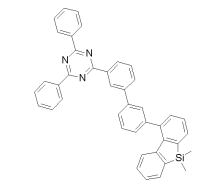
화학식 106



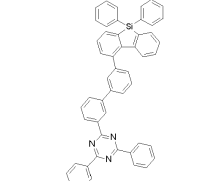
화학식 107



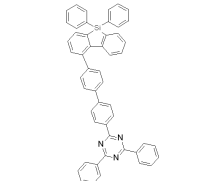
화학식 108



화학식 109

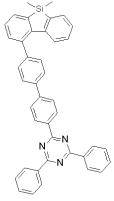


화학식 110

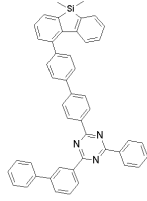


화학식 111

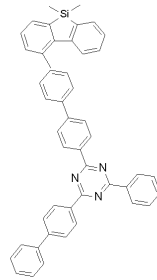
[0258]



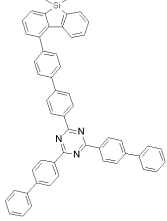
화학식 112



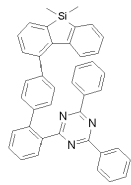
화학식 113



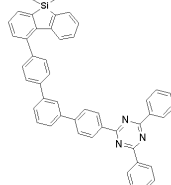
화학식 114



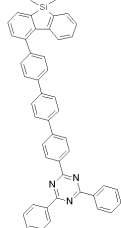
화학식 115



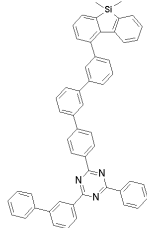
화학식 116



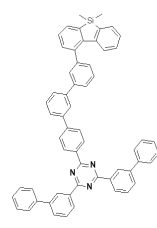
화학식 117



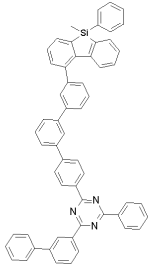
화학식 118



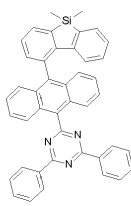
화학식 119



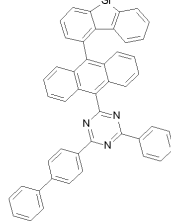
화학식 120



화학식 121

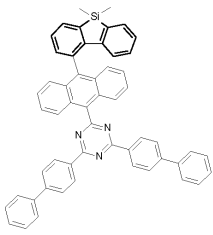


화학식 122

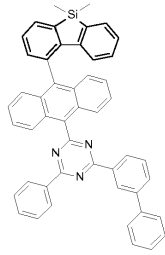


화학식 123

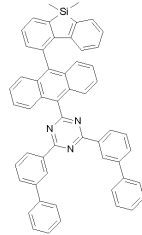
[0259]



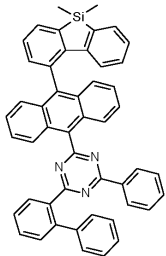
화학식 124



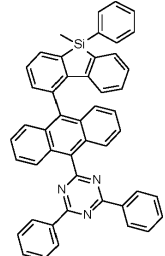
화학식 125



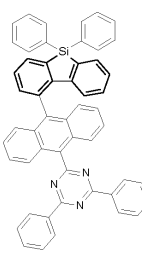
화학식 126



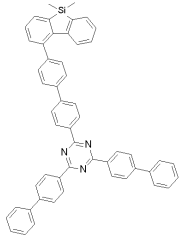
화학식 127



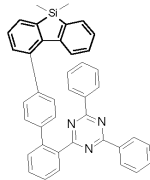
화학식 128



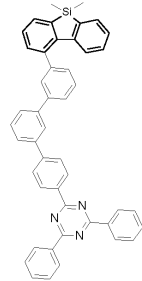
화학식 129



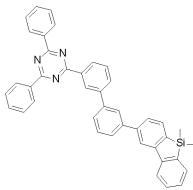
화학식 130



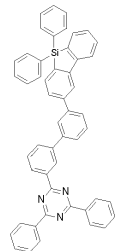
화학식 131



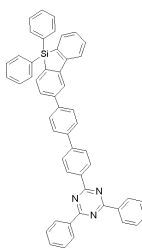
화학식 132



화학식 133

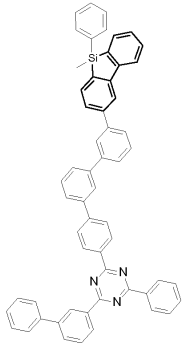


화학식 134

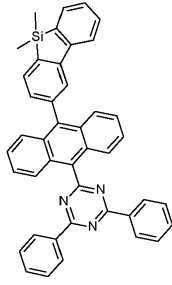


화학식 135

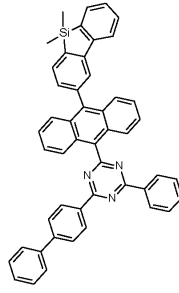
[0260]



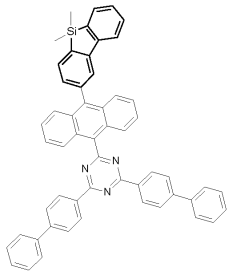
화학식 145



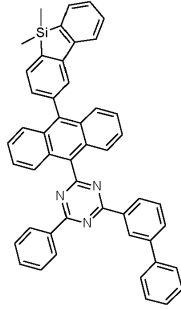
화학식 146



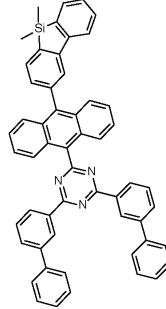
화학식 147



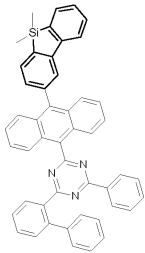
화학식 148



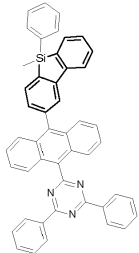
화학식 149



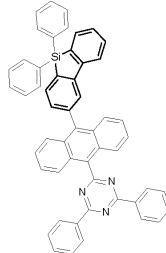
화학식 150



화학식 151

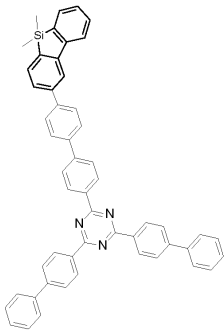


화학식 152

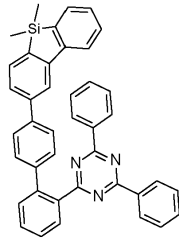


화학식 153

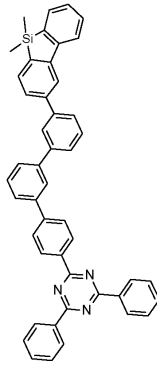
[0262]



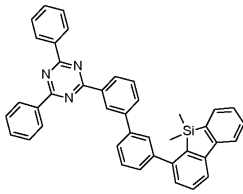
화학식 154



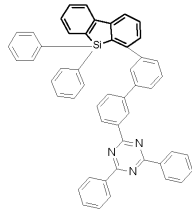
화학식 155



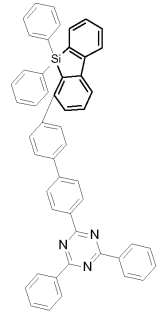
화학식 156



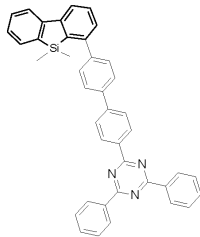
화학식 157



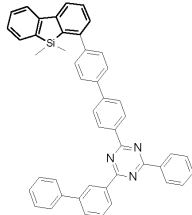
화학식 158



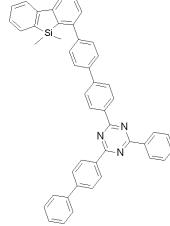
화학식 159



화학식 160

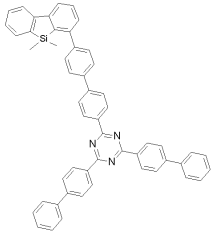


화학식 161

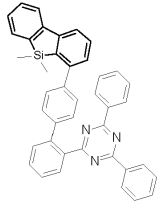


화학식 162

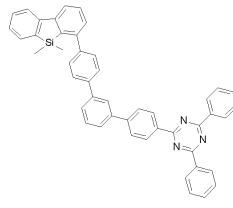
[0263]



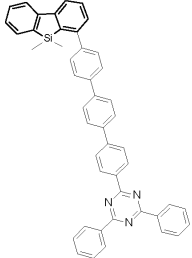
화학식 163



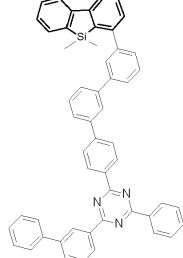
화학식 164



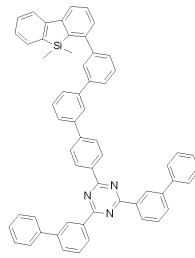
화학식 165



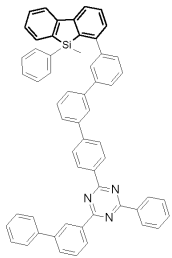
화학식 166



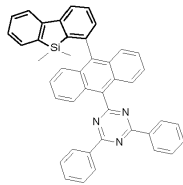
화학식 167



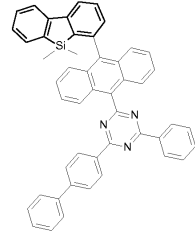
화학식 168



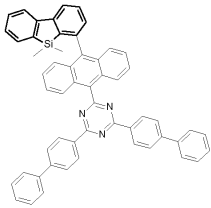
화학식 169



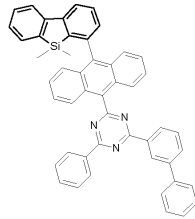
화학식 170



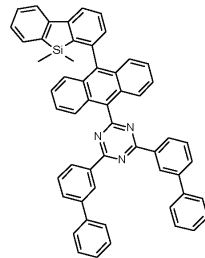
화학식 171



화학식 172

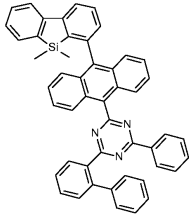


화학식 173

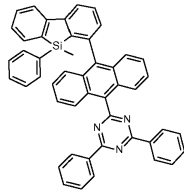


화학식 174

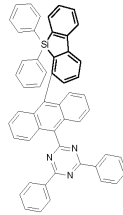
[0264]



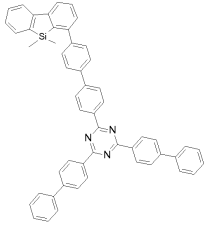
화학식 175



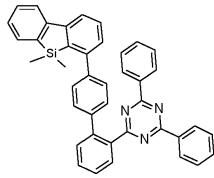
화학식 176



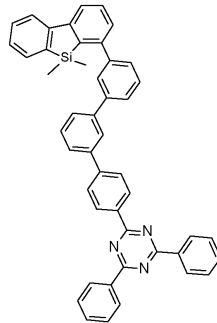
화학식 177



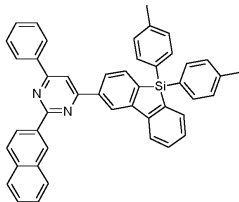
화학식 178



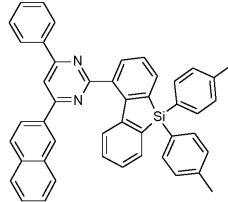
화학식 179



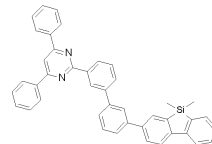
화학식 180



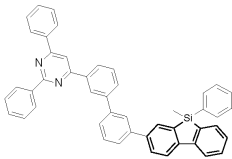
화학식 181



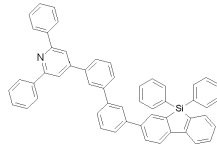
화학식 182



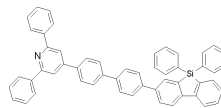
화학식 183



화학식 184

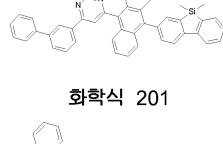
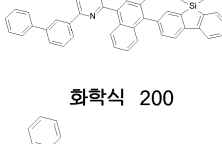
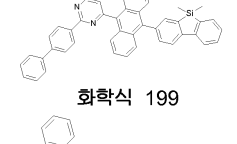
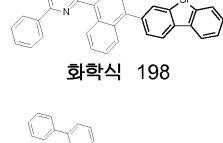
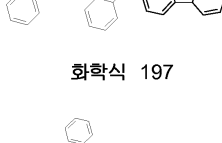
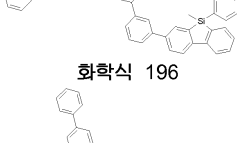
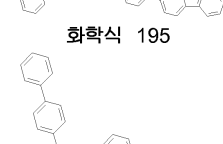
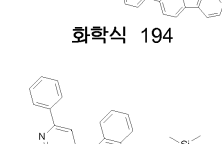
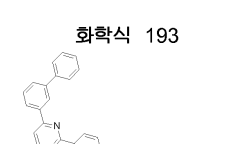
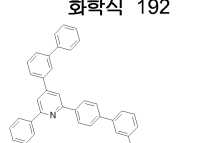
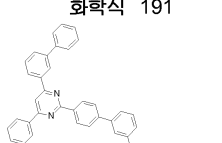
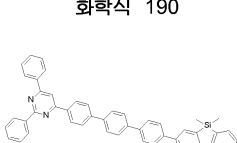
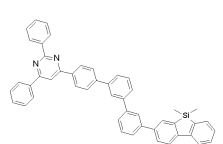
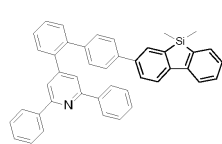
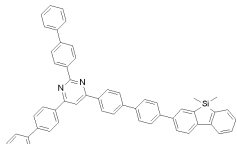
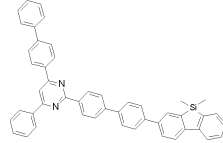
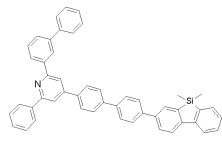
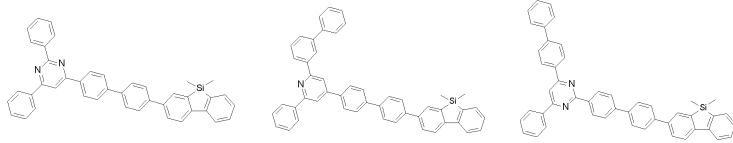


화학식 185

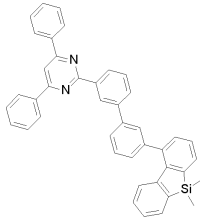


화학식 186

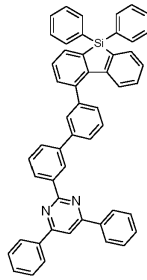
[0265]



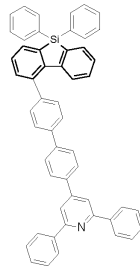
[0266]



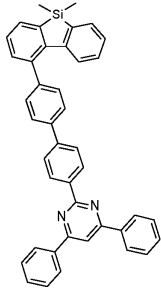
화학식 205



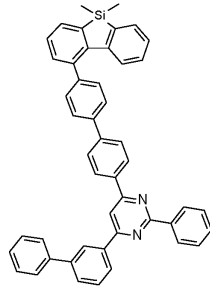
화학식 206



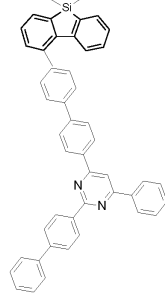
화학식 207



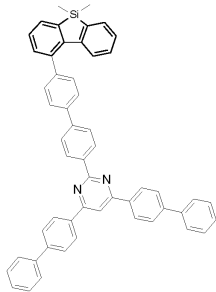
화학식 208



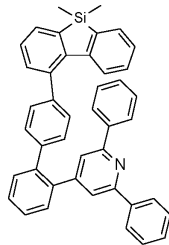
화학식 209



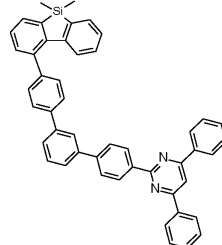
화학식 210



화학식 211

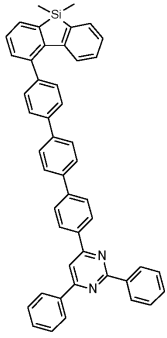


화학식 212

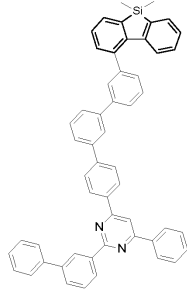


화학식 213

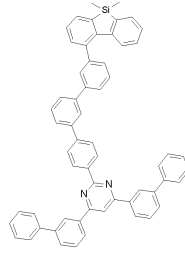
[0267]



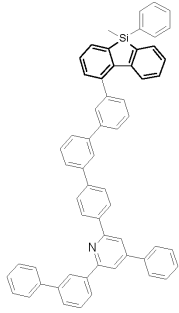
화학식 214



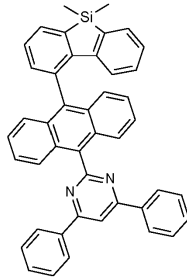
화학식 215



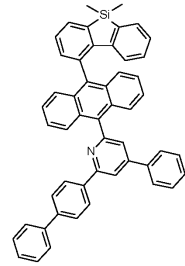
화학식 216



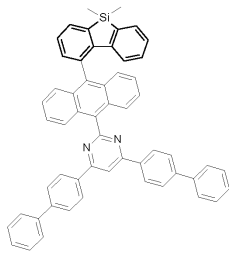
화학식 217



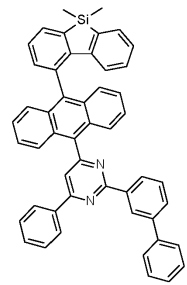
화학식 218



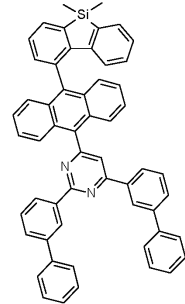
화학식 219



화학식 220

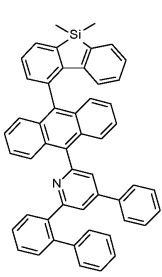


화학식 221

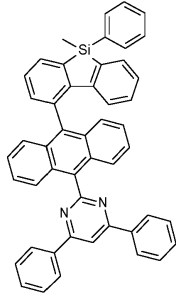


화학식 222

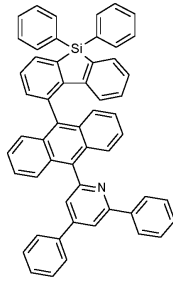
[0268]



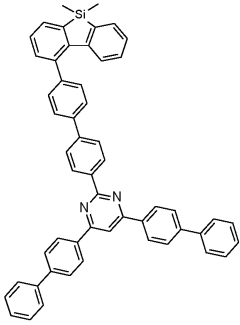
화학식 223



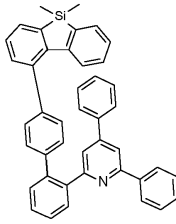
화학식 224



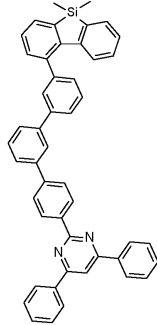
화학식 225



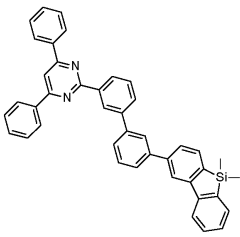
화학식 226



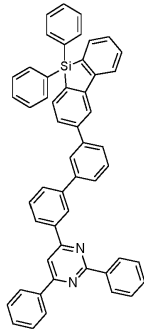
화학식 227



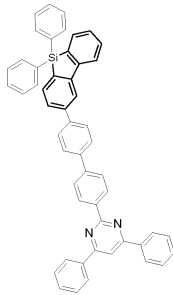
화학식 228



화학식 229

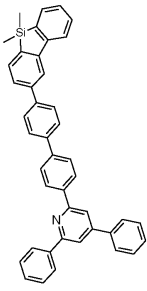


화학식 230

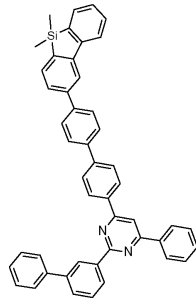


화학식 231

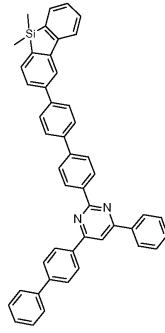
[0269]



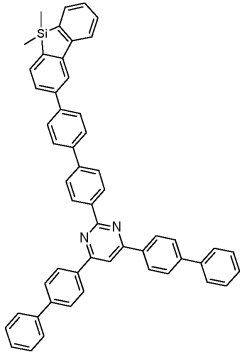
화학식 232



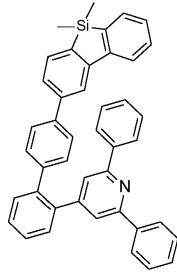
화학식 233



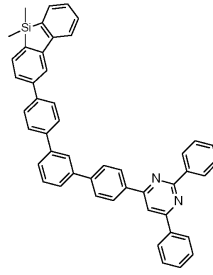
화학식 234



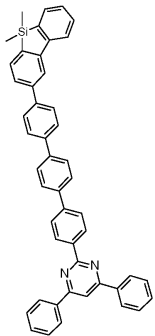
화학식 235



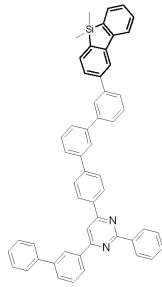
화학식 236



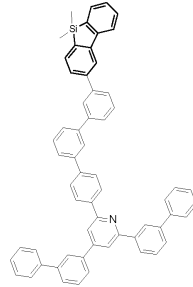
화학식 237



화학식 238

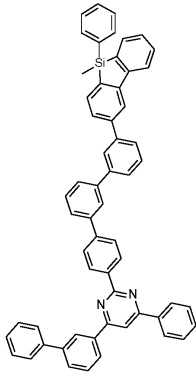


화학식 239

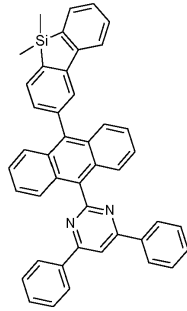


화학식 240

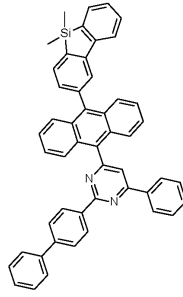
[0270]



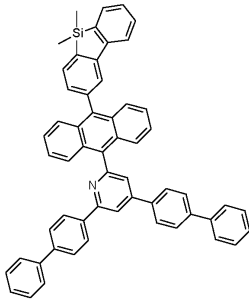
화학식 241



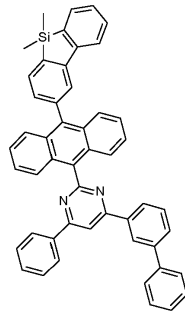
화학식 242



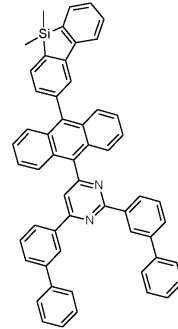
화학식 243



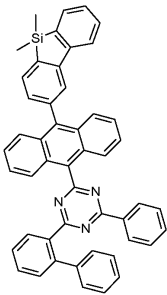
화학식 244



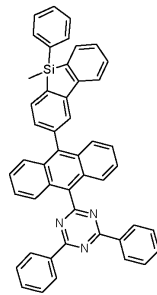
화학식 245



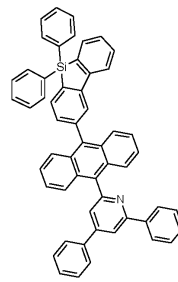
화학식 246



화학식 247

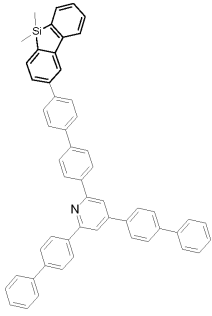


화학식 248

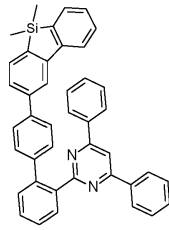


화학식 249

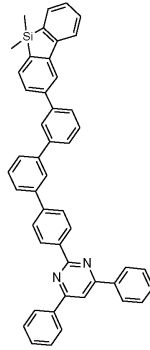
[0271]



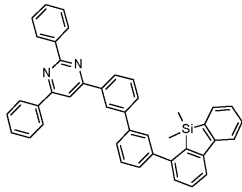
화학식 250



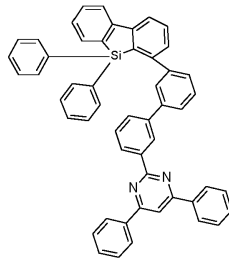
화학식 251



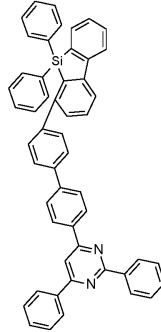
화학식 252



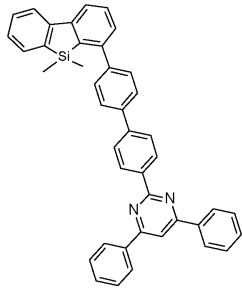
화학식 253



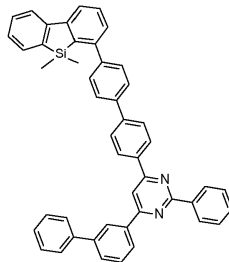
화학식 254



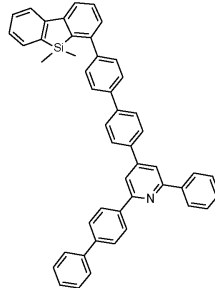
화학식 255



화학식 256

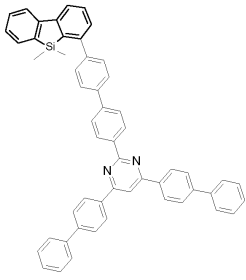


화학식 257

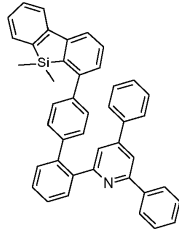


화학식 258

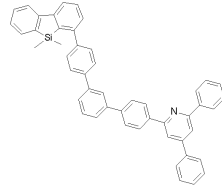
[0272]



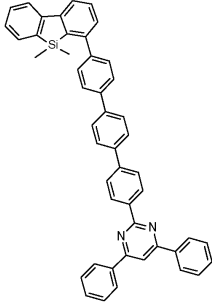
화학식 259



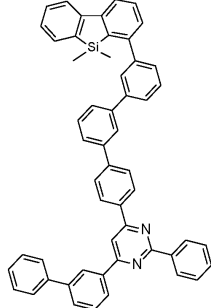
화학식 260



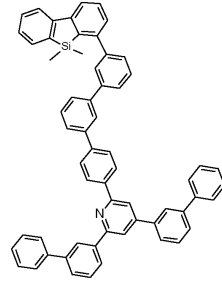
화학식 261



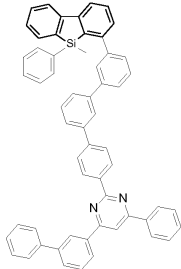
화학식 262



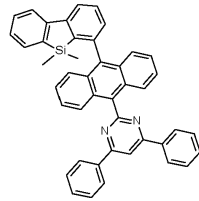
화학식 263



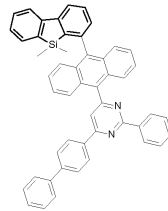
화학식 264



화학식 265

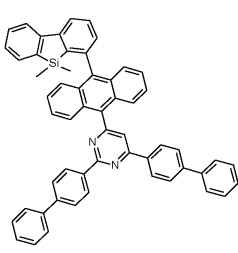


화학식 266

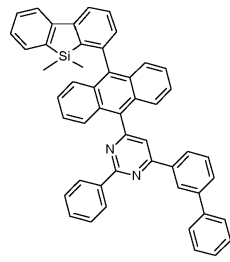


화학식 267

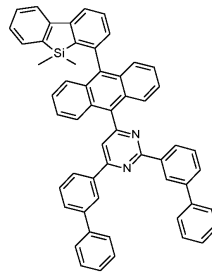
[0273]



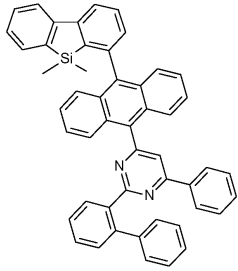
화학식 268



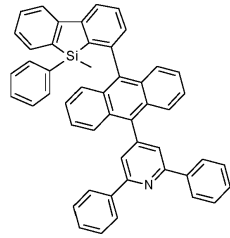
화학식 269



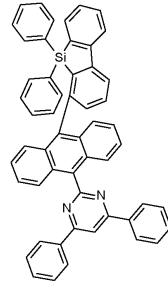
화학식 270



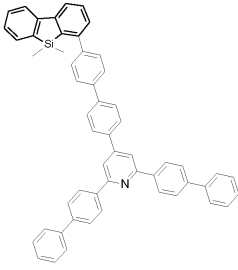
화학식 271



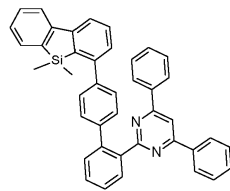
화학식 272



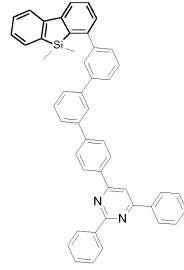
화학식 273



화학식 274



화학식 275



화학식 276

[0274]

[0275]

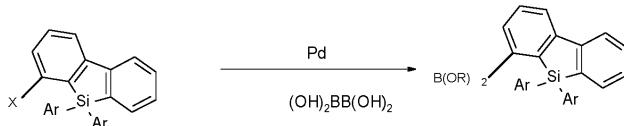
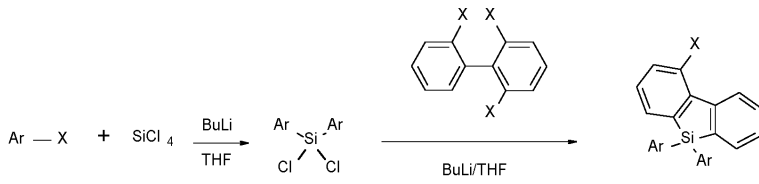
화학식 (I) 에 따른 화합물은 합성 유기 화학의 표준 반응, 예컨대 전이 금속 촉매화 커플링 반응, 바람직하게는 부흐발트, 스즈키, 야마모토, 스틸레, 헥크, 네기시, 소노가시라 및 히야마 커플링에 제조될 수 있다.

[0276]

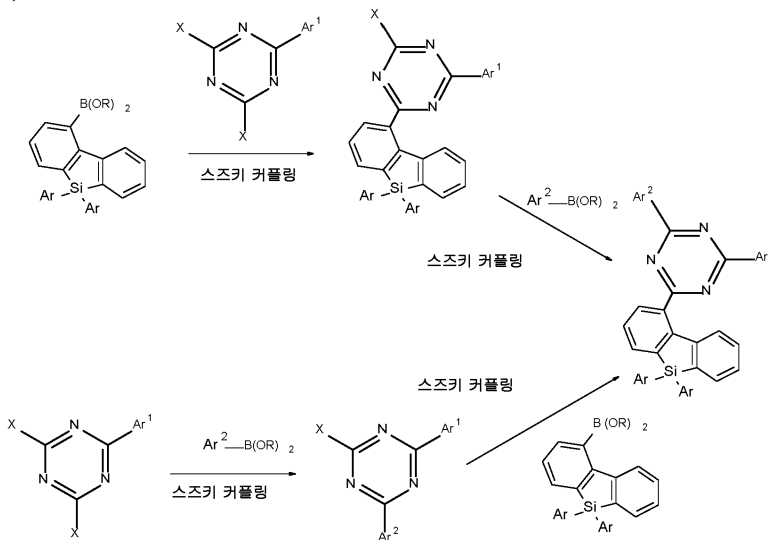
화학식 (I) 에 따른 화합물의 바람직한 합성 절차는 스킴 1에 도시되어 있다.

[0277] 스킴 1

i)



ii)



Ar¹, Ar² = 아릴 또는 헤테로아릴기

X = 할로겐

R = 알킬기

[0278]

[0279]

제 1 단계에서, 비스-염소화 디아릴실란이 제조된다. 이어서, 이 중간체를 트리스할로젠화 비페닐 유도체와 반응시켜, 4-할로젠화 실라플루오렌을 획득한다. 바람직하게는, 이 단계는 트리스-할로젠화 비페닐 유도체의 BuLi 에 의한 비스-리튬화 (bis-lithiation) 에 이어, 비스-염소화된 디아릴실란의 첨가에 의해 수행되어, 실라플루오렌의 고리를 형성한다. 이 단계에서 4-위치에서 할로젠화된 실라플루오렌이 형성된다. 4-위치에서 할로겐 원자는 유기붕소 종으로 변형된다.

[0280]

그후, 이 화합물은 추가 스즈키 반응에서 트리아진기에 커플링된다.

[0281]

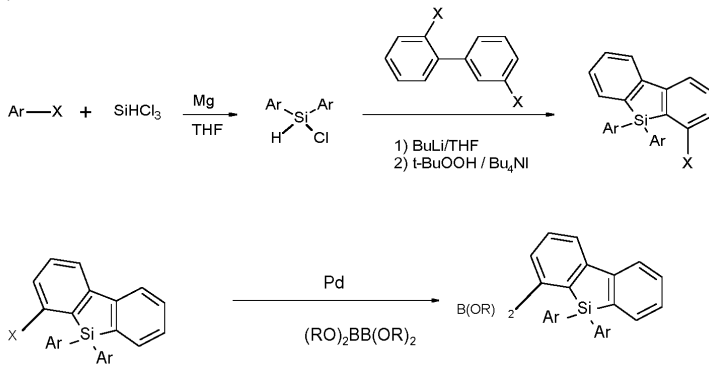
대안적인 반응에서, 4-할로젠화 실라플루오렌은 먼저 스즈키 반응에서 아릴기와 커플링된 다음, 트리아진과의 제 2 스즈키 반응을 수행한다. 이 방법에 의해, 실라플루오렌의 4-위치에 아릴렌 링커를 통해 커플링되는 트리아진기를 갖는 실라플루오렌 유도체를 제조할 수 있다.

[0282]

아민기가 실라-플루오레닐 기본 구조의 1-위치에 부착된 화학식 (I) 에 따른 화합물의 바람직한 합성 절차는 반응식 2 에 제시되어 있다.

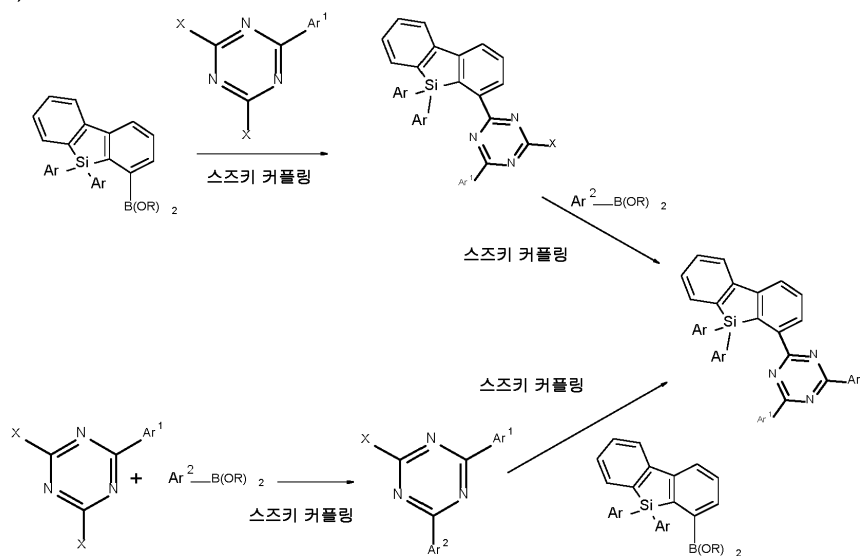
[0283] 스킴 2

i)



[0284]

ii)



Ar, Ar¹, Ar² = 아릴 또는 헤테로아릴기

X = 할로겐

R = 알킬기

[0285]

[0286]

제 1 단계에서, 모노-염소화 디아릴실란이 제조된다. 이어서, 이 중간체를 비스-할로겐화 비페닐 유도체와 반응시켜, 1-할로겐화 디페닐실라플루오렌을 수득한다. 바람직하게는, 이 단계는 비스-할로겐화 비페닐 유도체의 BuLi 에 의한 리튬화 (lithiation) 에 이어, 모노-염소화된 디아릴실란의 첨가, 이후 히드로퍼옥사이드 및 테트라부틸암모늄 요오다이드와의 반응 하에 고리 폐쇄 반응에 의해 수행된다. 1-위치에서 할로겐 원자는 유기붕소 종으로 변형된다. 유기 붕소 기은 바람직하게는 고리 구조를 포함할 수 있다.

[0287]

그후, 이 화합물은 스즈키 반응에서 트리아진기에 커플링된다.

[0288]

대안적인 반응에서, 1-할로겐화 실라플루오렌은 먼저 스즈키 반응에서 아릴기와 커플링된 다음, 트리아진과의 제 2 스즈키 반응을 수행한다. 이 방법에 의해, 실라플루오렌의 1-위치에 아릴렌 링커를 통해 커플링되는 트리아진기를 갖는 실라플루오렌 유도체를 제조할 수 있다.

[0289]

따라서, 본 발명의 추가의 실시형태는 모노-또는 디할로겐화 실릴 유도체가 할로겐화 비페닐기와 실라플루오렌 유도체로 반응하는 것을 특징으로 하는, 화학식 (I) 에 따른 화합물의 제조 방법이다.

[0290]

바람직하게는, 실릴 유도체는 디할로겐화된다. 더욱 바람직하게는, 비페닐기는 트리스-할로겐화된다. 더욱 바람직하게는, 생성된 실라플루오렌 유도체는 1-, 2-, 3- 및 4-위치, 바람직하게는 1-, 2- 및 4-위치, 보다 바람직하게는 1- 및 4-위치로부터 선택된 위치에서 할로겐 원자, 바람직하게는 Cl, Br 또는 I 를 가지며, 여기서 4-위치가 1-위치보다 바람직하다.

[0291]

2- 및/또는 3-위치에서 치환을 갖는 화합물은 상기 언급된 것과 유사한 방식으로 수득될 수 있다.

- [0292] 상기 기재된 본 발명에 따른 화합물, 특히 반응성 이탈기, 예컨대 불소, 염소, 브롬, 요오드, 토실레이트, 트리플레이트, 보론산 또는 보론산 에스테르에 의해 치환된 화합물은, 해당 올리고머, 덴드리머 또는 폴리머의 제조를 위한 모노머로서 사용될 수 있다. 여기서 올리고머화 또는 중합은 바람직하게는 할로젠 관능성 또는 보론산 관능성을 통해 실시된다.
- [0293] 따라서, 본 발명은 나아가 하나 이상의 화학식 (I) 의 화합물을 포함하는 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머에 관한 것으로, 여기서 상기 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머에의 결합(들)은 R^a , R^1 , R^1 또는 R^3 에 의해 치환되는 화학식 (I) 내의 임의의 목적하는 위치에 편재화될 수 있다. 화학식 (I) 의 화합물의 연결에 따라, 상기 화합물은 올리고머 또는 폴리머의 측쇄의 일부 또는 주쇄의 일부이다. 본 발명의 의미에서, 올리고머는 적어도 3 개의 모노머 단위로부터 구축되는 화합물을 의미하는 것으로 여겨진다. 본 발명의 의미에서의 폴리머는 적어도 10 개의 단량체 단위로부터 구축되는 화합물을 의미하는 것으로 이해된다. 본 발명에 따른 폴리머, 올리고머, 또는 덴드리머는 공역화, 부분 공역화, 또는 비-공역화될 수 있다. 본 발명에 따른 올리고머 또는 폴리머는 선형, 분지형 또는 수지상 (dendritic) 일 수 있다. 선형 방식으로 연결된 구조에서, 화학식 (I) 의 단위는 서로 직접 연결될 수 있거나, 또는 2 가 기를 통해, 예를 들어 치환 또는 비치환된 알킬렌기를 통해, 헤테로원자를 통해, 또는 2 가 방향족 또는 헤테로방향족기를 통해 서로 연결될 수 있다. 분지형 및 덴드리머형 구조에서, 예를 들어, 화학식 (I) 의 3 개 이상의 단위는 3가 또는 다가 기, 예를 들어 3가 또는 다가 방향족 또는 헤테로방향족기를 통해 연결되어, 분지형 또는 덴드리머형 올리고머 또는 폴리머를 형성할 수 있다. 화학식 (I) 의 화합물에 대해 상기 기재된 바와 동일한 바람직한 것이 올리고머, 덴드리머 및 폴리머에서의 화학식 (I) 의 반복 단위에 적용된다.
- [0294] 올리고머 또는 폴리머의 제조를 위해, 본 발명에 따른 단량체가 추가 단량체와 공중합되거나 동중합된다. 적합하고 바람직한 코모노머는 플루오렌 (예를 들어, EP 842208 또는 WO 00/22026 에 따름), 스피로비플루오렌 (예를 들어, EP 707020, EP 894107 또는 WO 06/061181 에 따름), 파라-페닐렌 (예를 들어, WO 92/18552 에 따름), 카르바졸 (예를 들어, WO 04/070772 또는 WO 04/113468 에 따름), 티오펜 (예를 들어, EP 1028136 에 따름), 디히드로페난트렌 (예를 들어, WO 05/014689 또는 WO 07/006383 에 따름), 시스- 및 트랜스-인테노플루오렌 (예를 들어, WO 04/041901 또는 WO 04/113412 에 따름), 케톤 (예를 들어, WO 05/040302 에 따름), 페난트렌 (예를 들어, WO 05/104264 또는 WO 07/017066 에 따름) 또는 또한 복수의 이들 단위로부터 선택된다. 폴리머, 올리고머, 및 덴드리머는 일반적으로, 예를 들어, (예를 들어, WO 07/068325 에 따름) 비닐트리아릴아민 또는 (예를 들어, WO 06/003000 에 따름) 인광 금속 착물, 및/또는 전하-수송 단위, 특히 트리아릴아민에 기초한 것들과 같은 추가의 단위, 예를 들어, 방출 (형광 또는 인광) 단위를 또한 함유한다.
- [0295] 본 발명에 따른 폴리머 및 올리고머는 일반적으로 하나 이상의 유형의 모노머의 중합에 의해 제조되며, 이 중 적어도 하나의 모노머는 폴리머에서 화학식 (I) 의 반복 단위를 유도한다. 적합한 중합 반응은 당업자에게 공지되어 있으며, 문헌에 기재되어 있다. C-C 또는 C-N 연결을 생성하는 특히 적합하며 바람직한 중합 반응은 하기와 같다:
- [0296] (A) 스킴 중합;
- [0297] (B) 야마모토 중합;
- [0298] (C) 스틸레 중합; 및
- [0299] (D) 하트비그-부흐발트 (HARTWIG-BUCHWALD) 중합
- [0300] (E) 그리나드 (GRIGNARD) 중합.
- [0301] 이들 방법에 의해 중합이 수행될 수 있는 방식 및 폴리머가 이후 반응 매질로부터 분리되고 정제될 수 있는 방식은 당업자에게 공지되어 있으며, 문헌, 예를 들어 WO 2003/048225, WO 2004/037887 및 WO 2004/037887 에 상세히 기재되어 있다.
- [0302] 따라서, 본 발명은 또한 스킴 중합, 야마모토 중합, 스틸레 중합 또는 하트비그-부흐발트 중합에 의해 제조되는 것을 특징으로 하는, 본 발명에 따른 폴리머, 올리고머 및 덴드리머의 제조 방법에 관한 것이다. 본 발명에 따른 덴드리머는 당업자에게 공지된 방법에 의해 또는 이와 유사하게 제조될 수 있다. 적합한 방법은, 예를 들어 하기와 같은 문헌에 기재되어 있다: [Frechet, Jean M. J.; Hawker, Craig J., "Hyperbranched polyphenylene and hyperbranched polyesters: new soluble, three-dimensional, reactive polymers", *Reactive & Functional Polymers* (1995), 26(1-3), 127-36]; [Janssen, H. M.; Meijer, E. W., "The

synthesis and characterization of dendritic molecules", Materials Science and Technology (1999), 20 (Synthesis of Polymer), 403-458]; [Tomalia, Donald A., "Dendrimer molecules", Scientific American (1995), 272(5), 62-6]; WO 02/067343 A1 및 WO 2005/026144 A1.

- [0303] 본 발명에 따른 화합물은 전자 디바이스에서의 사용에 적합하다. 전자 디바이스는 적어도 하나의 유기 화합물을 함유하는 적어도 하나의 층을 포함하는 디바이스를 의미하는 것으로 이해된다. 그러나, 컴포넌트는 여기서 또한 무기 재료 또는 또한 무기 재료로부터 전적으로 만들어진 층을 포함할 수 있다.
- [0304] 따라서, 본 발명은 또한 전자 디바이스, 특히 유기 전계발광 디바이스에서의 본 발명에 따른 화합물의 용도에 관한 것이다.
- [0305] 본 발명은 나아가 적어도 하나의 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 전자 디바이스에 관한 것이다. 상기 언급된 바람직함은 전자 디바이스에도 마찬가지로 적용된다.
- [0306] 전자 디바이스는 바람직하게는 유기 전계발광 디바이스 (OLED), 유기 집적 회로 (O-IC), 유기 전계-효과 트랜지스터 (O-FET), 유기 박막 트랜지스터 (O-TFT), 유기 발광 트랜지스터 (O-LET), 유기 태양 전지 (O-SC), 유기 염료-감응형 태양 전지 (ODSSC), 유기 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 전계-퀵치 디바이스 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 유기 플라즈몬 발광 디바이스로 이루어지는 군으로부터 선택되며, 바람직하게는 유기 전계발광 디바이스 (OLED) 이다.
- [0307] 유기 전계발광 디바이스 및 발광 전기화학 전지는 다양한 용도, 예를 들어 단색 또는 다색 디스플레이용, 조명용 또는 의료 및/또는 화장 용도, 예를 들어 광선요법에 사용될 수 있다.
- [0308] 유기 전계발광 디바이스는 캐소드, 애노드 및 적어도 하나의 방출층을 포함한다. 이들 층 외에도, 이는 또한 추가의 층, 예를 들어 각각의 경우에 하나 이상의 정공-주입층, 정공-수송층, 정공-차단층, 전자-수송층, 전자-주입층, 여기자-차단층, 전자-차단층 및/또는 전하-생성층을 포함할 수 있다. 마찬가지로, 예를 들어, 엑시톤-차단 기능을 갖는 중간층이 2 개의 방출층 사이에 도입될 수 있다. 그러나, 각각의 이러한 층이 반드시 존재해야 하는 것은 아님에 유의해야 한다.
- [0309] 유기 전계발광 디바이스는 여기서 하나의 방출층 또는 복수의 방출층을 포함할 수 있다. 복수의 방출층이 존재하는 경우, 이들은 바람직하게는 종합적으로 백색 발광을 초래하도록, 전체적으로 380 nm 내지 750 nm 에서 복수의 발광 최대값을 갖고, 즉 형광 또는 인광을 발할 수 있는 다양한 방출 화합물이 방출층에 사용된다. 3 개의 방출층을 갖는 시스템이 특히 바람직하며, 여기서 3 개의 층은 청색, 녹색 및 주황색 또는 적색 방출을 나타낸다 (기본 구조에 관해, 예를 들어 WO 2005/011013 참조). 여기서 모든 방출층이 형광성이거나 모든 방출층이 인광성이거나 하나 이상의 방출층이 형광성이고 하나 이상의 다른 층이 인광성인 것이 가능하다.
- [0310] 상기 표시된 실시형태에 따른 본 발명에 따른 화합물은 정확한 구조에 따라 상이한 층에서 사용될 수 있다. 전자 수송 또는 전자 주입 또는 정공 차단층에서의 전자 수송 재료로서 또는 형광 또는 인광 방출체, 특히 인광 방출체를 위한 매트릭스 재료로서, 화학식 (I) 또는 바람직한 실시형태의 화합물을 포함하는 유기 전계발광 디바이스가 바람직하다. 위에 나타난 바람직한 실시형태는 유기 전자 디바이스에서 재료의 사용에도 적용된다.
- [0311] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, 화학식 (I) 또는 바람직한 실시형태의 화합물은 전자 수송 또는 전자 주입 층에서 전자 수송 또는 정공 주입 재료로서 사용된다. 여기서 방출층은 형광성 또는 인광성일 수 있다. 본 발명의 의미에서, 전자 주입층은 캐소드에 직접 인접하는 층이다. 본 발명의 의미에서, 전자 수송층은 전자 주입층과 방출층 사이에 위치하는 층이다.
- [0312] 본 발명의 또 다른 바람직한 실시형태에서, 화학식 (I) 또는 바람직한 실시형태의 화합물은 방출층에서의 호스트 재료에 사용된다. 호스트 재료는 방출층에서의 방출 재료에 직접 인접하는 층을 의미하는 것으로 여겨진다.
- [0313] 화학식 (I) 또는 바람직한 실시형태의 화합물은 특히 바람직하게는 전자 수송 또는 정공 차단층에 사용된다.
- [0314] 화학식 (I) 의 화합물이 전자 수송층, 전자 주입층 또는 정공 주입층에서 전자 수송 재료로서 사용되는 경우, 화학식 (I) 의 화합물은 단일 재료, 즉 100% 의 비율로 그러한 층에서 사용될 수 있거나, 화학식 (I) 의 화합물은 그러한 층에서 하나 이상의 추가 화합물과 조합하여 사용될 수 있다. 바람직하게는, 이들 추가의 화합물은 당업계에 공지된 전형적인 전자 수송 화합물로부터 선택된다.

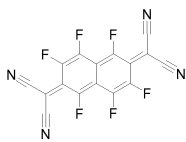
[0315] 바람직한 실시형태에 따르면, 화학식 (I) 의 화합물을 함유하는 유기 층은 부가적으로 하나 이상의 p-도펀트를 포함한다. 본 발명에 대해 바람직한 p-도펀트는 전자를 수용할 수 있고 (전자 수용체) 혼합물에 존재하는 하나 이상의 다른 화합물을 산화시킬 수 있는 유기 화합물이다.

[0316] p-도펀트의 특히 바람직한 실시형태는 WO 2011/073149, EP 1968131, EP 2276085, EP 2213662, EP 1722602, EP 2045848, DE 102007031220, US 8044390, US 8057712, WO 2009/003455, WO 2010/094378, WO 2011/120709, US 2010/0096600, WO 2012/095143 및 DE 102012209523 에 개시된 화합물이다.

[0317] 특히 바람직한 p-도펀트는, 퀴노디메탄 화합물, 아자인덴노플루오렌디온, 아자페닐렌, 아자트리페닐렌, I₂, 금속 할라이드, 바람직하게는 전이 금속 할라이드, 금속 옥사이드, 바람직하게는 적어도 하나의 전이 금속 또는 제 3 주족의 금속을 포함하는 금속 옥사이드, 및 전이 금속 착물, 바람직하게는 Cu, Co, Ni, Pd 및 Pt 와 결합 부위로서 적어도 하나의 산소 원자를 포함하는 리간드의 착물이다. 도펀트로서 전이 금속 옥사이드, 바람직하게는 레늄, 몰리브덴 및 텅스텐의 옥사이드, 보다 바람직하게는 Re₂O₇, MoO₃, WO₃ 및 ReO₃ 이 또한 바람직하다.

[0318] p-도펀트는 바람직하게는 p-도핑된 층 내에 실질적으로 균질한 분포로 존재한다. 이들은 예를 들어, p-도펀트 및 정공 수송 재료 매트릭스의 동시증발에 의해 달성될 수 있다.

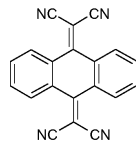
[0319] 특히 바람직한 p-도펀트는 화합물 (D-1) 내지 (D-13) 으로부터 선택된다:



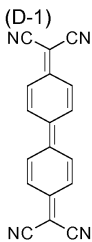
(D-1)



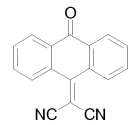
(D-2)



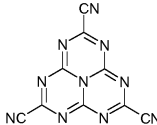
(D-3)



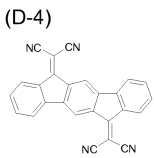
(D-4)



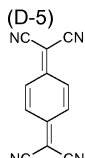
(D-5)



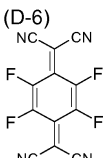
(D-6)



(D-7)

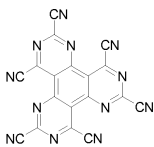


(D-8)

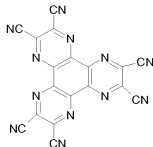


(D-9)

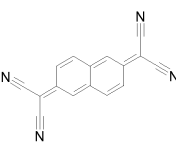
[0320]



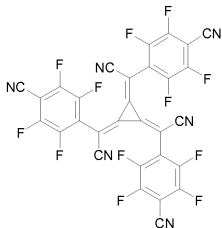
(D-10)



(D-11)



(D-12)



(D-13)

[0321]

[0322] 본 발명의 실시형태에서, 화학식 (I) 또는 바람직한 실시형태의 화합물은 헥사아자트리페닐렌 유도체, 특히 헥사사시아노헥사아자트리페닐렌을 포함하는 층과 조합하여 정공 수송 또는 정공 주입 층에서 사용된다 (예를 들어, EP 1175470 에 따름). 따라서, 예를 들어, 애노드-헥사아자트리페닐렌 유도체-정공 수송층과 같은 조합이

바람직하며, 여기서 정공 수송층은 화학식 (I) 또는 바람직한 실시형태의 하나 이상의 화합물을 포함한다. 이 구조에서, 적어도 하나의 정공 수송층이 화학식 (I) 또는 바람직한 실시형태의 적어도 하나의 화합물을 포함하는, 복수의 연속적인 정공 수송층을 사용하는 것도 가능하다. 추가의 바람직한 조합은 애노드-정공 수송층-헥사아자트리페닐렌 유도체-정공 수송층으로 나타내며, 여기서 2 개의 정공 수송층 중 적어도 하나는 화학식 (I) 또는 바람직한 실시형태의 하나 이상의 화합물을 포함한다. 이 구조에서, 적어도 하나의 정공 수송층이 화학식 (I) 또는 바람직한 실시형태의 적어도 하나의 화합물을 포함하는, 하나의 정공 수송층 대신에 복수의 연속적인 정공 수송층을 사용하는 것도 가능하다.

[0323] 바람직하게는, 본 발명의 OLED 는 2 개 이상의 상이한 전자 수송층을 포함한다. 여기서 화학식 (I) 의 화합물은 하나 이상의 또는 모든 정공 수송층에서 사용될 수도 있다. 바람직한 실시형태에 따르면, 화학식 (I) 의 화합물은 정확하게 1 개의 정공 수송층에서 사용되며, 다른 화합물, 바람직하게는 헤테로방향족 화합물은 존재하는 추가의 정공 수송층에서 사용된다.

[0324] 본 발명의 또 다른 바람직한 실시형태에서, 화학식 (I) 또는 바람직한 실시형태의 화합물은 형광 또는 인광 화합물, 특히 인광 화합물에 대한 매트릭스 재료로서 방출층에서 사용된다. 유기 전계발광 디바이스는 하나의 방출층 또는 복수의 방출층을 포함할 수 있고, 적어도 하나의 방출층은 매트릭스 재료로서 본 발명에 따른 적어도 하나의 화합물을 포함한다.

[0325] 화학식 (I) 또는 바람직한 실시형태의 화합물이 방출층 중 방출 화합물에 대한 매트릭스 재료로서 사용되는 경우, 바람직하게는 하나 이상의 인광 재료 (삼중선 방출체) 와 조합하여 사용된다. 인광은 본 발명의 문맥에서 스핀 다중도 > 1 을 갖는 여기된 상태, 특히 여기된 삼중선 상태로부터의 발광을 의미하는 것으로 여겨진다. 본 출원의 목적에서, 전이 금속 또는 란타노이드를 함유하는 모든 발광 착물, 특히 모든 발광 이리듐, 백금 및 구리 착물은 인광 화합물로서 간주되어 진다.

[0326] 화학식 (I) 또는 바람직한 실시형태의 화합물을 포함하는 매트릭스 재료 및 방출 화합물을 포함하는 혼합물은 방출체 및 매트릭스 재료를 포함하는 전체 혼합물에 대해, 99.9 부피% 내지 1 부피%, 바람직하게는 99 부피% 내지 10 부피%, 더욱 바람직하게는 97 부피% 내지 60 부피%, 특히 95 부피% 내지 80 부피% 의 매트릭스 재료를 포함한다. 따라서, 혼합물은 방출체 및 매트릭스 재료를 포함하는 전체 혼합물에 대해, 0.1 부피% 내지 99 부피%, 바람직하게는 1 부피% 내지 90 부피%, 특히 바람직하게는 3 부피% 내지 40 부피%, 특히 5 부피% 내지 20 부피% 의 방출체를 포함한다.

[0327] 본 발명의 특히 바람직한 실시형태는 추가의 매트릭스 재료와 조합으로 인광 방출체를 위한 매트릭스 재료로서의 화학식 (I) 또는 바람직한 실시형태의 화합물의 용도이다. 화학식 (I) 의 화합물과 조합하여 사용될 수 있는 특히 적합한 매트릭스 재료는 바람직한 삼중선 항원 매트릭스 재료로서 하기 언급되는 것들이다.

[0328] 또한, 전자 수송층 또는 정공 차단층 모두에서 및 방출층에서 매트릭스로서 화학식 (I) 또는 바람직한 실시형태의 화합물을 사용하는 것이 가능하다.

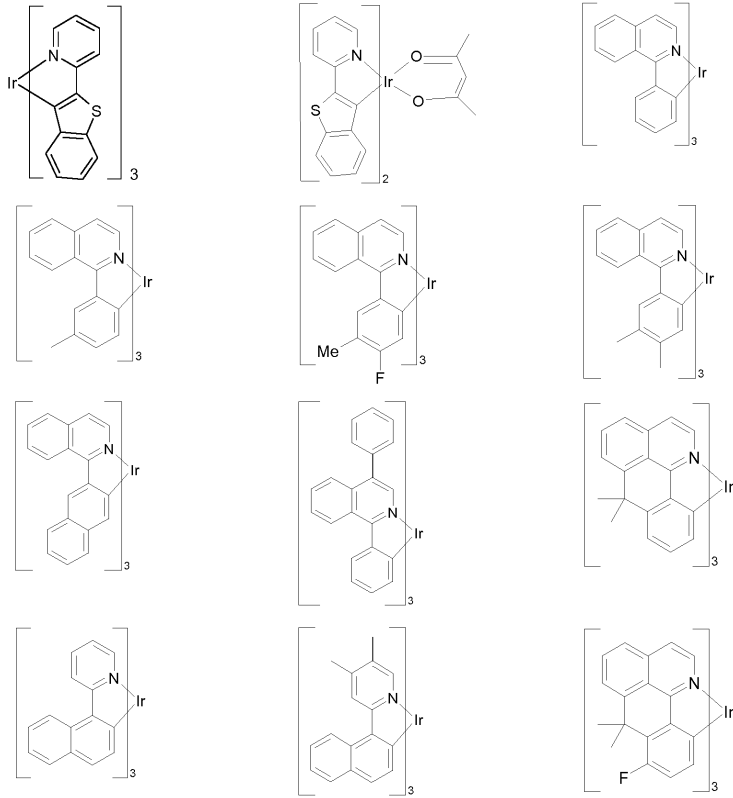
[0329] 본 발명에 따른 유기 전계발광 디바이스의 추가의 층에서, 종래 기술에 따라 통상적으로 사용되는 모든 재료를 사용할 수 있다. 따라서, 당업자는, 진보성 없이, 본 발명에 따른 화학식 (I) 또는 바람직한 실시형태의 화합물과 조합하여 유기 전계발광 디바이스에 대해 알려진 모든 재료를 사용할 수 있다.

[0330] 전자 디바이스에서 상이한 기능성 재료의 바람직한 실시형태가 이하에 나열된다.

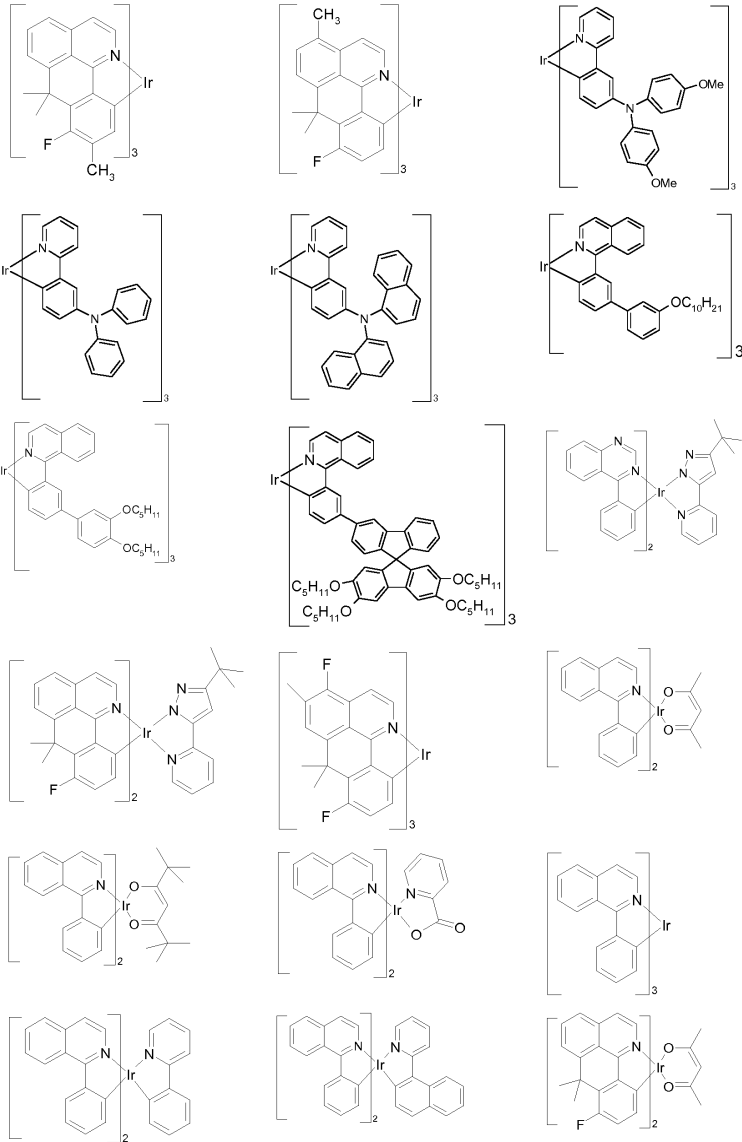
[0331] 적합한 인광 화합물 (= 삼중항 방출체) 는 특히 적합하게 여기하는 경우 바람직하게는 가시 영역에서 광을 방출하고, 또한 20 초과, 바람직하게는 38 초과 84 미만, 특히 바람직하게는 56 초과 80 미만의 원자 번호를 갖는 적어도 하나의 원자, 특히 이 원자 수를 갖는 금속을 함유하는 화합물이다. 사용되는 인광 방출체는 바람직하게는 구리, 몰리브덴, 텅스텐, 레늄, 루테튬, 오스뮴, 로듐, 이리듐, 팔라듐, 백금, 은, 금 또는 유로퓸을 함유하는 화합물, 특히 이리듐, 백금 또는 구리를 함유하는 화합물이다.

[0332] 상기 기재된 방출체의 예는 출원 WO 2000/70655, WO 2001/41512, WO 2002/02714, WO 2002/15645, EP 1191613, EP 1191612, EP 1191614, WO 2005/033244, WO 2005/019373, 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 2011/157339 또는 WO 2012/007086 에 의해 밝혀진다. 일반적으로, 인광 OLED 에 대한 선행 기술에 따라 사용되고 유기 전계발광 분야의 당업자에게 공지된 바와 같은 모든 인광 착물이 적합하며, 당업자는 진보성 없이 추가의 인광 착물을 사용할 수 있을 것이다.

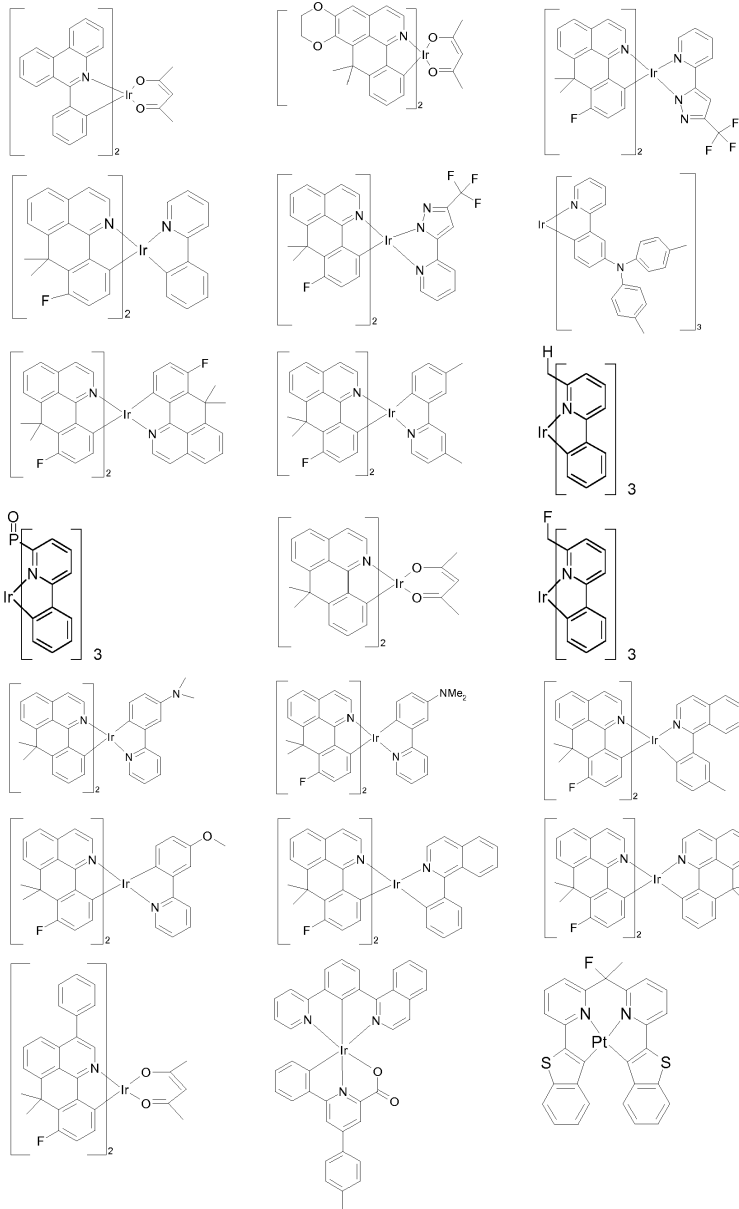
[0333] 바람직한 인광성 방출 화합물은 상기 언급된 것들, 및 하기 표에 열거된 것들이다.



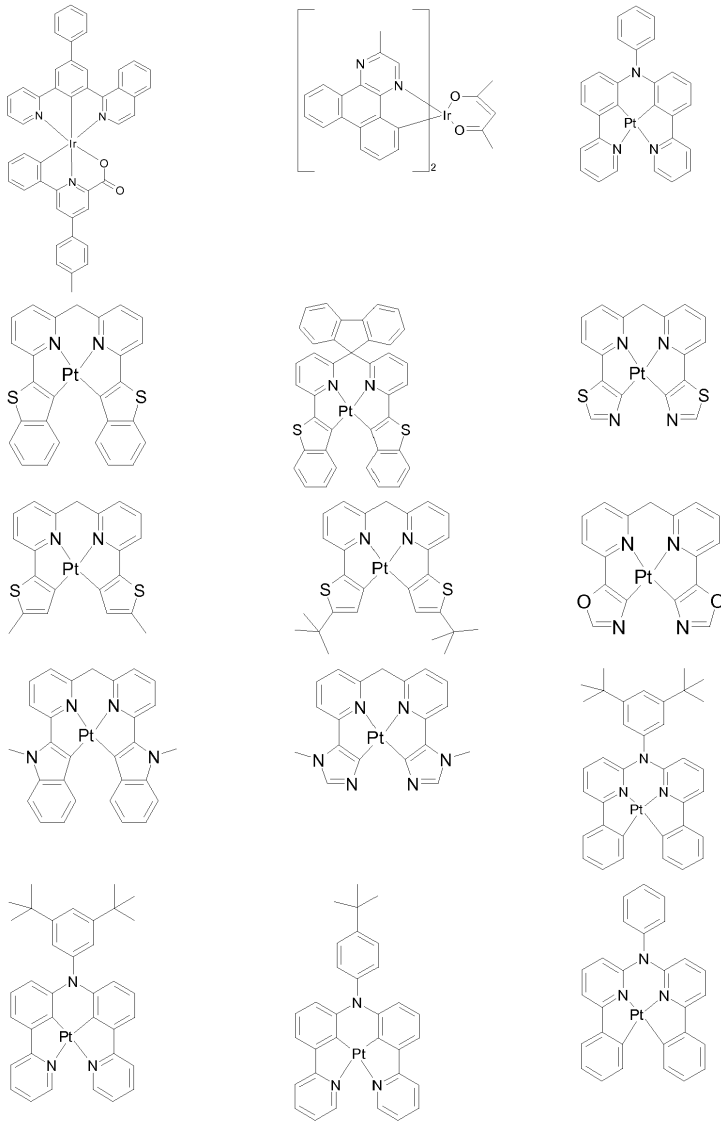
[0334]



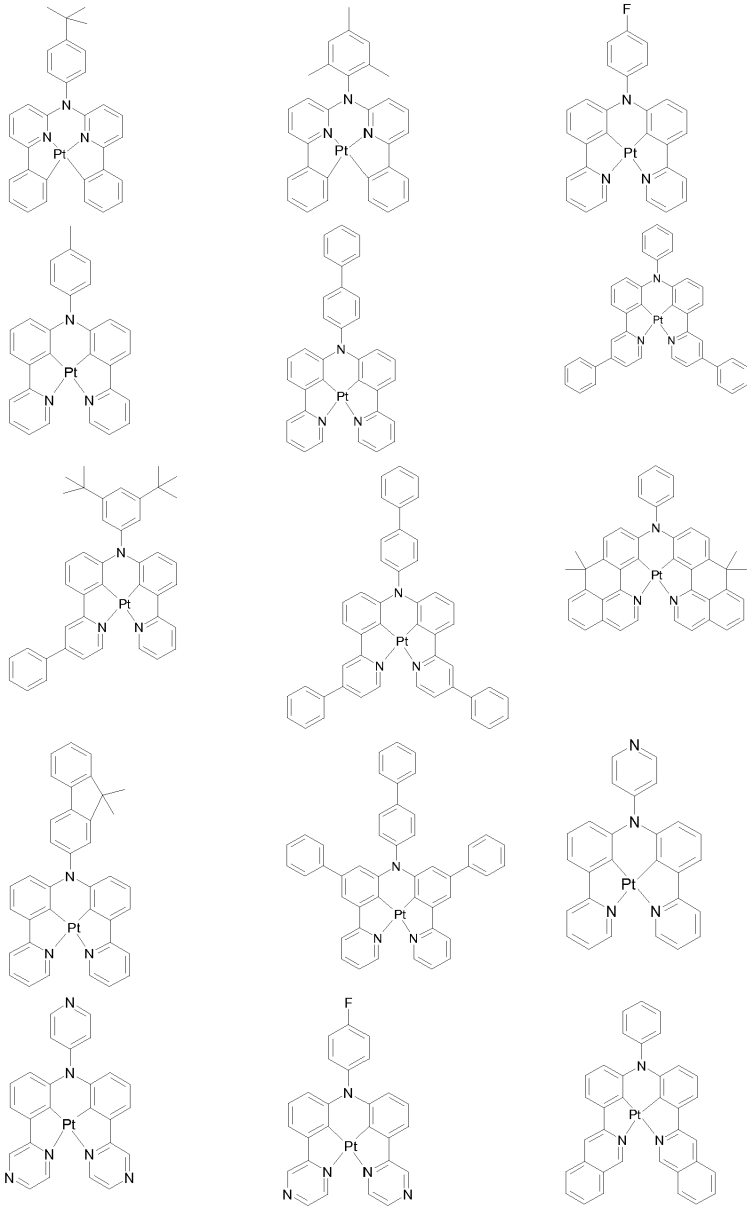
[0335]



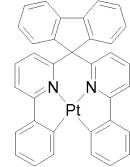
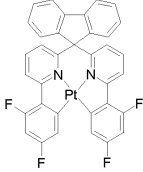
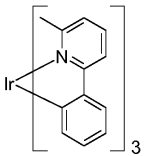
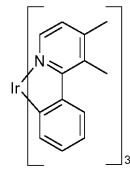
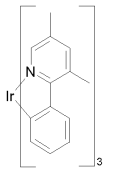
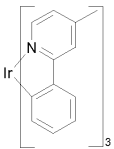
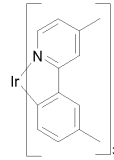
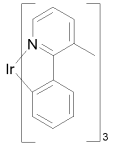
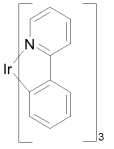
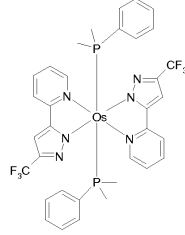
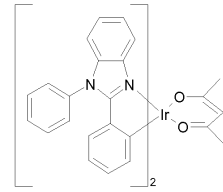
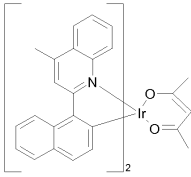
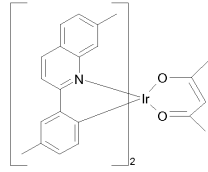
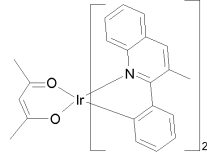
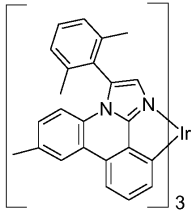
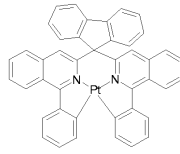
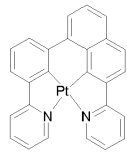
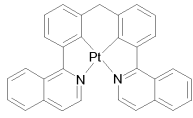
[0336]



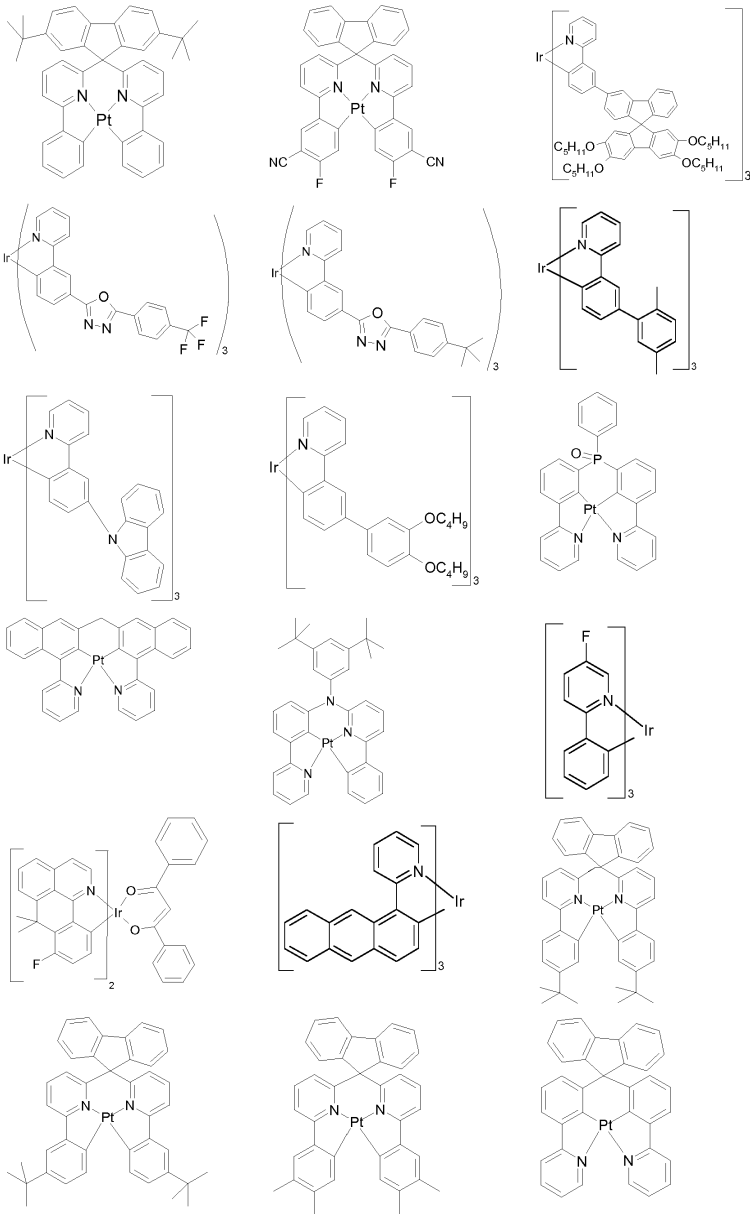
[0337]



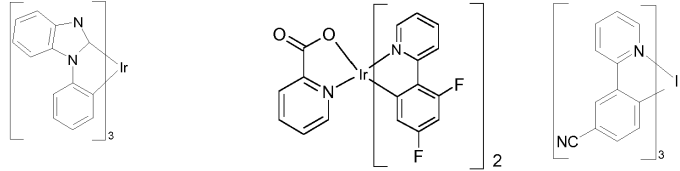
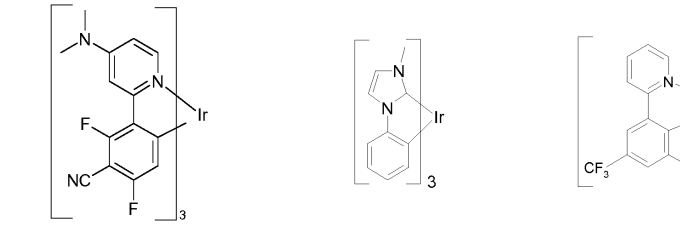
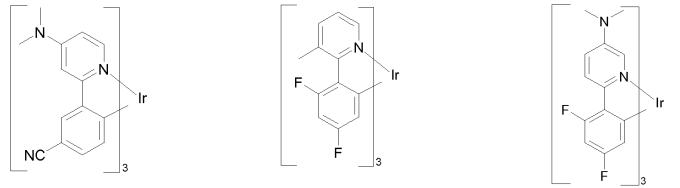
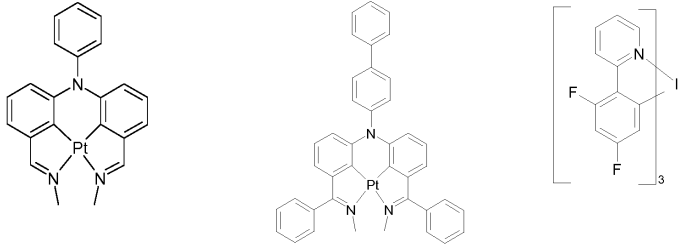
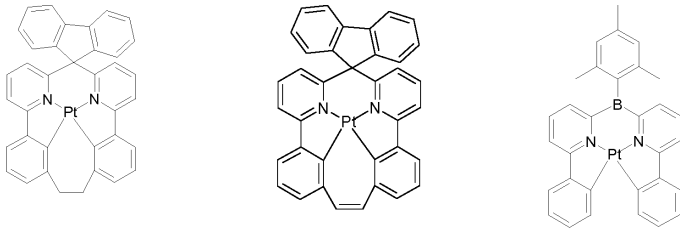
[0338]



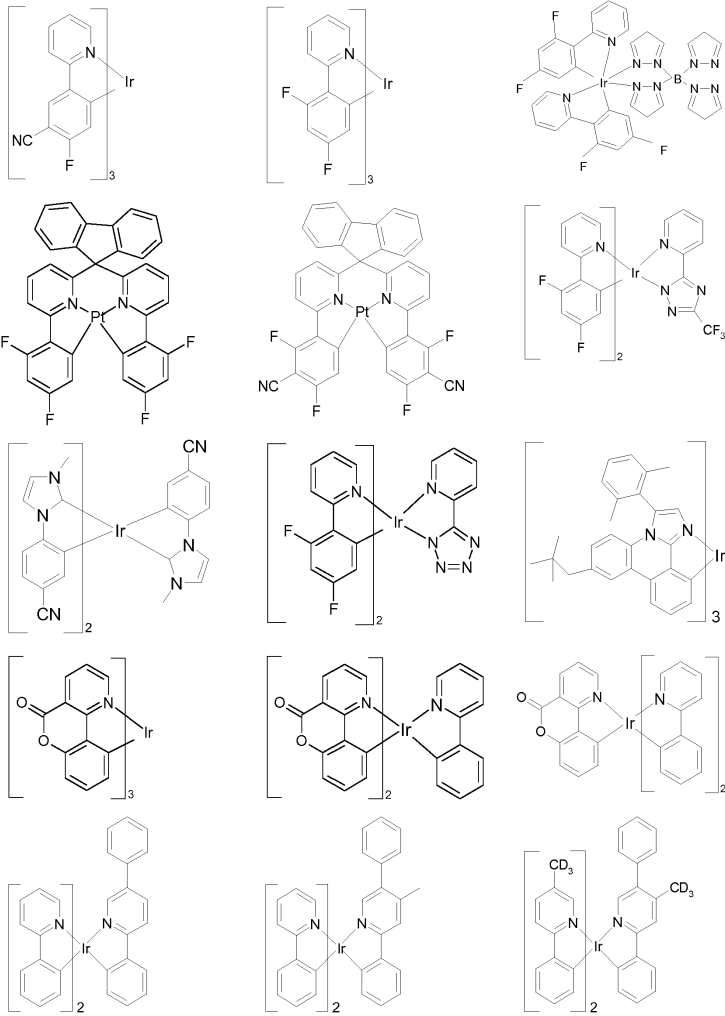
[0339]



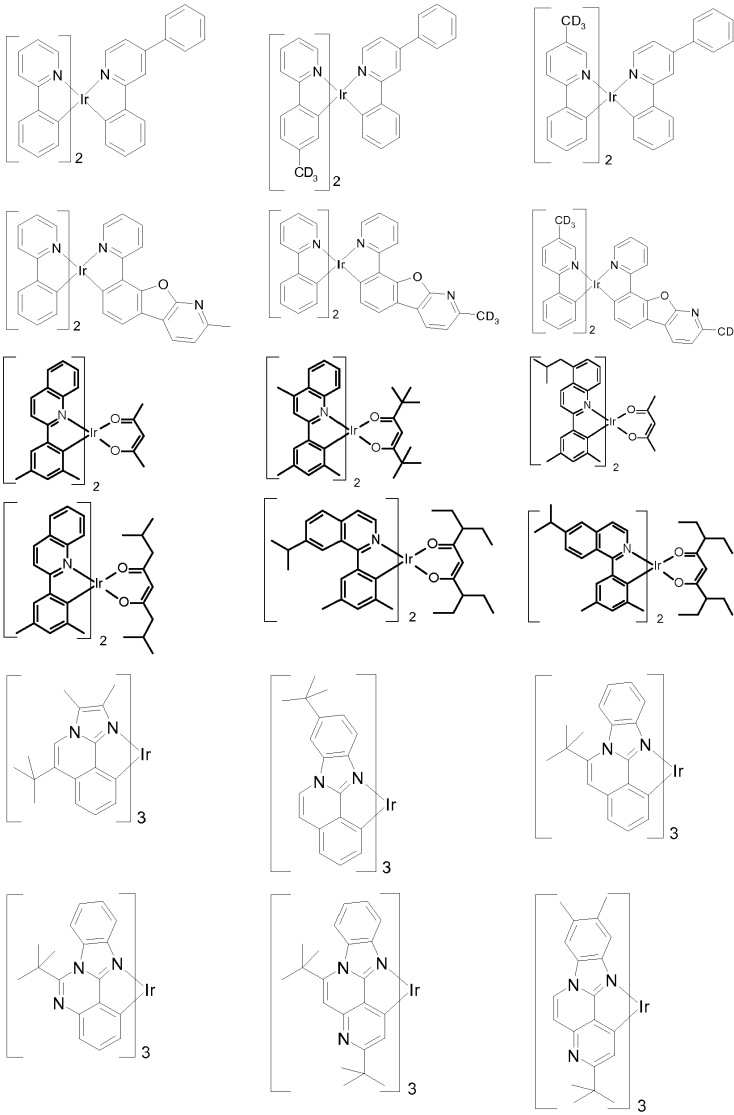
[0340]



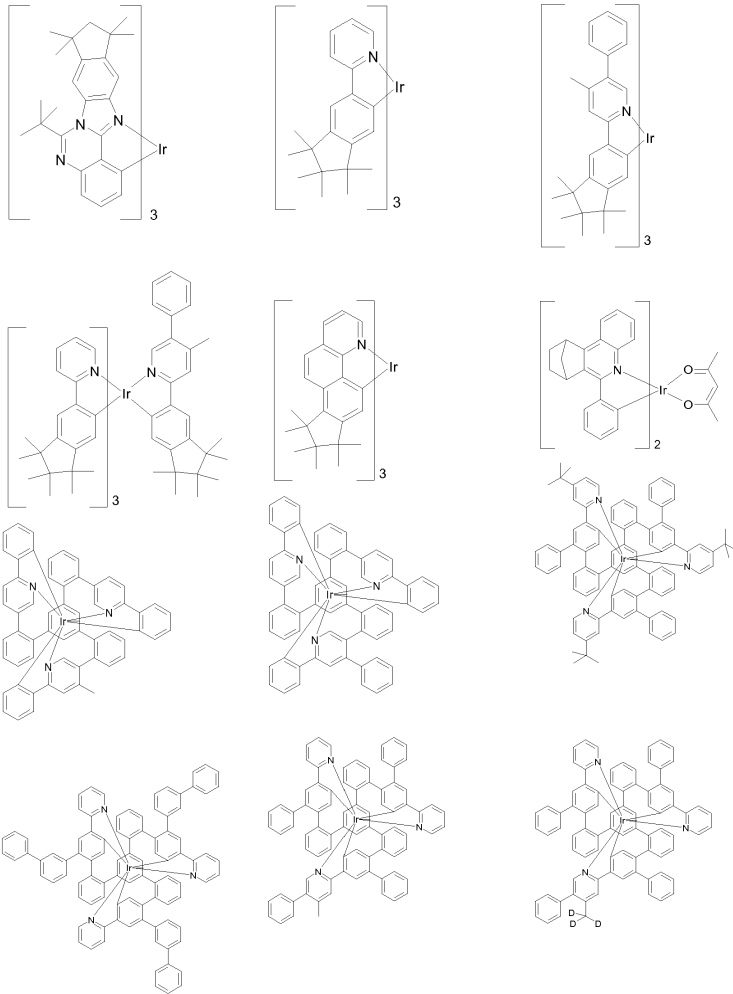
[0341]



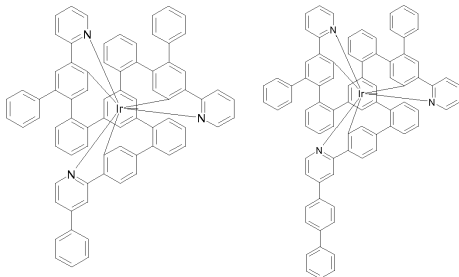
[0342]



[0343]



[0344]



[0345]

[0346]

바람직한 형광성 방출 화합물은 아릴아민의 부류에서 선택된다. 아릴아민 또는 방향족 아민은 본 발명의 맥락에서 질소에 직접 결합된 3 개의 치환된 또는 비치환된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 함유하는 화합물을 의미하는 것으로 이해된다. 바람직하게는, 이러한 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템들 중 적어도 하나는, 보다 바람직하게는 적어도 14 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 융합 고리 시스템이다. 이들의 바람직한 예는 방향족 안트라센아민, 방향족 안트라센디아민, 방향족 피렌아민, 방향족 피렌디아민, 방향족 크리센아민 또는 방향족 크리센디아민이다. 방향족 안트라센아민은 디아릴아미노기가, 바람직하게는 9 위치에, 안트라센기에 직접 결합되는 화합물을 의미하는 것으로 이해된다. 방향족 안트라센디아민은 2 개의 디아릴아미노기가, 바람직하게는 9,10 위치에서, 안트라센기에 직접 결합되는 화합물을 의미하는 것으로 이해된다. 방향족 피렌아민, 피렌디아민, 크리센아민 및 크리센디아민은 유사하게 정의되는데, 여기서 피렌기에서의 디아릴아미노기는 바람직하게는 1 위치 또는 1,6 위치에서 결합된다. 추가의 바람직한 방출 화합물은 인데노플루오렌아민 또는 -디아민 (예를 들어 WO 2006/108497 또는 WO 2006/122630 에 따름), 벤조인데노플루오렌아민 또는 -디아민 (예를 들어 WO 2008/006449 에 따름), 및 디벤조인데노플루오렌아민 또는 -디아민 (예를 들어 WO 2007/140847 에 따름), 및 WO 2010/012328 에 개시된 융합 아릴기를 갖는 인데노플루오렌 유도체이다. 마찬가지로 바람직한 것은 WO 2012/048780 및 WO 2013/185871 에 개시된 피렌아릴아민이다. 마찬가지로

바람직한 것은 WO 2014/037077에 개시된 벤조인테노플루오렌아민, WO 2014/106522에 개시된 벤조플루오렌아민 및 WO 2014/111269에 개시된 연장된 벤조인테노플루오렌이다.

[0347] 바람직하게는 형광 방출 화합물에 대해 유용한 매트릭스 재료는 다양한 성분 부류의 재료를 포함한다. 바람직한 매트릭스 재료는 올리고아릴렌의 부류 (예를 들어 EP 676461 에 따른 2,2',7,7'-테트라페닐스피로비플루오렌 또는 디나프틸안트라센), 특히 융합 방향족 기를 함유하는 올리고아릴렌의 부류, 올리고아릴렌비닐렌 (예를 들어 EP 676461 에 따른 DPVBi 또는 스피로-DPVBi), 폴리포달 (polypodal) 금속 착물 (예를 들어 WO 2004/081017 에 따름), 정공-전도 화합물 (예를 들어 WO 2004/058911 에 따름), 전자-전도 화합물, 특히 케톤, 포스핀 옥사이드, 술폭시드, 등 (예를 들어 WO 2005/084081 및 WO 2005/084082 에 따름), 아트로프이성질체 (예를 들어 WO 2006/048268 에 따름), 보론산 유도체 (예를 들어 WO 2006/117052 에 따름) 또는 벤즈안트라센 (예를 들어 WO 2008/145239 에 따름) 으로부터 선택된다. 특히 바람직한 매트릭스 재료는 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센 및/또는 피렌 또는 이들 화합물의 아트로프이성질체를 포함하는 올리고아릴렌의 부류, 올리고아릴렌비닐렌, 케톤, 포스핀 옥사이드 및 술폭시드로부터 선택된다. 매우 특히 바람직한 매트릭스 재료는 안트라센, 벤즈안트라센, 벤조페난트렌 및/또는 피렌 또는 이들 화합물의 아트로프이성질체를 포함하는 올리고아릴렌의 부류로부터 선택된다. 본 발명의 맥락에서 올리고아릴렌은 적어도 3 개의 아릴 또는 아릴렌기가 서로 결합되는 화합물을 의미하는 것으로 이해될 것이다. WO 2006/097208, WO 2006/131192, WO 2007/065550, WO 2007/110129, WO 2007/065678, WO 2008/145239, WO 2009/100925, WO 2011/054442 및 EP 1553154에 개시된 안트라센 유도체, 및 EP 1749809, EP 1905754 및 US 2012/0187826에 개시된 피렌 화합물이 추가로 바람직하다.

[0348] 인광 방출 화합물에 대한 바람직한 매트릭스 재료는, 화학식 (I) 의 화합물은 물론, 방향족 케톤, 방향족 포스핀 옥사이드 또는 방향족 술폭시드 또는 술폰 (예를 들어 WO 2004/013080, WO 2004/093207, WO 2006/005627 또는 WO 2010/006680 에 따름), 트리아릴아민, 카르바졸 유도체 (예를 들어, CBP (N,N-비스카르바졸릴비페닐) 또는 WO 2005/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527 또는 WO 2008/086851 에 기재된 카르바졸 유도체), 인돌로카르바졸 유도체 (예를 들어 WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따름), 인데노카르바졸 유도체 (예를 들어 WO 2010/136109, WO 2011/000455 또는 WO 2013/041176 에 따름), 아자카르바졸 유도체 (예를 들어 EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160 에 따름), 양극성 매트릭스 재료 (예를 들어 WO 2007/137725 에 따름), 실란 (예를 들어 WO 2005/111172 에 따름), 아자보롤 또는 보론산 에스테르 (예를 들어 WO 2006/117052 에 따름), 트리아진 유도체 (예를 들어 WO 2010/015306, WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따름), 아연 착물 (예를 들어 EP 652273 또는 WO 2009/062578 에 따름), 디아자실물 또는 테트라아자실물 유도체 (예를 들어 WO 2010/054729 에 따름), 디아자포스폴 유도체 (예를 들어 WO 2010/054730 에 따름), 가교 카르바졸 유도체 (예를 들어 US 2009/0136779, WO 2010/050778, WO 2011/042107, WO 2011/088877 또는 WO 2012/143080 에 따름), 트리페닐렌 유도체 (예를 들어 WO 2012/048781 에 따름), 또는 락탐 (예를 들어 WO 2011/116865 또는 WO 2011/137951 에 따름) 이다.

[0349] 본 발명의 전자 디바이스의 정공 주입 또는 정공 수송 층 또는 전자 차단층에서 또는 전자 수송층에서 이용될 수 있는 적합한 전하 수송 재료는, 예를 들어 Y. Shirota et al., Chem. Rev. 2007, 107(4), 953-1010 에 개시되어 있는 화합물, 또는 선행 기술에 따라 이들 층에서 사용되는 다른 재료이다.

[0350] 전자 수송층에 사용되는 재료는 전자 수송층에서 전자 수송 재료로서 종래 기술에 따라 사용되는 바와 같은 임의의 재료일 수도 있다. 특히 적합한 것은 알루미늄 착물, 예를 들어 Alq₃, 지르코늄 착물, 예를 들어 Zrq₄, 리튬 착물, 예를 들어 Liq, 벤즈이미다졸 유도체, 트리아진 유도체, 피리미딘 유도체, 피리딘 유도체, 피라진 유도체, 퀴놀살린 유도체, 퀴놀린 유도체, 옥사디아졸 유도체, 방향족 케톤, 락탐, 보란, 디아자포스폴 유도체 및 포스핀 옥사이드 유도체이다. 또한, 적합한 재료는, JP 2000/053957, WO 2003/060956, WO 2004/028217, WO 2004/080975 및 WO 2010/072300 에 개시된 바와 같은 위에 언급된 화합물의 유도체이다.

[0351] 전자 디바이스의 바람직한 캐소드는 낮은 일함수를 갖는 금속, 다양한 금속, 예를 들어 알칼리 토금속, 알칼리 금속, 주석 금속 또는 란타노이드 (예를 들어, Ca, Ba, Mg, Al, In, Mg, Yb, Sm 등) 로 구성되는 금속 합금 또는 다층 구조이다. 추가적으로 적합한 것은 알칼리 금속 또는 알칼리 토금속 및 은으로 구성되는 합금, 예를 들어 마그네슘 및 은으로 구성되는 합금이다. 다층 구조의 경우, 언급된 금속 이외에, 비교적 높은 일함수를 갖는 추가의 금속, 예를 들어 Ag 또는 Al 을 사용하는 것이 또한 가능하고, 이 경우 예를 들어 Ca/Ag, Mg/Ag 또는 Ba/Ag 와 같은 금속의 조합이 일반적으로 사용된다. 또한 금속성 캐소드와 유기 반도체 사이에 높은 유전 상수를 갖는 재료의 얇은 중간층을 도입하는 것이 바람직할 수도 있다. 이러한 목적을 위해 유용

한 재료의 예는 알칼리 금속 또는 알칼리 토금속 플루오라이드이고, 뿐만아니라 대응하는 산화물 또는 카보네이트 (예를 들어, LiF, Li₂O, BaF₂, MgO, NaF, CsF, Cs₂CO₃ 등) 이다. 또한 이 목적을 위해 리튬 퀴놀리네이트 (LiQ) 를 사용하는 것이 가능하다. 이러한 층의 층 두께는 바람직하게는 0.5 내지 5 nm 이다.

[0352] 바람직한 애노드는 높은 일함수를 갖는 재료이다. 바람직하게, 애노드는 진공에 대하여 4.5 eV 초과의 일함수를 갖는다. 첫째, 산화환원 전위가 높은 금속, 예를 들어 Ag, Pt 또는 Au 가 이 목적에 적합하다. 둘째, 금속/금속 산화물 전극들 (예를 들면, Al/Ni/NiO_x, Al/PtO_x) 이 또한 바람직할 수도 있다. 일부 적용의 경우, 전극 중 적어도 하나는, 유기 재료의 조사 (유기 태양 전지) 또는 광의 방출 (OLED, O-LASER) 을 가능하게 하기 위해 투명하거나 또는 부분적으로 투명해야만 한다. 여기서, 바람직한 애노드 재료는 전도성 혼합 금속 옥사이드이다. 인듐 주석 옥사이드 (ITO) 또는 이리듐 아연 옥사이드 (IZO) 가 특히 바람직하다. 전도성 도핑된 유기 재료, 특히 전도성 도핑된 폴리머가 또한 바람직하다. 추가로, 애노드는 또한 2 개 이상의 층, 예를 들어 ITO 의 내부층 및 금속 옥사이드, 바람직하게는 텅스텐 옥사이드, 몰리브덴 옥사이드 또는 바나듐 옥사이드의 외부층으로 이루어질 수 있다.

[0353] 나아가, 하나 이상의 층이 승화 공정에 의해 적용되고, 여기서 재료가 진공 승화 장치 내에서 통상적으로는 10⁻⁵ mbar 미만, 바람직하게는 10⁻⁶ mbar 미만의 초기 압력에서 증착되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 디바이스가 바람직하다. 그러나, 또한 초기 압력이 더 낮을 수 있다 (예를 들어 10⁻⁷ mbar 미만).

[0354] 마찬가지로, 하나 이상의 층이 OVPD (유기 기상 침착) 방법에 의해 또는 운반 기체 승화의 도움으로 적용되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 디바이스가 바람직하고, 여기서 재료는 10⁻⁵ mbar 내지 1 bar 의 압력에서 적용된다. 이러한 공정의 특정 경우는 OVJP (유기 증기 제트 프린팅) 공정인데, 여기서 재료는 노즐을 통해 직접 적용되고 그에 따라 구조화된다 (예를 들어, M. S. Arnold *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **2008**, *92*, 053301).

[0355] 나아가, 하나 이상의 층이, 예를 들어 스핀 코팅에 의해 용액으로부터 제조되거나, 또는 예를 들어 LITI (광 유도 열 이미지화, 열전사 인쇄), 잉크-젯 인쇄, 스크린 인쇄, 플렉소그래픽 인쇄, 오프셋 인쇄 또는 노즐 인쇄와 같은 임의의 원하는 인쇄 방법에 의해 제조되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 디바이스가 바람직하다. 이러한 목적을 위해서는 예를 들어 적합한 치환을 통해 수득되는 가용성 화합물이 필요하다. 이들은 일반적으로 유기 용매 중에서 매우 양호한 용해도를 갖기 때문에, 이들 공정은 또한 본 발명에 따른 화합물에 특히 적합하다.

[0356] 또한, 예를 들어 하나 이상의 층이 용액으로부터 적용되고, 하나 이상의 추가 층이 증착에 의해 적용되는 하이브리드 공정이 가능하다. 따라서, 예를 들어, 방출층은 용액 및 전자 수송층으로부터 증기 침착에 의해 적용될 수 있다.

[0357] 이들 공정은 일반적으로 당업자에게 알려져 있고, 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 유기 전계발광 디바이스에 진보성 없이 당업자에 의해 문제없이 적용될 수 있다.

[0358] 예를 들어 스핀-코팅에 의해 또는 인쇄 방법에 의해, 액상으로부터 본 발명의 화합물을 가공하기 위해서는, 본 발명의 화합물의 제형이 요구된다. 이들 제형은 예를 들어, 용액, 분산액 또는 에멀전일 수 있다. 이러한 목적을 위해, 둘 이상의 용매의 혼합물을 사용하는 것이 바람직할 수 있다. 적합하며 바람직한 용매는, 예를 들어, 톨루엔, 아니솔, o-, m- 또는 p-자일렌, 메틸 벤조에이트, 메시틸렌, 테트라린, 베라트롤, THF, 메틸-THF, THP, 클로로벤젠, 디옥산, 페녹시톨루엔, 특히 3-페녹시톨루엔, (-)-펜손, 1,2,3,5-테트라메틸벤젠, 1,2,4,5-테트라메틸벤젠, 1-메틸나프탈렌, 2-메틸벤조티아졸, 2-페녹시에탄올, 2-피롤리딘, 3-메틸아니솔, 4-메틸아니솔, 3,4-디메틸아니솔, 3,5-디메틸아니솔, 아세트페논, α-테르피네올, 벤조티아졸, 부틸 벤조에이트, 쿠멘, 시클로헥산올, 시클로헥사논, 시클로헥실벤젠, 데칼린, 도데실벤젠, 에틸 벤조에이트, 인단, 메틸 벤조에이트, NMP, p-시멘, 페넨톨, 1,4-디이소프로필벤젠, 디벤질 에테르, 디에틸렌 글리콜 부틸메틸 에테르, 트리에틸렌 글리콜 부틸메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디부틸 에테르, 트리에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르, 트리프로필렌 글리콜 디메틸 에테르, 테트라에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 2-이소프로필나프탈렌, 펜틸벤젠, 헥실벤젠, 헵틸벤젠, 옥틸벤젠, 1,1-비스(3,4-디메틸페닐)에탄 또는 이들 용매의 혼합물이다.

[0359] 따라서 본 발명은 적어도 하나의 화학식 (I) 또는 상기 표시된 바람직한 실시형태의 화합물 및 적어도 하나의

용매, 특히 유기 용매를 포함하는 제형, 특히 용액, 분산액 또는 미니-에멀전에 관한 것이다. 이러한 타입의 용액이 제조될 수 있는 방식은 당업자에게 공지되어 있고, 예를 들어 출원 WO 2002/072714 및 WO 2003/019694 및 이의 인용 문헌에 기재되어 있다.

[0360] 본 발명은 또한 적어도 하나의 화학식 (I) 또는 상기 표시된 바람직한 실시형태의 화합물 및 적어도 하나의 추가 화합물을 포함하는 혼합물에 관한 것이다. 추가 화합물은 예를 들어, 본 발명에 따른 화합물이 매트릭스 재료로서 사용되는 경우 형광 또는 인광 방출체일 수 있다. 혼합물은 추가의 매트릭스 재료로서 추가의 재료를 추가로 포함할 수 있다.

[0361] 본 발명은 또한 본 발명에 따른 화합물의 전자 디바이스에서의 용도에 관한 것이다. 바람직하게는, 본 발명에 따른 화합물은 전자 수송층에서 또는 상술 및 후술되는 방출층에서의 매트릭스 물질로서 사용된다.

[0362] 본 발명에 따른 화합물 및 이로부터 수득 가능한 전자 디바이스, 특히 유기 전계발광 디바이스는 종래 기술에 비해 다음의 놀라운 이점 중 하나 이상에 의해 구별된다:

[0363] 1. 본 발명에 따른 화합물을 사용하여 수득 가능한 전자 디바이스는, 종래의 화합물을 사용하여 수득되는 전자 디바이스와 비교하여, 매우 높은 안정성 및 매우 긴 수명을 나타낸다.

[0364] 2. 본 발명에 따른 화합물을 사용하여 수득 가능한 전자 디바이스는 높은 효율, 특히 높은 발광 효율 및 높은 외부 양자 효율을 나타낸다.

[0365] 3. 본 발명에 따른 화합물은 낮은 동작 전압을 제공한다.

[0366] 4. 본 발명에 따른 화합물은 통상의 방법을 사용하여 프로세싱될 수 있어, 이에 의해 비용 장점이 또한 달성될 수 있다.

[0367] 5. 본 발명의 화합물을 사용하여 수득 가능한 층은, 특히 코팅의 균일성과 관련하여, 탁월한 품질을 나타낸다.

[0368] 6. 본 발명에 따른 화합물은 종래의 방법을 사용하여 매우 신속하고 용이한 방식으로 제조될 수 있으므로, 이에 의해 비용 장점이 또한 달성될 수 있다.

[0369] 위에 언급된 이러한 이점은 다른 전자적 특성의 저하를 수반하지 않는다.

[0370] 본 발명에 설명된 실시형태들의 변형들은 본 발명의 범위내에 속한다는 것이 지적되어야 한다. 본 발명에 개시된 각각의 특징은 이것이 명백하게 배제되지 않는 경우, 동일하거나, 동등하거나 또는 유사한 목적으로 작용하는 대안적인 특징에 의해 대체될 수 있다. 따라서, 본 발명에 개시된 각각의 특징은, 다르게 언급되지 않는 경우, 포괄적인 시리즈의 예로서 또는 동등하거나 또는 유사한 특징으로서 간주되어진다.

[0371] 본 발명의 모든 특징은 특정한 특징 및/또는 단계가 상호 배제되지 않는 경우에는, 서로 임의의 방식으로 조합될 수 있다. 이것은 특히, 본 발명의 바람직한 특징에 적용된다. 동등하게, 비-필수 조합의 특징은 개별적으로 (조합되지 않고) 사용될 수 있다.

[0372] 게다가 많은 특징, 및 특히 본 발명의 바람직한 실시형태의 특징은 그 자체가 진보성이 있고, 단지 본 발명의 실시형태의 일부로서 간주되지 않아야 한다는 점에 유의해야 한다. 이들 특징의 경우, 명시적으로 청구되는 각각의 발명에 대한 대안으로서 또는 이에 부가하여 독립적인 보호가 추구될 수 있다.

[0373] 본 발명에 개시된 기술적 작용에 대한 교시는 요약될 수 있으며, 다른 실시예와 조합될 수 있다.

[0374] 하기의 실시예에 의해서 본 발명을 더욱 상세하게 설명하지만, 본 발명은 이것으로 한정되는 것은 아니다. 설명에 기초하여, 당업자는 개시된 범위 내에서 본 발명을 수행할 수 있고, 진보성 없이 본 발명에 따른 추가의 화합물을 제조할 수 있고 전자 디바이스에서 사용하거나 본 발명에 따른 방법을 사용할 수 있다.

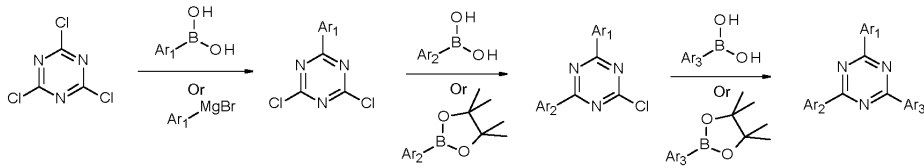
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0375] **작업예**

[0376] **스킴 1:**

[0377] **단계 1)**

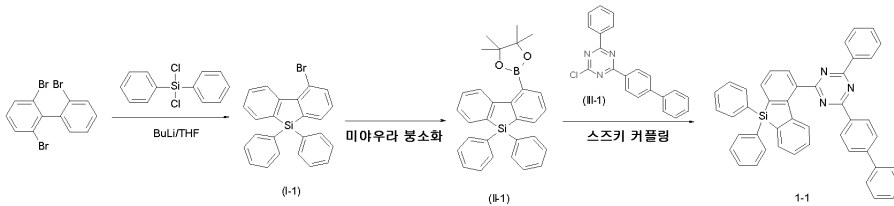
[0378] 제조를 위한 주요 합성 절차:



[0379]

[0380] 실시예 1:

[0381] 2-비페닐-4-일-4-(9,9-디페닐-9H-디벤조실롤-4-일)-6-페닐-[1,3,5]트리아진 (1-1) 및 유도체 (1-2) 내지 (1-21) 의 합성

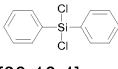
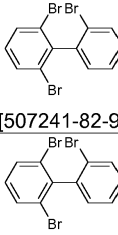
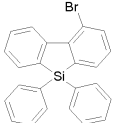
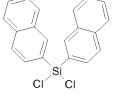
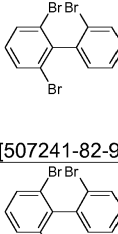
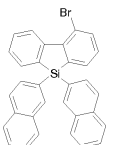
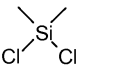
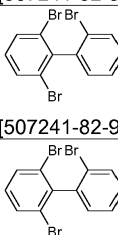
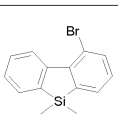
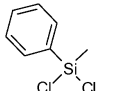
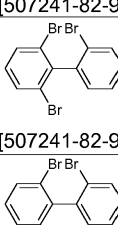
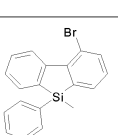
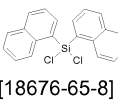
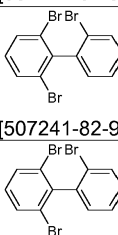
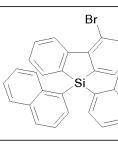
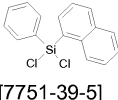
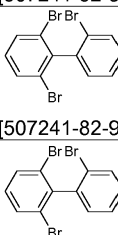
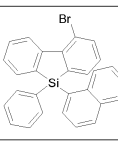
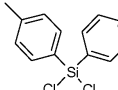
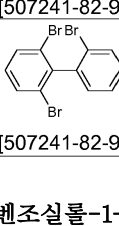
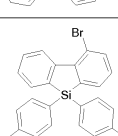


[0382]

[0383] 4'-브로모-9,9-디페닐-9H-9-실라플루오렌 (I-1) 의 합성

[0384] 10 g (25.58 mmol) 의 2,6,2'-트리브로모비페닐을 Ar 분위기 하에서 디에틸 에테르 120 mL 에 현탁시킨 후 -30 ~ 40°C 로 냉각시킨다. 22.51 mL (56.28 mmol/헥산 중 2.5 M) 의 n-BuLi 을 -30 ~ 40°C 에서 적가하고, 혼합물을 동일한 온도에서 1 시간 동안 교반한다. 다음, 디에틸 에테르 (30 mL) 중 디클로로디페닐실란 6.8 g (26.86 mmol) 을 -30 °C ~ 40 °C 에서 적가하고, 혼합물을 동일한 온도에서 3 시간 동안 교반한 다음 실온으로 가온시킨다. 반응 완료 후, 200 mL 의 H₂O 및 300 mL 의 디클로로메탄을 플라스크에 첨가한다. 유기 상을 분리시키고, 황산 마그네슘 상에서 건조시키고, 여과시킨 후 증발 건조시킨다. 잔류물을 300 mL 의 헵탄으로 세척한다. 수율은 4.2 g (10.16 mmol) 이며, 이는 이론치의 40 % 에 해당한다.

[0385] 하기 화합물들을 유사하게 합성한다:

실시예	디클로로실란	트리브로모 비페닐	생성물	수율
I-1	 [80-10-4]	 [507241-82-9]		40%
I-2	 [1796541-30-4]	 [507241-82-9]		34%
I-3	 [75-78-5]	 [507241-82-9]		37%
I-4	 [149-74-6]	 [507241-82-9]		42%
I-5	 [18676-65-8]	 [507241-82-9]		31%
I-6	 [7751-39-5]	 [507241-82-9]		38%
I-7	 [18414-38-5]	 [507241-82-9]		44%

[0386]

[0387] 2-(5,5-디페닐벤조[b][1]벤조실롤-1-일)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 (II-1) 의 합성

[0388]

Ar 분위기 하에서 화합물 (I-1) 4.0 g (9.68 mmol) 과 비스(피나콜라토)-디보란 3.0 g (11.61 mmol) 을 DMF (디메틸포름아미드) 26 mL 에 현탁시킨다. 칼륨 아세테이트 2.84 g (29.03 mmol) 을 플라스크에 첨가하고 Ar 분위기 하에서 교반한다. Pd(dppf)Cl₂ CH₂Cl₂ 0.23 g (0.29 mmol) 을 플라스크에 첨가하고 Ar 분위기 하에서 교반한다. 반응 혼합물을 80 °C에서 가열하고 Ar 하에서 16 시간 동안 교반한다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 유기상을 물로 켄칭하고 100 mL의 EA (에틸 아세테이트)로 3 회 추출하고 유기상을 물로 3 회 세척하고, 황산 마그네슘 상에서 건조시키고, 여과한 후 증발 건조시킨다. 잔류물을 EA 및 헵탄을 이용한 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제한다. 수율은 4.0 g (8.51 mmol) 이며, 이는 이론치의 88 % 에 해당한다.

[0389] 하기 화합물을 유사하게 합성한다:

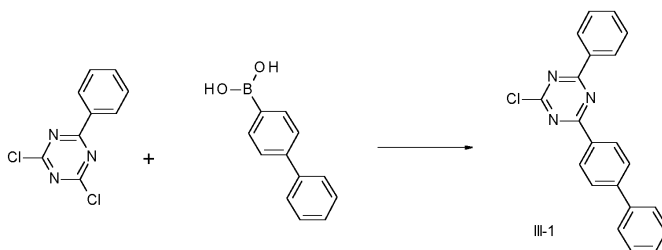
실시예	브롬화물	비스(피나콜라토) 디보란	생성물	수율
II-1				88%
II-2				68%
II-3				77%
II-4				80%

[0390]

II-5				65%
II-6				60%
II-7				80%

[0391]

[0392] 2-클로로-4-페닐-6-(4-페닐페닐)-1,3,5-트리아진 (III-1) 의 합성

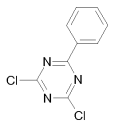
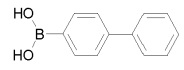
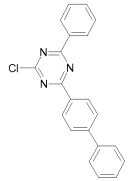
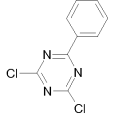
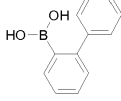
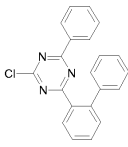
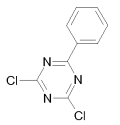
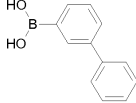
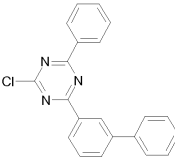
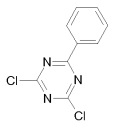
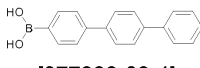
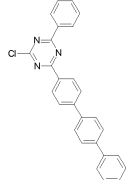
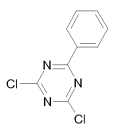
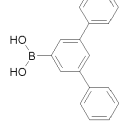
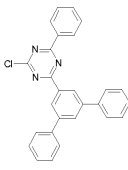
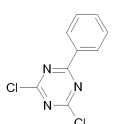
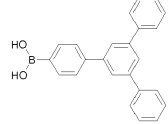
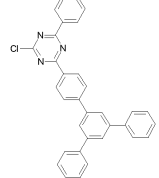


[0393]

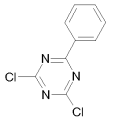
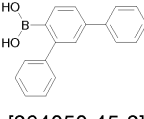
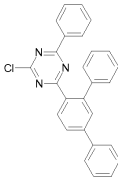
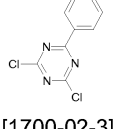
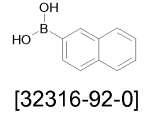
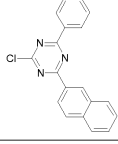
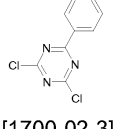
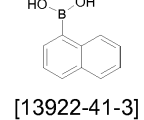
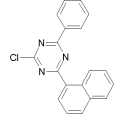
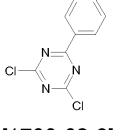
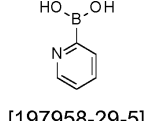
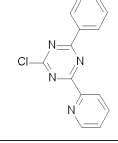
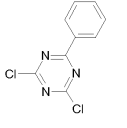
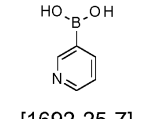
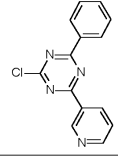
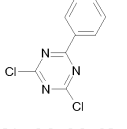
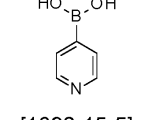
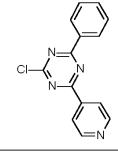
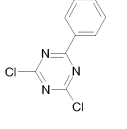
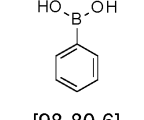
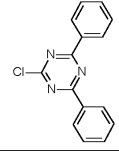
[0394] 4-비페닐보론산 30g (150 mmol) 및 2,4-디클로로-6-페닐-[1,3,5]-트리아진 47.9 g (210 mmol) 을 Ar 분위기하에서 1,4-디옥산 420 mL, 톨루엔 210 mL 및 420 mL의 H₂O 에 현탁시킨다. 탄산 나트륨 17.6 g (166 mmol) 을 플라스크에 첨가하고 Ar 분위기 하에서 교반한다. 1.7 g (0.15 mmol) 의 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐을 플라스크에 첨가한다. 반응 혼합물을 60 °C에서 가열하고 Ar에서 16 시간 동안 교반한다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 유기상을 물로 켄칭하고 200 mL의 에틸 아세테이트로 3 회 추출한다. 유기상을 분리시키고, 황산 마그네슘 상에서 건조시키고, 여과시킨 후 증발 건조시킨다. 잔류물을 EtOH 250 mL로 세척한다. 수율은 41 g (119 mmol) 이며, 이는 이론치의 78 % 에 해당한다.

[0395]

하기 화합물들을 유사하게 합성한다:

실시예	염화물	보론산	생성물	전체 수율
III-1	 [1700-02-3]	 [5122-94-1]		78%
III-2	 [1700-02-3]	 [4688-76-0]		52%
III-3	 [1700-02-3]	 [5122-95-2]		75%
III-4	 [1700-02-3]	 [877993-09-4]		88%
III-5	 [1700-02-3]	 [128388-54-5]		70%
III-6	 [1700-02-3]	 [491612-72-7]		75%

[0396]

III-7	 [1700-02-3]	 [364050-45-3]		46%
III-8	 [1700-02-3]	 [32316-92-0]		82%
III-9	 [1700-02-3]	 [13922-41-3]		85%
III-10	 [1700-02-3]	 [197958-29-5]		88%
III-11	 [1700-02-3]	 [1692-25-7]		81%
III-12	 [1700-02-3]	 [1692-15-5]		85%
III-13	 [1700-02-3]	 [98-80-6]		87%

[0397]

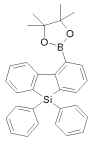
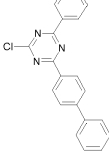
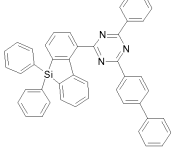
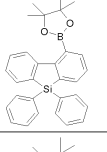
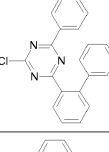
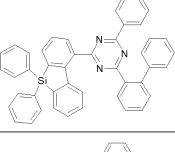
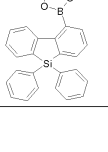
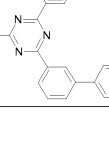
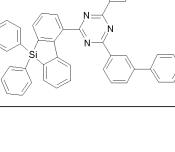
[0398]

2-(5,5-디페닐벤조[b][1]벤조실롤-1-일)-4-페닐-6-(4-페닐페닐)-1,3,5-트리아진 (1-1) 의 합성

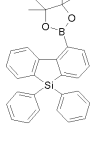
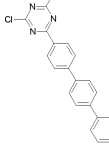
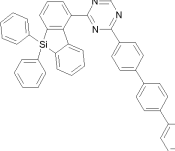
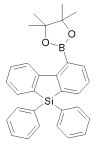
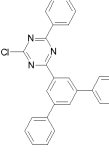
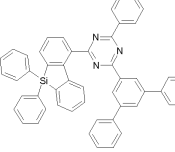
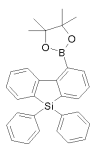
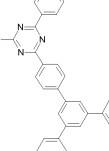
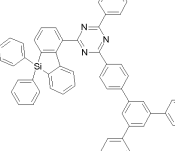
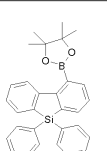
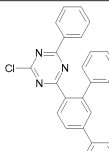
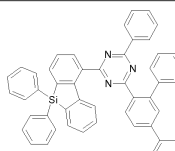
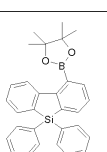
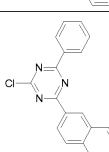
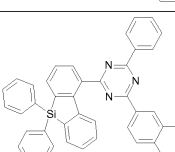
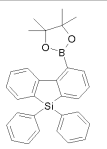
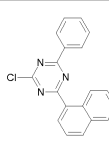
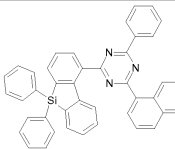
[0399]

화합물 (II-1) 4.0 g (8.69 mmol) 및 화합물 (III-1) 2.98 g (8.69 mmol) 을 Ar 분위기하에서 40 mL의 1,4-디옥산, 30 mL의 톨루엔 및 40 mL의 H₂O 에 현탁시킨다. 탄산 나트륨 2.02 g (19.11 mmol) 을 플라스크에 첨가하고 Ar 분위기 하에서 교반한다. 0.3 g (0.26 mmol) 의 테트라키스(트리페닐-포스핀) 팔라듐을 플라스크에 첨가한다. 반응 혼합물을 110 °C에서 가열하고 Ar에서 16 시간 동안 교반한다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 유기 상을 물로 퀀칭시키고, 100 mL 의 톨루엔으로 3 회 추출하고, 황산 마그네슘으로 건조시키고, 여과시킨 후 증발 건조시킨다. 잔류물을 에틸 아세테이트로 세척한다. 수율은 4.06 g (6.54 mmol) 이며, 이는 이론치의 75 % 에 해당한다.

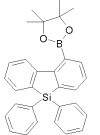
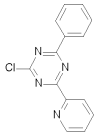
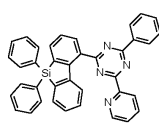
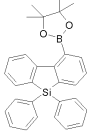
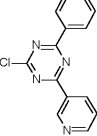
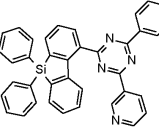
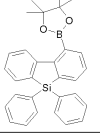
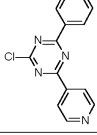
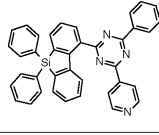
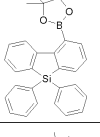
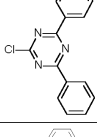
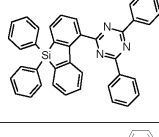
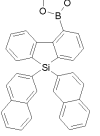
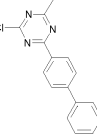
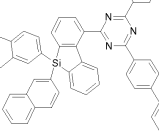
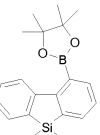
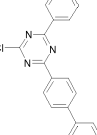
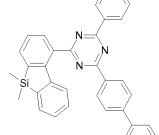
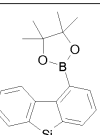
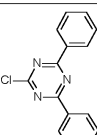
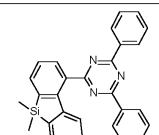
[0400] 하기 화합물들을 유사하게 합성한다:

실시예	보론산 에스테르	염화물	생성물	수율
1-1				75%
1-2				63%
1-3				70%

[0401]

1-4				57%
1-5				72%
1-6				51%
1-7				69%
1-8				79%
1-9				61%

[0402]

1-10				86%
1-11				82%
1-12				87%
1-13				88%
1-14				70%
1-15				75%
1-16				81%

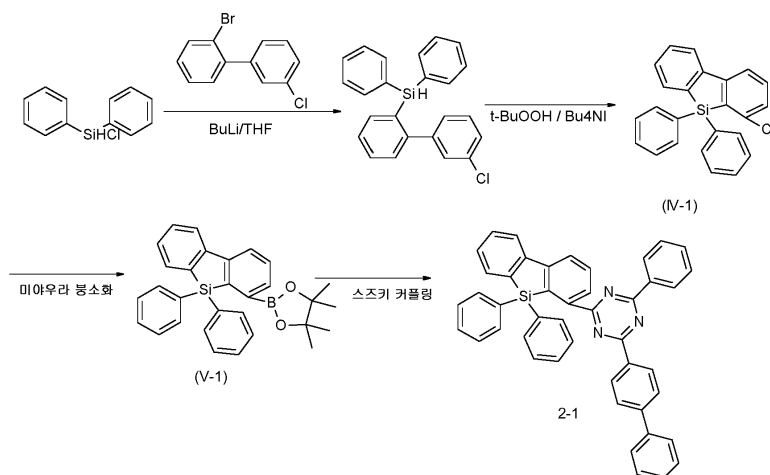
[0403]

1-17				66%
1-18				69%
1-19				62%
1-20				55%
1-21				69%

[0404]

[0405] 실시예 2:

[0406] 2-(5,5-디페닐벤조[b][1]벤조실롤-4-일)-4-페닐-6-(4-페닐페닐)-1,3,5-트리아진 (2-1) 및 유도체 (2-2) 내지 (2-8) 의 합성



[0407]

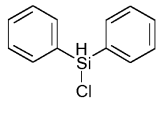
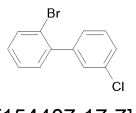
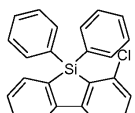
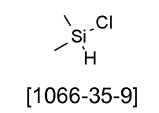
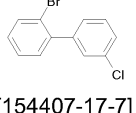
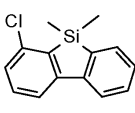
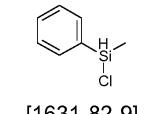
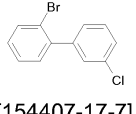
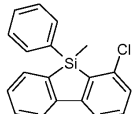
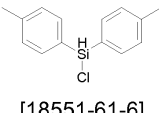
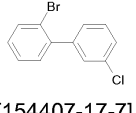
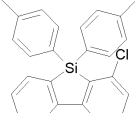
[0408] 1-클로로-9,9-디페닐-7H-9-실라플루오렌 (IV-1) 의 합성

[0409]

Ar 분위기 하에서 2-브로모-3'-클로로비페닐 8.59 g (32.1 mmol) 을 THF 150 mL 에 용해한 후 -78℃ 로 냉각시킨다. 24 mL (38 mmol/헥산 중 1.6 M) 의 n-BuLi 을 -78℃ 에서 적가하고, 혼합물을 동일한 온도에서 30 분 동안 교반한다. 다음, 디에틸 에테르 (100 mL) 중 디클로로디페닐실란 7.5 ml (38 mmol) 을 -78℃ 에서 적가하고, 혼합물을 동일한 온도에서 3 시간 동안 교반한 다음 실온으로 가운시킨다. 반응 완료 후, 혼합물을 수중 NH₄Cl 의 포화 수용액으로 켄칭시킨다. 디에틸 에테르 (3 × 100 mL) 로 추출한 후, 황산 마그네슘 상에서 건조시키고, 여과한 후 증발 건조시킨다. 잔류물을 300 mL 의 헵탄으로 세척한다. 수율은

10 g (27 mmol) 이며, 이는 이론치의 83 % 에 해당한다. 테트라부틸암모늄 요오다이드 (90 mg, 25.1 mmol, 1 mol %) 및 tert-부틸 히드رو퍼옥사이드 용액 (15 mL/데칸 중 5.5 M, 0.83 mmol, 3.3 eq.) 을 톨루엔 (200 mL) 중의 2-(3'-클로로) 비페닐디페닐실란 8.89 g (25.1 mmol) 의 용액에 첨가한다. 실온에서 5 분 동안 교반한 후, 혼합물을 90℃ 로 가열하고, 이 온도에서 24 시간 동안 교반하고, 실온으로 냉각시킨다. 디클로로메탄으로 용출시키는 실리카의 숯 패드를 통한 여과, 미정제 1H-NMR 분석 및 진공에서의 농축 후, 잔류물을 분별 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적하는 실라플루오렌 (IV-1) 을 수득한다. 분석을 위해, 화합물을 디클로로메탄 및 아세토니트릴로부터 재결정화한다. 수율은 3.8 g (10.3 mmol) 이며, 이는 이론치의 41 % 에 해당한다.

[0410] 하기 화합물들을 유사하게 합성한다:

실시에	클로로실란	2-브로모-3'-클로로비페닐	생성물	수율
IV-1	 [1631-83-0]	 [154407-17-7]		41%
IV-2	 [1066-35-9]	 [154407-17-7]		25%
IV-3	 [1631-82-9]	 [154407-17-7]		31%
IV-4	 [18551-61-6]	 [154407-17-7]		28%

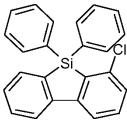
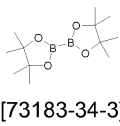
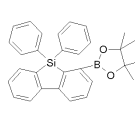
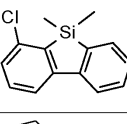
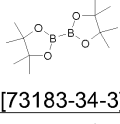
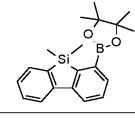
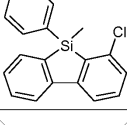
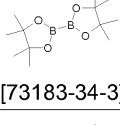
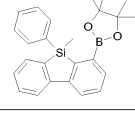
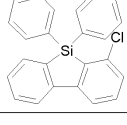
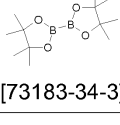
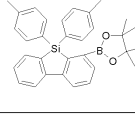
[0411]

[0412] 2-(9,9-디페닐-9H-디벤조실롤-1-일)-4,4,5,5-테트라메틸-[1,3,2]디옥사보롤란 (V-1) 의 합성

[0413]

Ar 분위기 하에서 화합물 (IV-1) 3.8 g (10.30 mmol) 과 비스(피나콜라토)-디보란 3.1g (12.36 mmol) 을 DMF 26 mL 에 현탁시킨다. 칼륨 아세테이트 3.1 g (30.90 mmol) 을 플라스크에 첨가하고 Ar 분위기 하에서 교반한다. Pd(dppf)Cl₂ CH₂Cl₂ 0.25 g (0.31 mmol) 을 플라스크에 첨가하고 Ar 분위기 하에서 교반한다. 반응 혼합물을 80 °C에서 가열하고 Ar 하에서 16 시간 동안 교반한다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 유기상을 물로 킨칭하고 100 mL의 EA 로 3 회 추출하고 유기상을 물로 3 회 세척하고, 황산 마그네슘 상에서 건조시키고, 여과한 후 증발 건조시킨다. 잔류물을 EA 및 헵탄을 이용한 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제한다. 수율은 4.0 g (8.75 mmol) 이며, 이는 이론치의 85 % 에 해당한다.

[0414] 하기 화합물들을 유사하게 합성한다:

실시예	염화물	비스(피나콜라토) 디보란	생성물	수율
V-1		 [73183-34-3]		85%
V-2		 [73183-34-3]		62%
V-3		 [73183-34-3]		68%
V-4		 [73183-34-3]		77%

[0415]

[0416] 2-(5,5-디페닐벤조[b][1]벤조실롤-4-일)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 (2-1) 의 합성

[0417] 화합물 (V-1) 4.0 g (8.75 mmol) 및 화합물 (III-1) 3.01 g (8.75 mmol) 을 Ar 분위기하에서 40 mL의 1,4-디옥산, 30 mL의 톨루엔 및 40 mL의 H₂O 에 현탁시킨다. 탄산 나트륨 2.04 g (19.25 mmol) 을 플라스크에 첨가하고 Ar 분위기 하에서 교반한다. 0.3 g (0.26 mmol) 의 테트라키스(트리페닐 포스핀) 팔라듐을 플라스크에 첨가한다. 반응 혼합물을 110 °C에서 가열하고 Ar 하에서 16 시간 동안 교반한다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 유기상을 물로 쉐킷시키고, 100 mL 의 톨루엔으로 3 회 추출하고, 황산 마그네슘으로 건조시키고, 여과시킨 후 증발 건조시킨다. 잔류물을 에틸 아세테이트로 세척한다. 수율은 4.2 g (6.56 mmol) 이며, 이는 이론치의 75 % 에 해당한다.

[0418] 하기 화합물들을 유사하게 합성한다:

실시예	보론산 에스테르	염화물	생성물	수율
2-1				75%
2-2				72%
2-3				62%
2-4				68%
2-5				75%

[0419]

2-6				77%
2-7				69%
2-8				71%

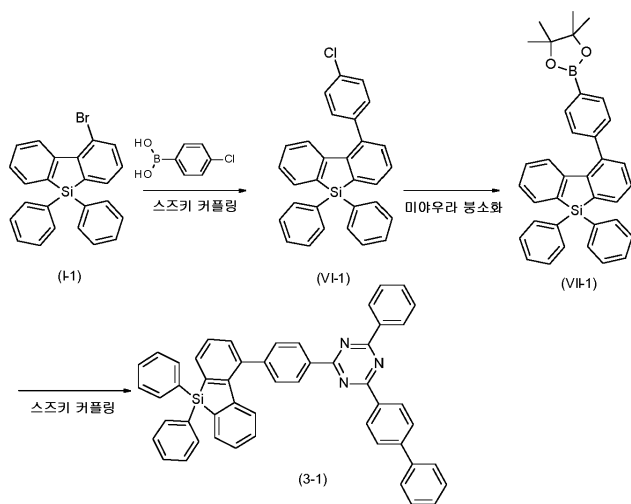
[0420]

[0421]

실시예 3

[0422]

2-[4-(5,5-디페닐벤조[b][1]벤조실롤-1-일)페닐]-4-페닐-6-(4-페닐페닐)-1,3,5-트리아진 (3-1) 및 유도체 (3-2) 내지 (3-10) 의 합성



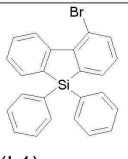
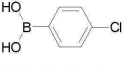
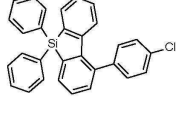
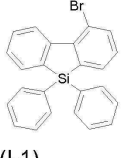
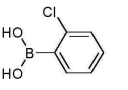
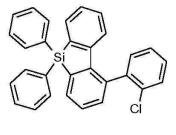
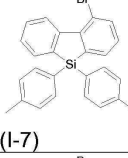
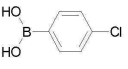
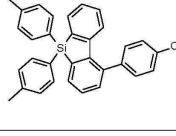
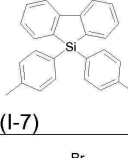
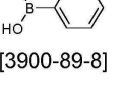
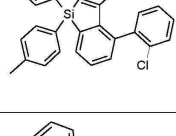
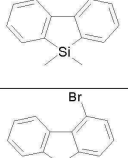
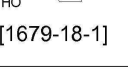
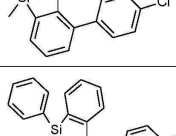
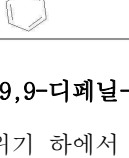
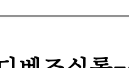
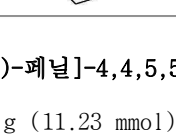
[0423]

[0424] **4-(4-클로로페닐)-9,9-디페닐-7H-9-실라플루오렌 (VI-1) 의 합성**

[0425]

27.7 g (67 mmol) 의 화합물 (I-1), 11.1 g (71 mmol) 의 4-클로로-페닐 보론산 및 14.3 g (135 mmol) 의 탄산 나트륨을 500 mL 의 EtOH, 500 mL 의 H₂O 및 200 mL 의 톨루엔에 현탁시키고, Ar 분위기 하에서 교반한다. 2.3 g (2 mmol) 의 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐을 플라스크에 첨가한다. 반응 혼합물을 110 °C에서 가열하고 Ar 하에서 16 시간 동안 교반한다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 반응 혼합물을 켄칭하다. 유기 상을 분리시키고, 200 mL 의 물로 3 회 세척하고, 황산 마그네슘으로 건조시키고, 여과시킨 후 증발 건조시킨다. 잔류물을 DCM/헵탄 (1:10) 의 혼합물을 사용하는 실리카 겔 상의 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제한다. 수율은 21.7 g (49 mmol) 이며, 이는 이론치의 73 % 에 해당한다.

[0426] 하기 화합물들을 유사하게 합성한다:

실시예	브롬화물	아릴 보론산	생성물	수율
VI-1	 (I-1)	 [1679-18-1]		73%
VI-2	 (I-1)	 [3900-89-8]		65%
VI-3	 (I-7)	 [1679-18-1]		67%
VI-4	 (I-7)	 [3900-89-8]		69%
VI-5		 [1679-18-1]		75%
VI-6		 [1679-18-1]		77%

[0427]

[0428] 2-[4-(9,9-디페닐-9H-디벤조실롤-4-일)-페닐]-4,4,5,5-테트라메틸-[1,3,2] 다이옥사보롤란 (VII-1) 의 합성

[0429]

Ar 분위기 하에서 화합물 (VI-1) 5.0 g (11.23 mmol) 과 비스(피나콜라토)-디보란 3.4 g (13.48 mmol) 을 DMF 30 mL 에 현탁시킨다. 칼륨 아세테이트 2.62 g (24.7 mmol) 을 플라스크에 첨가하고 Ar 분위기 하에서 교반한다. Pd(dppf)Cl₂ CH₂Cl₂ 0.39 g (0.33 mmol) 을 플라스크에 첨가하고 Ar 분위기 하에서 교반한다. 반응 혼합물을 80 °C에서 가열하고 Ar 하에서 16 시간 동안 교반한다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 유기상을 물로 킨칭하고 100 mL의 EA 로 3 회 추출하고 유기상을 물로 3 회 세척하고, 황산 마그네슘 상에서 건조시키고, 여과한 후 증발 건조시킨다. 잔류물을 EA 및 헵탄을 이용한 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제한다. 수율은 4.9 g (9.2 mmol) 이며, 이는 이론치의 82 %에 해당한다.

[0430] 하기 화합물들을 유사하게 합성한다:

실시예	염화물	비스(피나콜라토) 디보란	생성물	수율
VII-1				82%
VII-2				65%
VII-3				67%
VII-4				62%
VII-5				76%
VII-6				77%

[0431]

[0432] 2-[4-(5,5-디페닐벤조[b][1]벤조실롤-1-일)페닐]-4-페닐-6-(4-페닐페닐)-1,3,5-트리아진 (3-1) 의 합성

[0433]

화합물 (VII-1) 4.0 g (8.38 mmol) 및 화합물 (III-1) 2.88 g (8.38 mmol) 을 Ar 분위기하에서 40 mL의 1,4-디옥산, 30 mL의 톨루엔 및 40 mL의 H₂O 에 현탁시킨다. 탄산 나트륨 1.95 g (18.43 mmol) 을 플라스크에 첨가하고 Ar 분위기 하에서 교반한다. 0.3 g (0.25 mmol) 의 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐을 플라스크에 첨가한다. 반응 혼합물을 110 °C에서 가열하고 Ar 하에서 16 시간 동안 교반한다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 유기상을 물로 켄칭시키고, 100 mL 의 톨루엔으로 3 회 추출하고, 황산 마그네슘으로 건조시키고, 여과시킨 후 증발 건조시킨다. 잔류물을 에틸 아세테이트로 세척한다. 수율은 4.45 g (6.20 mmol) 이며, 이는 이론치의 74 % 에 해당한다.

[0434] 하기 화합물들을 유사하게 합성한다:

실시예	보론산 에스테르	염화물	생성물	수율
3-1				74%
3-2				78%
3-3				80%
3-4				79%
3-5				77%

[0435]

3-6				81%
3-7				83%
3-8				78%
3-9				75%
3-10				80%

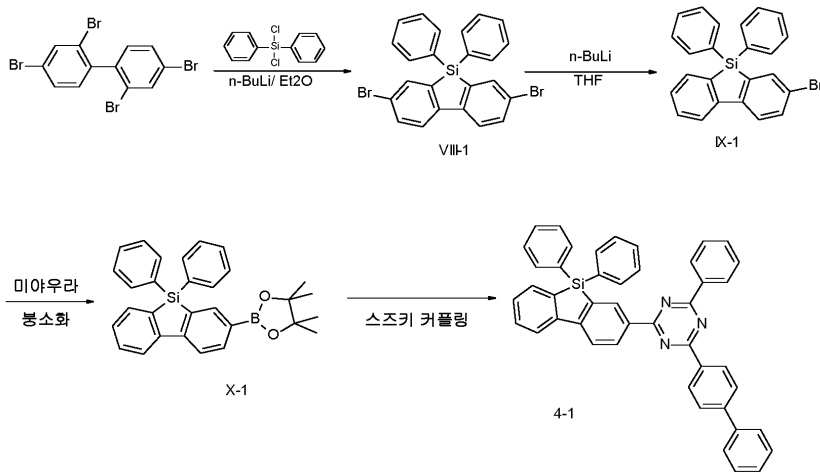
[0436]

[0437]

실시예 4

[0438]

2-(5,5-디페닐벤조[b][1]벤조실롤-3-일)-4-페닐-6-(4-페닐페닐)-1,3,5-트리아진 (4-1) 및 유도체 (4-2) 내지 (4-17) 의 합성



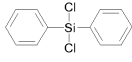
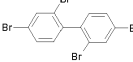
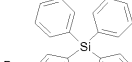
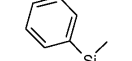
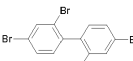
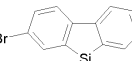
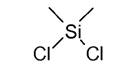
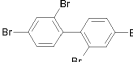
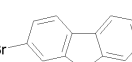
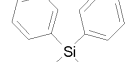
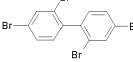
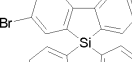
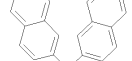
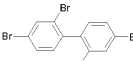
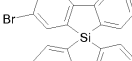
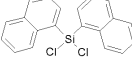
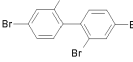
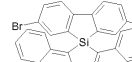
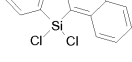
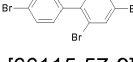
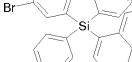
[0439]

[0440] 3,7-디브로모-5,5-디페닐-벤조[b][1]벤조실롤 (VIII-1) 의 합성

[0441]

Ar 분위기 하에서의 Et_2O 1000 mL 중의 2,4,2',4'-테트라브로모-비페닐 26 g (55.34 mmol) 을 -78°C 에서 냉각시킨다. 46.4 mL (116 mmol/헥산 중 2.5 M) 의 $n\text{-BuLi}$ 을 -78°C 에서 적가하고, 혼합물을 동일한 온도에서 1 시간 동안 교반한다. 다음, 디에틸 에테르 (100 mL) 중 디클로로디페닐실란 14 g (55.34 mmol) 을 -78°C 에서 적가하고, 혼합물을 동일한 온도에서 1 시간 동안 교반한 다음 12 시간 동안 실온으로 가온시킨다. 반응 완료 후, 혼합물을 물로 켄칭시킨다. EA (3×400 mL) 로 추출한 후, 황산 마그네슘 상에서 건조시키고, 여과한 후 증발 건조시킨다. 잔류물을 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제한다. 수율은 15 g (30.47 mmol) 이며, 이는 이론치의 54 % 에 해당한다.

[0442] 하기 화합물들을 유사하게 합성한다:

실시예	디클로로실란	테트라브롬비페닐	생성물	수율
VIII-1	 [80-10-4]	 [66115-57-9]		55%
VIII-2	 [149-74-6]	 [66115-57-9]		48%
VIII-3	 [75-78-5]	 [66115-57-9]		38%
VIII-4	 [18414-38-5]	 [66115-57-9]		48%
VIII-5	 [1796541-30-4]	 [66115-57-9]		31%
VIII-6	 [18676-65-8]	 [66115-57-9]		37%
VIII-7	 [7751-39-5]	 [66115-57-9]		30%

[0443]

[0444]

3-브로모-5,5-디페닐-벤조[b][1]벤조실롤 (IX-1) 의 합성

[0445]

Ar 분위기 하에서의 THF 300 mL 중의 화합물 (VIII-1) 15 g (30.49 mmol) 을 -78°C 에서 냉각시킨다. 12.2 mL (30.49 mmol/헥산 중 2.5 M) 의 n-BuLi 을 -78°C 에서 적가하고, 혼합물을 동일한 온도에서 2 시간 동안 교반한다. 반응 완료 후, 혼합물을 물로 킨칭시킨다. EA (3 × 400 mL) 로 추출한 후, 황산 마그네슘 상에서 건조시키고, 여과한 후 증발 건조시킨다. 잔류물을 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제한다. 수율은 7 g (16.93 mmol) 이며, 이는 이론치의 55 % 에 해당한다.

[0446] 하기 화합물들을 유사하게 합성한다:

실시예	디브로모-디벤조실롤	생성물	수율
IX-1			55%
IX-2			51%
IX-3			47%
IX-4			50%
IX-5			45%
IX-6			42%
IX-7			55%

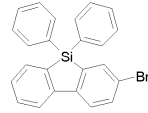
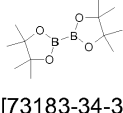
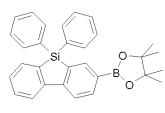
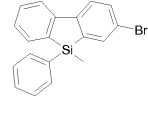
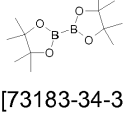
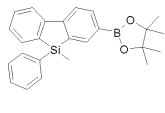
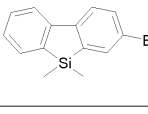
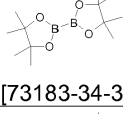
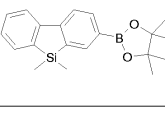
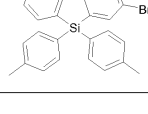
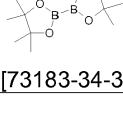
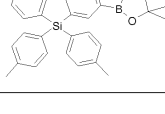
[0447]

[0448] 2-(5,5-디페닐벤조[b][1]벤조실롤-3-일)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 (X-1) 의 합성

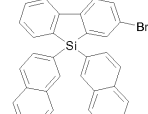
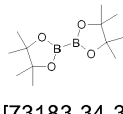
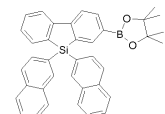
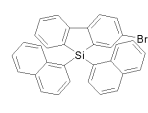
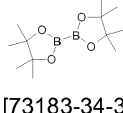
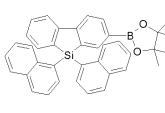
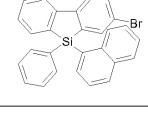
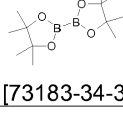
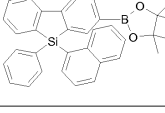
[0449]

Ar 분위기 하에서 화합물 (IX-1) 7 g (16.93 mmol) 과 비스(피나콜라토)-디보란 5.12 g (20.31 mmol) 을 DMF 100 mL 에 현탁시킨다. 칼륨 아세테이트 3.57 g (33.69 mmol) 을 플라스크에 첨가하고 Ar 분위기 하에서 교반한다. Pd(dppf)Cl₂ CH₂Cl₂ 0.59 g (0.50 mmol) 을 플라스크에 첨가하고 Ar 분위기 하에서 교반한다. 반응 혼합물을 80 °C에서 가열하고 Ar 하에서 16 시간 동안 교반한다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 유기상을 물로 켄칭하고 200 mL의 EA 로 3 회 추출하고 유기상을 물로 3 회 세척하고, 황산 마그네슘 상에서 건조시키고, 여과한 후 증발 건조시킨다. 잔류물을 EA 및 헵탄을 이용한 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제한다. 수율은 5.8 g (12.69 mmol) 이며, 이는 이론치의 75 % 에 해당한다.

[0450] 하기 화합물들을 유사하게 합성한다:

실시예	브로모- 디벤조실롤	비스(피나콜라토) 디보란	생성물	수율
X-1		 [73183-34-3]		75%
X-2		 [73183-34-3]		69%
X-3		 [73183-34-3]		74%
X-4		 [73183-34-3]		68%

[0451]

X-5		 [73183-34-3]		64%
X-6		 [73183-34-3]		61%
X-7		 [73183-34-3]		72%

[0452]

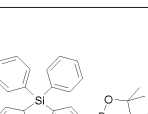
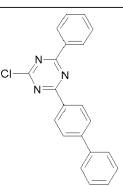
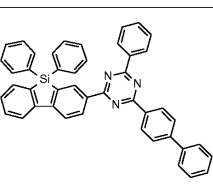
[0453] 2-(5,5-디페닐벤조[b][1]벤조실롤-3-일)-4-페닐-6-(4-페닐페닐)-1,3,5-트리아진 (4-1) 의 합성

[0454]

화합물 (X-1) 5.8 g (12.69 mmol) 및 화합물 (III-1) 4.36 g (12.69 mmol) 을 Ar 분위기하에서 50 mL의 1,4-옥산, 40 mL의 톨루엔 및 50 mL의 H₂O 에 현탁시킨다. 탄산 나트륨 2.95 g (27.91 mmol) 을 플라스크에 첨가하고 Ar 분위기 하에서 교반한다. 0.43 g (0.38 mmol) 의 테트라키스(트리페닐-포스핀) 팔라듐을 플라스크에 첨가한다. 반응 혼합물을 110 °C에서 가열하고 Ar 하에서 16 시간 동안 교반한다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 유기상을 물로 켄칭시키고, 200 mL 의 톨루엔으로 3 회 추출하고, 황산 마그네슘으로 건조시키고, 여과시킨 후 증발 건조시킨다. 잔류물을 에틸 아세테이트로 세척한다. 수율은 6.51 g (10.15 mmol) 이며, 이는 이론치의 80 % 에 해당한다.

[0455]

하기 화합물들을 유사하게 합성한다:

실시예	보론산 에스테르	염화물	생성물	수율
4-1				74%

[0456]

4-2				78%
4-3				80%
4-4				79%
4-5				
4-6				80%
4-7				81%
4-8				77%

[0457]

4-9				81%
4-10				83%
4-11				77%
4-12				65%
4-13				70%
4-14				45%

[0458]

4-15				48%
4-16				52%
4-17				55%

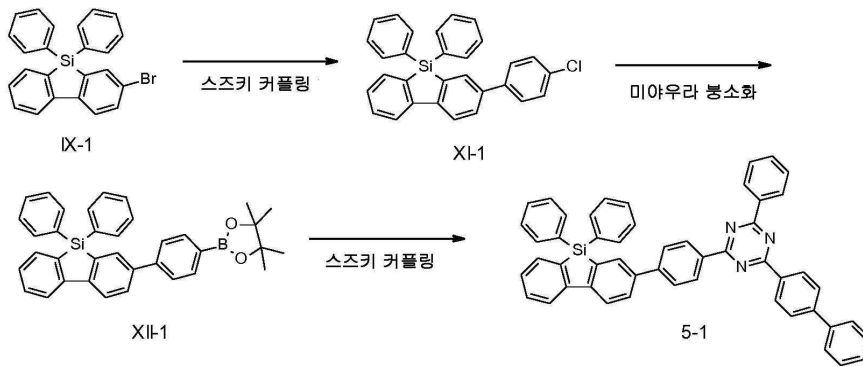
[0459]

[0460]

실시예 5

[0461]

2-[4-(5,5-디페닐벤조[b][1]벤조실롤-3-일)페닐]-4-페닐-6-(4-페닐페닐)-1,3,5-트리아진 (5-1) 및 유도체 (5-2) 내지 (5-28) 의 합성



[0462]

[0463] **3-(4-클로로페닐)-5,5-디페닐-벤조[b][1]벤조실롤 (XI-1) 의 합성**

[0464] 27.7 g (67 mmol) 의 화합물 (IX-1), 11.1 g (71 mmol) 의 4-클로로-페닐 보론산 및 14.3 g (134 mmol) 의 탄산 나트륨을 500 mL 의 EtOH, 500 mL 의 H₂O 및 200 mL 의 톨루엔에 현탁시키고, Ar 분위기 하에서 교반한다.

2.3 g (1.3 mmol) 의 테트라키스(트리페닐 포스핀) 팔라듐을 플라스크에 첨가한다. 반응 혼합물을 110 °C 에서 가열하고 Ar 하에서 16 시간 동안 교반한다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 반응 혼합물을 켄칭시킨다. 유기 상을 분리시키고, 200 mL 의 물로 3 회 세척하고, 황산 마그네슘 상에서 건조시키고, 여과시킨 후 증발 건조시킨다. 잔류물을 DCM/헵탄 (1:10) 의 혼합물을 사용하는 실리카 겔 상의 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제한다. 수율은 24.7 g (55 mmol) 이며, 이는 이론치의 83% 에 해당한다.

[0465] 하기 화합물들을 유사하게 합성한다:

실시예	브롬화물	아릴 보론산	생성물	수율
XI-1		 [1679-18-1]		83%
XI-2		 [3900-89-8]		79%
XI-3		 [1679-18-1]		81%
XI-4		 [3900-89-8]		74%
XI-5		 [1679-18-1]		80%

[0466]

XI-6				82%
XI-7				79%
XI-8				75%
XI-9				86%
XI-10				84%
XI-11				88%
XI-12				81%

[0467]

XI-13				86%
XI-14				82%

[0468]

[0469]

[0470]

2-[4-(5,5-디페닐벤조[b][1]벤조실롤-3-일)페닐]-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 (XII-1) 의 합성

Ar 분위기 하에서 화합물 (XI-1) 5.0 g (11.23 mmol) 과 비스(피나콜라토)-디보란 3.4 g (13.48 mmol) 을 DMF 30 mL 에 현탁시킨다. 칼륨 아세테이트 2.62 g (24.7 mmol) 을 플라스크에 첨가하고 Ar 분위기 하에서 교반한다. Pd(dppf)Cl₂ CH₂Cl₂ 0.39 g (0.33 mmol) 을 플라스크에 첨가하고 Ar 분위기 하에서 교반한다. 반응 혼합물을 80 °C에서 가열하고 Ar 하에서 16 시간 동안 교반한다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 유기상을 물로 켄칭하고 100 mL의 EA 로 3 회 추출하고 유기상을 물로 3 회 세척하고, 황산 마그네슘 상에서 건조시키고, 여과한 후 증발 건조시킨다. 잔류물을 EA 및 헵탄을 이용한 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제한다. 수율은 4.9 g (9.2 mmol) 이며, 이는 이론치의 82%에 해당한다.

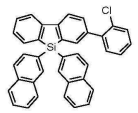
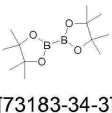
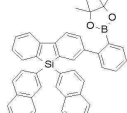
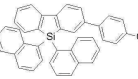
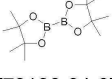
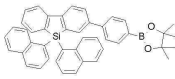
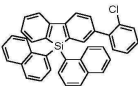
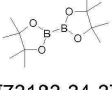
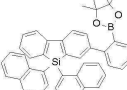
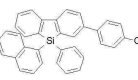
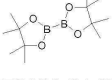
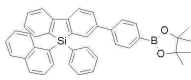
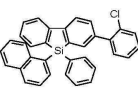
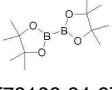
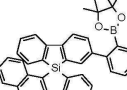
[0471] 하기 화합물들을 유사하게 합성한다:

실시예	염화물	비스(피나콜라토) 디보란	생성물	수율
XII-1		 [73183-34-3]		82%

[0472]

XII-2		 [73183-34-3]		77%
XII-3		 [73183-34-3]		78%
XII-4		 [73183-34-3]		75%
XII-5		 [73183-34-3]		81%
XII-6		 [73183-34-3]		79%
XII-7		 [73183-34-3]		81%
XII-8		 [73183-34-3]		77%
XII-9		 [73183-34-3]		85%

[0473]

XII-10		 [73183-34-3]		81%
XII-11		 [73183-34-3]		77%
XII-12		 [73183-34-3]		75%
XII-13		 [73183-34-3]		79%
XII-14		 [73183-34-3]		72%

[0474]

[0475]

2-[4-(5,5-디페닐벤조[b][1]벤조실롤-3-일)페닐]-4-페닐-6-(4-페닐페닐)-1,3,5-트리아진 (5-1) 의 합성

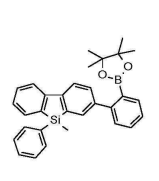
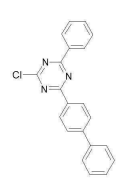
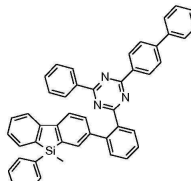
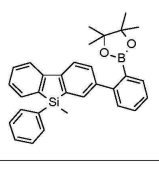
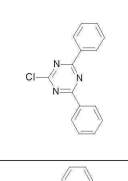
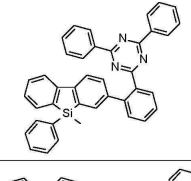
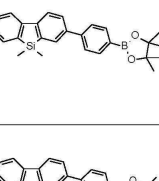
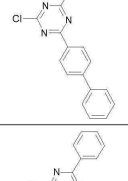
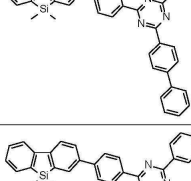
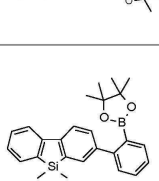
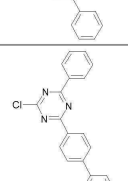
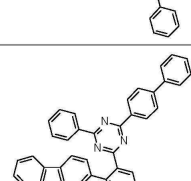
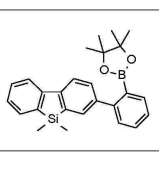
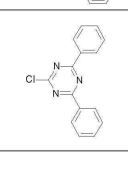
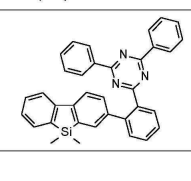



[0476]

화합물 (XII-1) 5.8 g (12.69 mmol) 및 화합물 (III-1) 4.36 g (12.69 mmol) 을 Ar 분위기하에서 50 mL의 1,4-디옥산, 40 mL의 톨루엔 및 50 mL의 H₂O 에 현탁시킨다. 탄산 나트륨 2.95 g (27.91 mmol) 을 플라스크에 첨가하고 Ar 분위기 하에서 교반한다. 0.43 g (0.38 mmol) 의 테트라키스(트리페닐포스핀) 팔라듐을 플라스크에 첨가한다. 반응 혼합물을 110 °C 에서 가열하고 Ar 하에서 16 시간 동안 교반한다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 유기상을 물로 켄칭시키고, 200 mL 의 톨루엔으로 3 회 추출하고, 황산 마그네슘 상에서 건조시키고, 여과시킨 후 증발 건조시킨다. 잔류물을 에틸 아세테이트로 세척한다. 수율은 7.56 g (10.53 mmol) 이며, 이는 이론치의 83 % 에 해당한다.

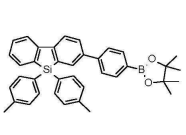
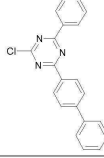
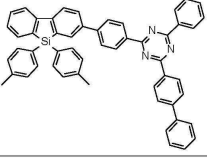
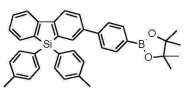
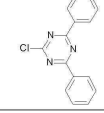
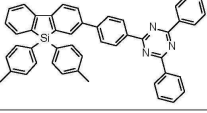
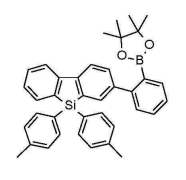
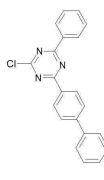
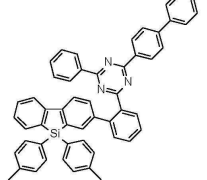
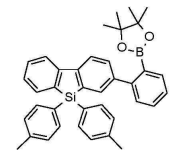
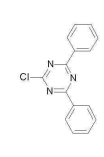
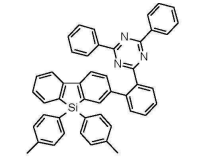
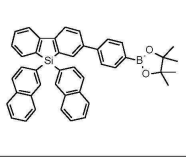
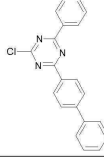
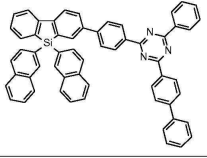
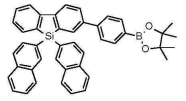
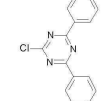
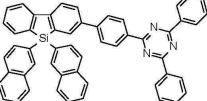
[0477] 하기 화합물들을 유사하게 합성한다:

실시예	보론산 에스테르	염화물	생성물	수율
5-1				85%
5-2				78%
5-3				79%
5-4				80%
5-5				80%
5-6				82%

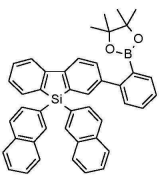
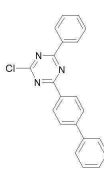
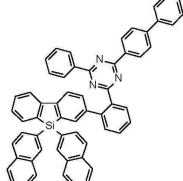
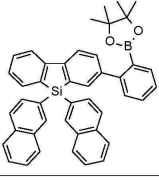
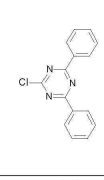
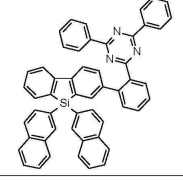
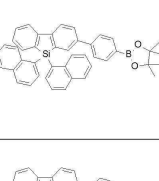
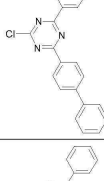
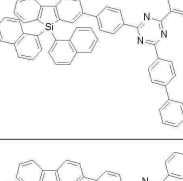
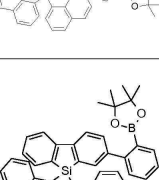
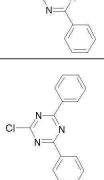
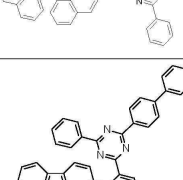
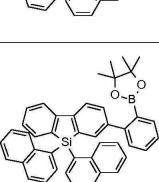
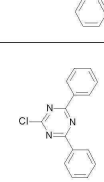
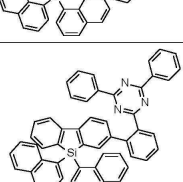
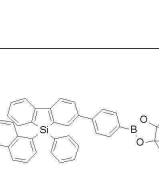
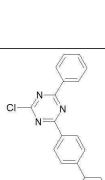
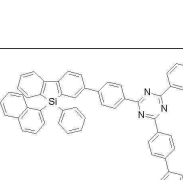
[0478]

5-7				79%
5-8				77%
5-9				75%
5-10				78%
5-11				81%
5-12				79%

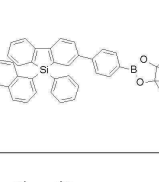
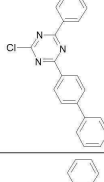
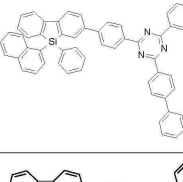
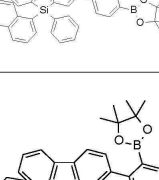
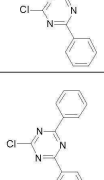
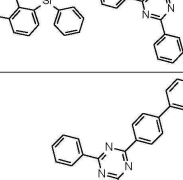
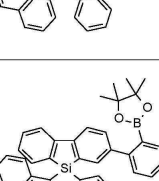
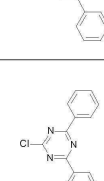
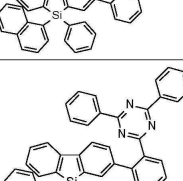
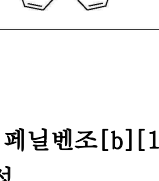
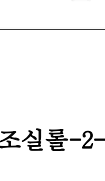
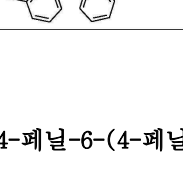
[0479]

5-13				83%
5-14				84%
5-15				83%
5-16				72%
5-17				75%
5-18				78%

[0480]

5-19				69%
5-20				70%
5-21				67%
5-22				69%
5-23				67%
5-24				65%

[0481]

5-25				79%
5-56				81%
5-27				76%
5-28				78%

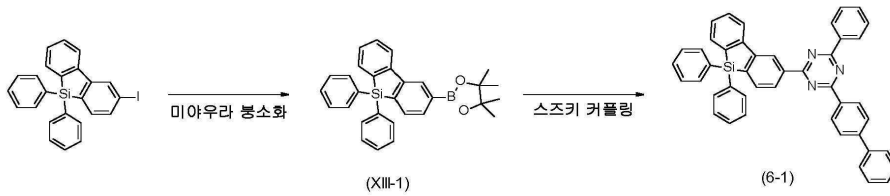
[0482]

[0483]

실시예 6

[0484]

2-(5,5-디페닐벤조[b][1]벤조실롤-2-일)-4-페닐-6-(4-페닐페닐)-1,3,5-트리아진 (6-1) 및 유도체 (6-2) 및 (6-3) 의 합성



[0485]

[0486] **2-(5,5-디페닐벤조[b][1]벤조실롤-2-일)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 (XIII-1) 의 합성**

[0487] 2-요오도-5,5-디페닐-벤조[b][1]벤조실롤 (WO1610-9386) 5.0 g (10.86 mmol) 및 비스 (피나콜라토)디보란 3.3g (13.03 mmol) 을 Ar 분위기 하의 30 mL의 DMF 에서 현탁시킨다. 칼륨 아세테이트 2.4 g (23.9 mmol) 을 플라스크에 첨가하고 Ar 분위기 하에서 교반한다. Pd(dppf)Cl₂ CH₂Cl₂ 0.39 g (0.33 mmol) 을 플라스크에 첨가하고 Ar 분위기 하에서 교반한다. 반응 혼합물을 80 °C에서 가열하고 Ar 하에서 16 시간 동안 교반한다.

반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 유기 상을 물로 켄칭하고 100 mL의 EA로 3 회 추출하고 유기 상을 물로 3 회 세척하고, 황산 마그네슘 상에서 건조시키고, 여과한 다음, 증발 건조시킨다. 잔류물을 EA 및 헵탄을 이용한 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제한다. 수율은 4.3 g (9.2 mmol) 이며, 이는 이론치의 85 % 에 해당한다.

[0488] **2-(5,5-디페닐벤조[b][1]벤조실롤-2-일)-4-페닐-6-(4-페닐페닐)-1,3,5-트리아진 (6-1) 의 합성**

[0489] Ar 분위기 하에서 화합물 (XIII-1) 5.8 g (12.69 mmol) 및 화합물 (III-1) 4.36 g (12.69 mmol) 을 1,4-디옥산 50 mL, 톨루엔 40 mL 및 H₂O 50 mL에 현탁시킨다. 탄산 나트륨 2.95 g (27.91 mmol) 을 플라스크에 첨가하고 Ar 분위기 하에서 교반한다. 0.43 g (0.38 mmol) 의 테트라키스 (트리페닐포스핀) 팔라듐을 플라스크에 첨가한다. 반응 혼합물을 110 °C 에서 가열하고 Ar 하에서 16 시간 동안 교반한다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 유기상을 물로 켄칭시키고, 200 mL 의 톨루엔으로 3 회 추출하고, 황산 마그네슘 상에서 건조시키고, 여과시킨 후 증발 건조시킨다. 잔류물을 에틸 아세테이트로 세척한다. 수율은 6.51 g (10.15 mmol) 이며, 이는 이론치의 80 % 에 해당한다.

[0490] 하기 화합물들을 유사하게 합성한다:

실시예	보론산 에스테르	염화물	생성물	수율
6-1	 [1964439-61-9]			80%
6-2	 [1964439-61-9]			83%
6-3	 [1964439-61-9]			81%

[0491]

[0492] **B) 디바이스 예**

[0493] OLED 디바이스는 다음 공정에 따라 제조된다: 사용된 기판은 두께가 50 nm 인 구조화 ITO (인듐 주석 옥사이드) 로 코팅된 유리 플레이트이다. OLED 는 하기의 층 구조를 갖는다: 기판/정공 주입층 (HIL)/정공 수송층 (HTL)/정공 주입층 (HTL2)/전자 차단층 (EBL)/방출층 (EML)/전자 수송층 (ETL)/전자 주입층 (EIL) 및 최종적으로 캐소드. 캐소드는 100 nm 의 두께를 갖는 알루미늄 층에 의해 형성된다. 제조된 OLED 의 정밀 구조가 표 1 에 제시되어 있다. OLED 의 제조에 필요한 재료는 표 3 에 도시되어 있다.

[0494] 모든 재료는 진공 챔버에서 열 증착으로 증발된다. 여기서 방출층은 항상 최소 하나의 매트릭스 재료 (호스트 재료) 및 방출 도펀트 (방출제) (이는 동시-증발에 의해 매트릭스 재료(들) 와 일정한 부피 비율로 혼합되어

있음) 로 이루어진다. 여기서 H1:SEB (5%) 와 같은 표현은, 재료 H1 이 95% 의 부피비로 층에 존재하고, SEB 가 5% 의 비로 층에 존재하는 것을 의미한다. 유사하게, 다른 층은 또한 2 가지 이상의 재료의 혼합물로 이루어질 수 있다.

[0495] OLED 는 표준 방법에 의해 특성화된다. 이 목적을 위해, 램버트 방출 특징을 가정하는 전류/전압/발광 밀도 특징 선 (IUL 특징 선) 으로부터 계산된, 발광 밀도의 함수로서 전계발광 스펙트럼 및 외부 양자 효율 (EQE, 퍼센트로 측정됨), 및 수명이 결정된다. 표현 EQE @ 10mA/cm² 는 10 mA/cm² 의 작동 전류 밀도에서의 외부 양자 효율을 말한다. LT80 @ 60mA/cm² 는, 임의의 가속 인자를 사용하지 않고도, OLED 가 그의 초기 휘도, 즉 5000cd/m² 로부터 초기 강도의 80%, 즉 4000cd/m² 로 떨어질 때까지의 수명이다. 본 발명의 재료 및 비교 재료를 함유하는 각종 OLED 에 대한 데이터를 표 2 에 요약한다.

[0496] 본 발명에 따른 화합물은 OLED 의 EML 에서 매트릭스 재료 또는 ETL 로서 적합하다. 이들은 단일 층으로서 적합하며, 또한 EML 내에서 또는 EIL, ETL 로서의 혼합 성분으로서 적합하다.

[0497] 선행 기술로부터의 화합물 (C1 내지 C4) 과 비교하여, 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 샘플 (E1 내지 E17) 은 더욱 높은 효율을 나타내면서 단일항 청색 방출 디바이스에서 개선된 수명을 나타낸다.

실시예	HIL	HTL	HTL2	EBL	EML	ETL	EIL
	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm	두께 / nm
C1	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETMc3:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm
E1	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM1:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm
E2	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM2:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm
E3	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM3:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm
E4	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM4:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm

[0498]

E5	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM5:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm
E6	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM6:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm
E7	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM7:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm
E8	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM8:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm
E9	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM9:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm
E10	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM10:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm
E11	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM11:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm
E12	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM12:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm
E13	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM13:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm
E14	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM14:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm
E15	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM15:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm
E16	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM16:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm
E17	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM17:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm
E18	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM18:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm
E19	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM19:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm
E20	HIM:F4TC NQ(5%) 20nm	HIM 160nm	HTM:F4TC NQ(5%) 20nm	HTM 10nm	H1:SEB(5%) 20 nm	ETM20:LiQ (50%) 30 nm	LiQ 1nm

[0499]

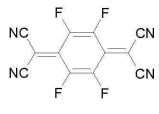
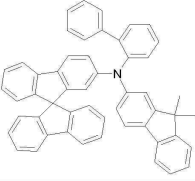
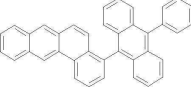
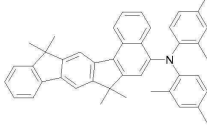
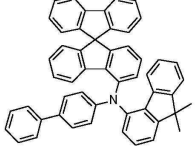

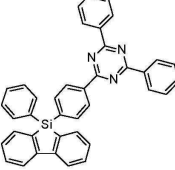
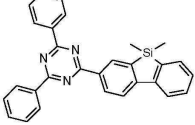
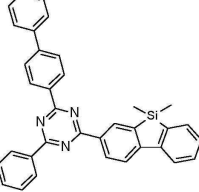
실시예	EQE @ 10mA/cm ²	LT80 @ 60mA/cm ²
C1	7.5	300
E1	7.8	350
E2	8.2	370
E3	8.3	350
E4	7.9	340
E5	8.3	360
E6	7.9	350

[0500]

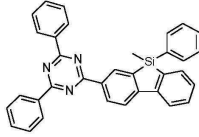
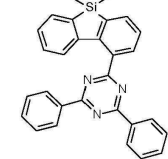
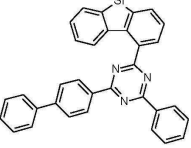
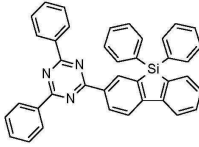
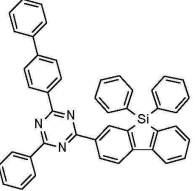
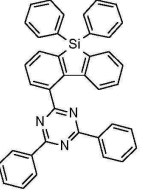
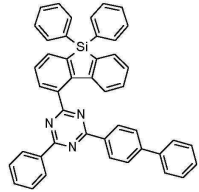
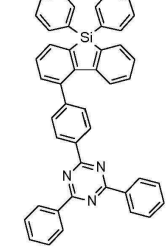
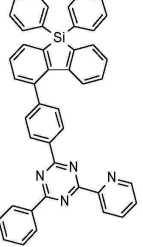
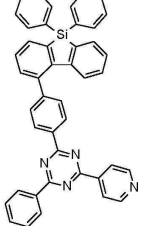
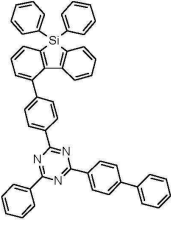
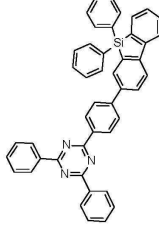
E7	8.4	400
E8	8.0	360
E9	8.5	360
E10	8.5	350
E11	8.1	330
E12	8.5	340
E13	8.7	370
E14	8.0	400
E15	7.8	360
E16	8.1	360
E17	7.7	360
E18	7.3	290
E19	7.5	290
E20	7.2	320

[0501]

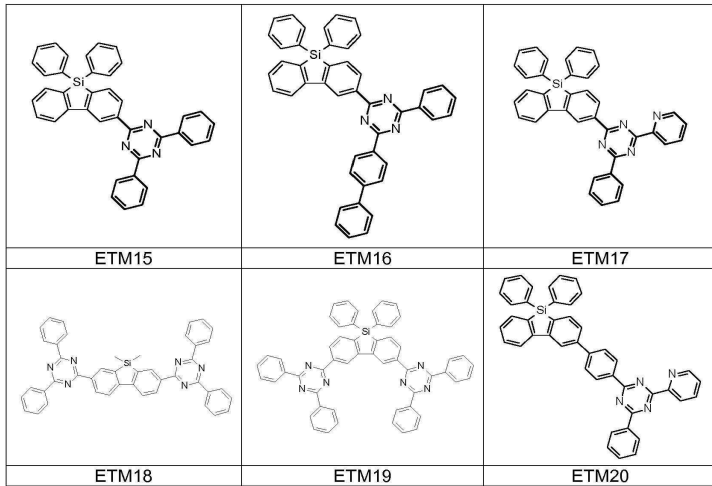
표 3 - 사용된 재료의 구조

		
F4TCNQ	HIM	H1
		
SEB	HTM	LiQ
		
ETMc1	ETM1	ETM2

[0502]

		
ETM3	ETM4	ETM5
		
ETM6	ETM7	ETM8
		
ETM9	ETM10	ETM11
		
ETM12	ETM13	ETM14

[0503]



[0504]

[0505]

상기 예에서, 본 발명의 재료 ETM1 내지 ETM17 을 갖는 10mA/cm² 에서의 디바이스의 외부 양자 효율은 비교예 1 중 하나보다 높다는 것이 제시된다. 심지어 수명에서 발명의 실시예 E1 내지 E17 은 참고보다 훨씬 더 우수하다. ETM7 및 ETM14 가 있는 디바이스는 400h 의 60 mA/cm² 일정한 구동 전류 밀도에서 초기 밝기의 80% 까지 수명이 감소된다. 비교예는 300h를 달성한다.

[0506]

본 발명의 재료 ETM1 내지 ETM19와 본 발명의 재료 ETM18 및 ETM19의 비교는 정확히 하나의 트리아진기를 갖는 재료로 예상치 못한 개선이 달성될 수 있음을 보여준다. 본 발명의 실시예 ETM1 내지 ETM17은 330h 및 400h 의 2 배로 실시예 ETM 18 및 EMT19보다 더 높은 수명을 나타낸다.

[0507]

또한, 본 발명의 재료 ETM1 내지 ETM17과 본 발명의 재료 EMT20의 비교는, 잔기 Ar¹로서 피리디닐기, 잔기 Ar²로서 페닐기, 잔기 R^a로서 2 개의 페닐기를 갖는 아릴 링킹기의 조합 및 실라플루오렌 기의 3 위치 치환은 현저한 단점을 나타낸다는 것을 나타낸다. 실시예 E20의 수명이 참고 실시예 C1보다 우수하지만, 바람직한 본 발명의 실시예 E1 내지 E17의 관점에서 실시예 E20의 결과는 다소 낮다. 특히, E12 및 E20의 비교는 치환기 위치의 효과를 나타낸다.

[0508]

이에 더하여, 본 실시예는, 잔기 R^a가 알킬기이거나 또는 실라플루오렌기가 2-위치에서 치환되는 경우, 2 개 이상의 방향족 고리를 갖는 아릴 또는 헤테로 아릴기를 포함하는 Ar¹ 또는 Ar² 잔기를 갖는 화학식 (I) 에 따른 본 발명의 화합물이 수명 및 EQE 에서 놀라운 개선을 제공한다는 것을 보여준다 (E4를 E5와 비교 및 E6을 E7과 비교). 실라플루오렌 기가 4-위치에서 치환되는 경우, EQE의 놀라운 개선이 달성될 수 있다 (E8을 E9과 비교).

[0509]

또한, 본 실시예는 아릴 또는 헤테로아릴기를 포함하는 R^a 잔기를 갖는 화학식 (I)에 따른 본 발명의 화합물이, 잔기 R^a로서 알킬기만을 갖는 화합물의 관점에서 EQE에서 놀라운 개선을 제공한다는 것을 보여준다 (E1를 E3 및 E6과 각각 비교).

[0510]

또한, 본 실시예는 2- 또는 4-위치에서 실라플루오렌 기의 치환이 3 위치에서의 치환보다 바람직하다는 것을 보여준다 (E6 및 E8을 E15와 비교).

[0511]

본 발명에 따른 기술적 효과를 볼 수 있는 직접 비교를 위한 디바이스는 다음과 같다:

[0512]

i) C1을 E6 내지 E9, 및 E15 내지 E17 과 비교

[0513]

ii) E18 을 E1 내지 E5 과 비교,

[0514]

iii) E19 를 E15 내지 E17 과 비교, 및

[0515]

iii) E20 을 E10 내지 E17 과 비교.