



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2020년06월22일
(11) 등록번호 10-2125199
(24) 등록일자 2020년06월16일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 403/10 (2006.01) C07D 209/82 (2006.01)
C07D 251/12 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C07D 403/10 (2013.01)
C07D 209/82 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2015-7004525
(22) 출원일자(국제) 2013년06월25일
심사청구일자 2018년06월22일
(85) 번역문제출일자 2015년02월23일
(65) 공개번호 10-2015-0036736
(43) 공개일자 2015년04월07일
(86) 국제출원번호 PCT/EP2013/001861
(87) 국제공개번호 WO 2014/015931
국제공개일자 2014년01월30일
(30) 우선권주장
12005368.1 2012년07월23일
유럽특허청(EPO)(EP)
(56) 선행기술조사문헌
KR1020060114001 A*
KR1020120060611 A*
KR1020130078437 A*
KR1020130113263 A*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
메르크 파텐트 게엠베하
독일 64293 다름스타트 프랑크푸르터 스트라세 250
(72) 발명자
파르함 아미르 호싸인
독일 65929 프랑크푸르트 암 마인 프란츠-헨레-슈트라세 4
에베를레 토마스
독일 76829 란다우 빌리-브란트-슈트라세 6
(74) 대리인
특허법인코리아나

전체 청구항 수 : 총 14 항

심사관 : 이정국

(54) 발명의 명칭 **유기 전계발광 소자용 재료**

(57) 요약

본 발명은 유기 전계발광 소자에서 특히 삼중항 매트릭스 재료로 사용하기 위한 카르바졸 유도체에 관한 것이다.
본 발명은 추가로 본 발명에 따른 화합물의 제조 방법 및 그를 함유하는 전자 소자에 관한 것이다.

(52) CPC특허분류

C07D 251/12 (2013.01)

C09K 11/06 (2013.01)

H01L 51/50 (2013.01)

(72) 발명자

야치 안야

독일 60486 프랑크푸르트 암 마인 폴타슈트라쎄 6
9아

플롬 크리스토프

독일 64291 다름슈타트 비른가르텐백 131

크뢰버 요나스 팔렌틴

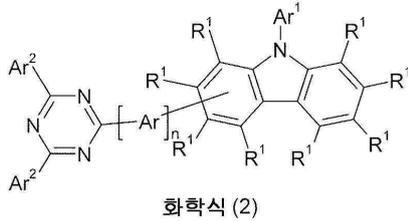
독일 60311 프랑크푸르트 암 마인 파르가쎄 4

명세서

청구범위

청구항 1

화학식 (2) 의 화합물:



[식 중, 라디칼 R¹ 은 Ar 이 이 위치에 결합되어 있는 경우에 존재하지 않고, 이하의 내용이 기호 및 지수에 적용됨:

Ar 은 각 경우, 상동이거나 또는 상이하계, 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수 있는 페닐렌기이고;

Ar¹ 은, 10 개 초과와 방향족 고리 원자를 지닌 축합된 아릴기를 포함하지 않고, 하나 이상의 라디칼 R¹ 에 의해 치환될 수 있는 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 지닌 방향족 고리 시스템이거나, 또는 디벤조푸란 또는 디벤조티오펜기로서, 각각 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있는 것이고;

Ar² 는 각 경우 상동이거나 또는 상이하계, 아릴기, 바이아릴기, 트리아릴기 또는 쿼터아릴기로서, 상기 언급된 기들 중의 각 개별 아릴기가 6 내지 10 개의 방향족 고리 원자를 지니고 있고, 하나 이상의 라디칼 R¹ 에 의해 치환될 수 있는 것이거나, 또는 디벤조푸란 또는 디벤조티오펜기로서, 각각 하나 이상의 라디칼 R¹ 에 의해 치환될 수 있는 것이고;

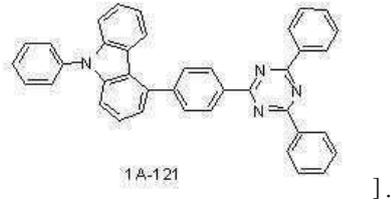
R 은 각 경우, 상동이거나 또는 상이하계, H, D, F, CN, 아릴기 또는 바이아릴기로서, 상기 언급된 기들 중의 각 개별 아릴기가 6 개의 방향족 고리 원자를 지니고 있고, 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있는 것이거나, 또는 탄소 원자를 통해 연결되어 있고, 또한 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있는 카르바졸기이고;

R¹ 은 각 경우, 상동이거나 또는 상이하계, H, D, F, CN, 1 내지 10 개의 C 원자를 지닌 직쇄 알킬기 또는 3 내지 10 개의 C 원자를 지닌 분지형 또는 고리형 알킬기로서, 하나 이상의 H 원자들이 D 또는 F 로 대체될 수 있는 것이거나, 또는 6 개의 C 원자를 지닌 아릴기로서, 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있는 것이거나, 또는 디벤조푸란 또는 디벤조티오펜기로서, 각각 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있는 것이거나, 또는 탄소 원자를 통해 연결되어 있고, 또한 하나 이상의 라디칼 R² 에 의해 치환될 수 있는 카르바졸기이고; 여기서 2 개의 인접 치환기 R¹ 은 이들이 결합되어 있는 원자들과 함께 또한 서로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 고리 시스템을 형성할 수 있고;

R² 은 각 경우, 상동이거나 또는 상이하계, H, D 또는 1 내지 20 개의 C 원자를 지닌 지방족 탄화수소 라디칼 또는 6 개의 고리 원자를 지닌 아릴기이고;

n 은 1, 2 또는 3 이고;

하기 화합물이 본 발명으로부터 제외됨:



청구항 2

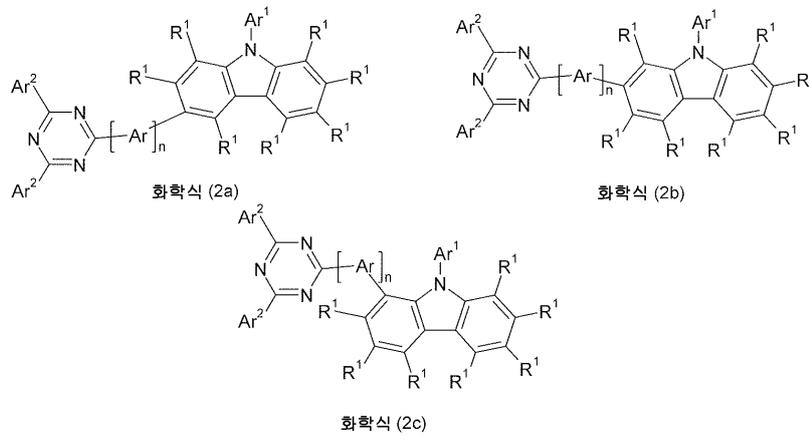
삭제

청구항 3

삭제

청구항 4

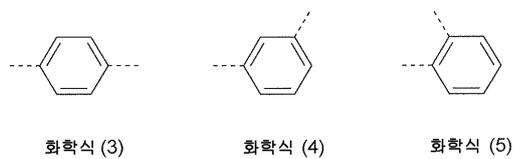
제 1 항에 있어서, 화학식 (2a), (2b) 및 (2c) 의 화합물로부터 선택되는 화합물:



[식 중, 사용된 기호 및 지수는 제 1 항에 제시된 의미를 지님].

청구항 5

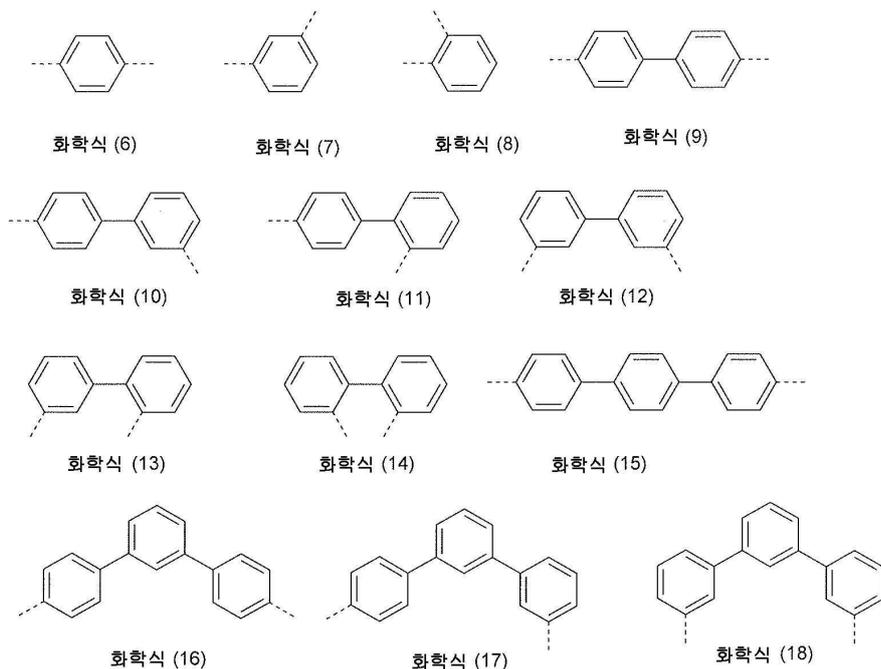
제 1 항에 있어서, n 이 1, 2 또는 3 이고, Ar 이 각 경우 상동적으로 또는 상이하게 화학식 (3), (4) 또는 (5) 로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:



[식 중, 각 경우 점선은 이들 기의 연결을 나타내며, 이들 기 각각은 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수 있음].

청구항 6

제 1 항에 있어서, 기 $-(Ar)_n-$ 가 화학식 (6) 내지 (18) 로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:



[식 중, 각 경우 점선은 이들 기의 연결을 표시하고, 각각의 이들 기는 또한 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수 있고, R 은 제 1 항에 제시된 의미를 지님].

청구항 7

제 1 항에 있어서, 라디칼 R 이, 각 경우 상동적으로 또는 상이하게, H, D, F, CN, 페닐 또는 비페닐로서, 상기 언급된 기들 중의 각 아릴기가 하나 이상의 라디칼 R^1 (상기 R^1 은 각 경우 상동적으로 또는 상이하게 H 또는 1 내지 5 개의 C 원자를 지닌 알킬기를 나타냄) 로 치환될 수 있는 것; 또는 탄소 원자를 통해 연결되고, 하나 이상의 라디칼 R^1 에 의해 치환될 수 있는 카르바줄기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 8

제 1 항에 있어서, Ar^1 이 각각 하나 이상의 라디칼 R^1 로 치환될 수 있는 페닐, 비페닐, 터페닐 또는 쿼터페닐로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 9

제 1 항에 있어서, Ar^2 가 각 경우 상동적으로 또는 상이하게, 각각 하나 이상의 라디칼 R^1 로 치환될 수 있는 페닐, 비페닐, 터페닐 또는 쿼터페닐로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 10

제 5 항에 있어서, 이하의 것이 기호 및 지수에 적용되는 것을 특징으로 하는 화합물:

Ar 은, 각 경우 상동적으로 또는 상이하게, 상기 언급된 $n = 1, 2$ 또는 3 일 때의 화학식 (3), (4) 또는 (5) 의 기를 나타내고;

R 은, 각 경우 상동적으로 또는 상이하게, H, D, F, CN, 페닐 또는 비페닐로서, 각각의 아릴기가 하나 이상의 라디칼 R^1 (R^1 이, 각 경우 상동적으로 또는 상이하게, H 또는 1 내지 5 개의 C 원자를 지닌 알킬기를 나타냄) 에 의해 치환될 수 있는 것; 또는 탄소 원자를 통해 연결되어 있고, 또한 하나 이상의 라디칼 R^1 에 의해

치환될 수 있는 카르바졸기로부터 선택되고;

Ar^1 이 페닐, 비페닐, 터페닐 또는 쿼터페닐로서, 각각 하나 이상의 라디칼 R^1 로 치환될 수 있는 것으로 이루어진 군으로부터 선택되고;

Ar^2 이, 각 경우 상동적으로 또는 상이하게, 페닐, 비페닐, 터페닐 또는 쿼터페닐로서, 각각 하나 이상의 라디칼 R^1 로 치환될 수 있는 것으로 이루어진 군으로부터 선택되고;

R^1 은, 각 경우 상동적으로 또는 상이하게, H, D, F, 1 내지 10 개의 C 원자를 지닌 직쇄 알킬기 또는 3 내지 10 개의 C 원자를 지닌 분지형 또는 고리형 알킬기로서, 하나 이상의 H 원자들이 F 로 치환될 수 있는 것, 또는 하나 이상의 라디칼 R^2 로 치환될 수 있는 6 개의 C 원자를 지닌 아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되거나, 또는 디벤조푸란 또는 디벤조티오펜기로서, 각각 하나 이상의 라디칼 R^2 로 치환될 수 있는 것, 또는 탄소 원자를 통해 연결되고, 또한 하나 이상의 라디칼 R^2 에 의해 치환될 수 있는 카르바졸임.

청구항 11

단위체 $(Ar^2)_2$ 트리아진- $(Ar)_n$ 이 Suzuki 커플링에 의해 도입되는 것을 특징으로 하는 제 1 항 및 제 4 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항의 화합물의 제조 방법.

청구항 12

제 1 항 및 제 4 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항의 화합물 및 하나 이상의 추가 화합물, 또는 형광 또는 인광 도펀트를 함유하는 혼합물.

청구항 13

제 1 항 및 제 4 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항의 화합물 또는 제 1 항 및 제 4 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항의 화합물 및 하나 이상의 추가 화합물, 또는 형광 또는 인광 도펀트를 함유하는 혼합물 및 하나 이상의 용매를 함유하는 제형물, 또는 용액, 현탁액 또는 미니에멀전.

청구항 14

제 1 항 및 제 4 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항에 있어서, 전자 기기, 또는 유기 전계발광 소자에서 사용되는 화합물.

청구항 15

유기 전계발광 소자, 유기 집적 회로, 유기 전계 효과 트랜지스터, 유기 박막 트랜지스터, 유기 발광 트랜지스터, 유기 태양 전지, 유기 염료-감작 태양 전지, 유기 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 필드-켄치 장치, 발광 전기화학 전지, 유기 레이저 다이오드 및 "유기 플라즈몬 발광 소자" 로 이루어진 군으로부터 선택되는, 제 1 항 및 제 4 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항의 화합물 또는 제 1 항 및 제 4 항 내지 제 10 항 중 어느 한 항의 화합물 및 하나 이상의 추가 화합물, 또는 형광 또는 인광 도펀트를 함유하는 혼합물을 함유하는 전자 소자.

청구항 16

제 15 항에 있어서, 상기 화합물이 발광층 내 인광 발광체용 매트릭스 재료로서 이용되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 소자인 전자 소자.

발명의 설명

기술 분야

본 발명은 특히 유기 전계발광 소자용 삼중항 매트릭스 재료로 사용하기 위한 카르바졸 유도체를 기재한다. 본 발명은 나아가 본 발명에 따른 화합물의 제조 방법 및 그 화합물을 함유하는 전자 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0001]

- [0002] 유기 반도체가 기능성 재료로서 채용되는 유기 전계발광 소자 (OLED) 의 구조는 예를 들어 US 4539507, US 5151629, EP 0676461 및 WO 98/27136 에 기재되어 있다. 채용되는 발광 재료는 종종 형광 대신 인광을 발하는 유기금속 착물이다. 양자 역학적 이유로 인해, 인광 발광체로서 유기금속 화합물들 이용하면 4 배까지의 에너지 및 전력 효율이 가능하다. 일반적으로, 예를 들어 효율과 관련하여, OLED, 특히 삼중항 발광 (인광) 을 발하는 OLED 의 경우 작동 전압 및 수명 개선이 여전히 필요하다.
- [0003] 인광 OLED 의 특성은 채용되는 삼중항 발광체에 의해서만 결정되는 것이 아니다. 특히, 예를 들어 매트릭스 재료와 같은 이용되는 타 재료들이 또한 여기서 특히 중요하다. 따라서, 그러한 재료에서의 개선이 또한 OLED 특성에서의 유의한 개선을 가져올 수 있다.
- [0004] 선행기술에 따르면, 인광 발광체용으로 사용되는 매트릭스 재료는 특히 인돌카르바졸 유도체 (예를 들어, WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따른 것) 또는 인데노카르바졸 유도체 (예를 들어, WO 2010/136109 또는 WO 2011/000455 에 따른 것), 특히 트리아진과 같은 전자결핍 헤테로방향족 화합물들에 의해 치환된 것이 있다. 나아가, 인광 발광체용으로 사용되는 매트릭스 재료는 예를 들어 비스-디벤조푸란 유도체 (예를 들어, EP 2301926 에 따른 것) 이다. 그러나, 특히 소자의 효율, 수명 및 조작 전압과 관련하여 그러한 매트릭스 재료 이용시 개선이 여전히 필요하다.
- [0005] 본 발명의 목적은 특별하게는 매트릭스 재료로서 형광 또는 인광 OLED 에 사용하기에 적합한 화합물을 제공하는 것이다. 특히, 본 발명의 목적은 녹색 뿐 아니라 청색 인광 OLED 에도 적합하며, 우수한 효율, 긴 수명 및 낮은 조작 전압을 제공하게 되는 매트릭스 재료를 제공하는 것이다. 매트릭스 재료의 특성은 특별하게는 유기 전계발광 소자의 수명 및 효율에 유의한 영향력을 발한다.
- [0006] WO 2011/057706 은 2 개의 트리페닐트리아진기에 의해 치환되는 카르바졸 유도체를 개시한다. 특히 삼중항 수준 및 승화 안정성과 관련하여, 추가의 개선이 요망된다.
- [0007] WO 2011/055914 은 페닐기들 중 하나가 디메틸보라닐기인 트리페닐트리아진기에 의해 치환된 카르바졸 유도체를 개시한다. 그 화합물의 특징적인 특성은 디아틸보라닐기가 존재한다는 점이다. 그러한 치환이 부재하는 화합물은 개시되지 않았다.
- [0008] WO 2011/149240 은 카르바졸기 및 디페닐트리아진기에 의해 치환된 트리페닐렌 유도체를 개시한다. 그 화합물의 특징적인 특성은 트리페닐렌기가 존재한다는 점이다. 트리페닐렌을 포함하지 않는 화합물은 개시되어 있지 않다.
- [0009] WO 2011/046182 은 플루오레닐기에 의해 트리아진 상에서 치환된 카르바졸-아틸렌-트리아진 유도체를 개시한다. 그 화합물들의 특징적인 특성은 플루오레닐기가 존재한다는 점이다. 플루오레닐기를 포함하지 않는 화합물은 개시되지 않았다.

발명의 내용

해결하려는 과제

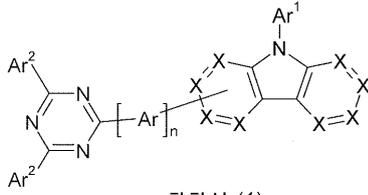
- [0010] 일반적으로, 상기 언급된 화합물에서 여전히 추가적인 개선이 요망된다.

과제의 해결 수단

- [0011] 놀랍게도, 하기 화학식 (1) 의 화합물을 함유하는 전계발광 소자가 특히 인광 도펀트용 매트릭스 재료로 사용시 선행기술을 능가하는 개선점을 지닌다는 것을 발견했다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0012] 따라서, 본 발명은 하기 화학식 (1) 의 화합물에 관한 것이다:



화학식 (1)

[0013]

[0014] [식 중, 이하의 내용이 기호 및 지수에 적용됨:

[0015] X 는 각 경우, 상동이거나 또는 상이하계, CR¹ 또는 N 이거나; 또는 기 Ar 가 상기 위치에 결합되어 있는 경우에는 X 가 C 이고;

[0016] Ar 은 각 경우, 상동이거나 또는 상이하계, 하나 이상의 라디칼 R로 치환될 수 있는 페닐렌기, 또는 하나 이상의 라디칼 R¹; 로 치환될 수 있는 플루오레닐렌 또는 스피로비플루오레닐렌기이고;

[0017] Ar¹ 은 10 개 초과와 방향족 고리 원자를 지닌 축합된 아릴기를 포함하지 않고, 하나 이상의 라디칼 R¹ 에 의해 치환될 수 있는 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 지닌 방향족 고리 시스템이거나, 또는 각각 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있는 디벤조푸란 또는 디벤조티오펜기이고;

[0018] Ar² 는 각 경우 상동이거나 또는 상이하계, 아릴기, 바이아릴기, 트리아릴기 또는 쿼터아릴기이고, 여기서 상기 언급된 기 중의 각 개별 아릴기가 6 내지 10 개의 방향족 고리 원자를 지니고 있으며, 하나 이상의 라디칼 R¹ 에 의해 치환될 수 있는 것이거나, 또는 각각 하나 이상의 라디칼 R¹ 에 의해 치환될 수 있는 디벤조푸란 또는 디벤조티오펜기이고;

[0019] R 은 각 경우, 상동이거나 또는 상이하계, H, D, F, CN, 아릴기, 바이아릴기, 트리아릴기 또는 쿼터아릴기로서, 상기 언급된 기 중의 각 개별 아릴기가 6 내지 10 개의 방향족 고리 원자를 지니고 있고, 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있는 것이거나, 또는 탄소 원자를 통해 연결되어 있고, 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있는 카르바졸기이고;

[0020] R¹ 은 각 경우, 상동이거나 또는 상이하계, H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 C 원자를 지닌 직쇄 알킬 또는 알콕시기 또는 3 내지 20 개의 C 원자를 지닌 분지형 또는 고리형 알킬 또는 알콕시기로서, 하나 이상의 비-인접 CH₂ 기들이 R²C=CR², C≡C 또는 O 로 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자들이 D 또는 F 로 대체될 수 있는 것이거나, 또는 6 내지 10 개의 C 원자를 지닌 아릴기로서, 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있는 것이거나, 또는 디벤조푸란 또는 디벤조티오펜기로서, 각각 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있는 것이거나, 또는 탄소 원자를 통해 연결되어 있고, 하나 이상의 라디칼 R² 에 의해 치환될 수 있는 카르바졸기 또는, 6 내지 10 개의 방향족 고리 원자를 지니고 있고, 하나 이상의 R² 에 의해 치환될 수 있는 아르알킬기이고; 여기서 2 개의 인접 치환기 R¹ 는 이들이 결합되어 있는 원자들과 함께 또한 서로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족 고리 시스템을 형성할 수 있고;

[0021] R² 은 각 경우, 상동이거나 또는 상이하계, H, D 또는 1 내지 20 개의 C 원자를 지닌 지방족 탄화수소 라디칼 또는 6 내지 10 개의 고리 원자를 지닌 아릴기이고;

[0022] n 은 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 1, 2 또는 3 임].

[0023] 본 발명의 맥락에서 인접 치환기는 서로 직접 연결되어 있는 탄소 원자에 결합되어 있는 치환기이다. 대조적으로, 상이한 아릴기에 결합되어 있는 치환기는 본 발명의 맥락에서 인접 치환기가 아니다.

[0024] Ar², R 및 R¹ 에 대해 정의된 바와 같이 6 내지 10 개의 방향족 고리 원자를 지닌 아릴기는 벤젠 또는 나프탈렌, 바람직하게는 벤젠이다. 나아가, Ar¹ 에 대해 정의된 바와 같이 방향족 고리 시스템은 바람직하게는 축합된

아릴기를 절대로 포함하지 않는다.

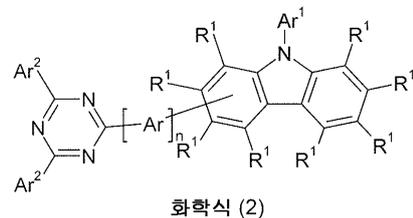
[0025] 본 발명의 맥락에서 바이아릴기는 서로, 예를 들어 직접 연결되어 있는 2 개의 아릴기, 예를 들어 비페닐이다. 본 발명의 맥락에서 트리아릴기는 서로 직접 연결된 3 개의 아릴기, 예를 들어 터페닐이다. 본 발명의 맥락에서 쿼터페닐은 서로 직접 연결된 4 개의 아릴기, 예를 들어 쿼터페닐이다. 이들 4 개의 아릴기는 서로 선형으로 또는 분지형으로 연결되어 있을 수 있다.

[0026] 본 발명의 맥락에서 축합된 아릴기는 2 개 이상의 방향족기가 축합된, 즉 예를 들어 나프탈렌에서와 같이 공통 모서리를 통해 서로에게 걸쳐져 있는 기이다. 대조적으로, 예를 들어 플루오렌은 본 발명의 맥락에서 축합된 아릴기가 아닌데, 이는 플루오렌 내의 2 개의 방향족기가 공통 모서리를 갖고 있지 않기 때문이다.

[0027] 본 발명의 맥락에서 방향족 고리 시스템은 고리 시스템 내에 6 내지 24 개의 C 원자를 포함한다. 본 발명의 맥락에서 방향족 고리 시스템은 아릴 또는 헤테로아릴 고리만을 포함하는 것은 아니며, 추가로 여러개의 아릴 또는 헤테로아릴기가 예를 들어 C 원자와 같은 비-방향족 단위체 (바람직하게는 수소 이외의 원자들의 10% 미만)에 의해 연결될 수 있다. 따라서, 예를 들어 2 개 이상의 아릴기가 예를 들어 짧은 알킬기에 의해 연결되어 있는 플루오렌, 9,9'-스피로비플루오렌, 9,9'-디아릴플루오렌 등과 같은 시스템이 또한 본 발명의 맥락에서 방향족 고리 시스템을 의미하는 것으로 취해진다. 나아가, 예를 들어 비페닐, 터페닐 또는 쿼터페닐과 같이 단일 결합에 의해 서로 연결되어 있는 방향족 고리가 본 출원의 맥락에서 방향족 고리 시스템으로 언급된다.

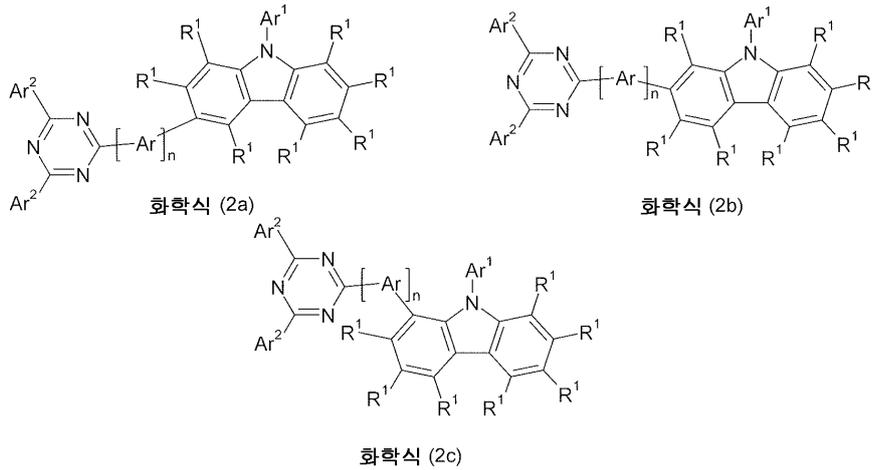
[0028] 본 발명의 목적 상, 1 내지 20 개의 C 원자를 포함할 수 있고, 추가로 개별 H 원자들 또는 CH₂ 기가 상기 언급된 기들로 치환될 수 있는 지방족 탄화수소 라디칼 또는 알킬기 또는 알케닐기가 바람직하게는 라디칼 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, n-부틸, i-부틸, s-부틸, t-부틸, 2-메틸-부틸, n-펜틸, s-펜틸, 시클로-펜틸, n-헥실, 시클로-헥실, n-헵틸, 시클로헵틸, n-옥틸, 시클로옥틸, 2-에틸헥실, 트리플루오로메틸, 펜타플루오로에틸, 2,2,2-트리플루오로에틸, 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 시클로펜테닐, 헥세닐, 시클로헥세닐, 헵테닐, 시클로헵테닐, 옥테닐, 시클로옥테닐, 에티닐, 프로피닐, 부티닐, 펜티닐, 헥시닐, 헵티닐 또는 옥티닐을 의미하는 것으로 취해진다. 1 내지 40 개의 C 원자를 지닌 알콕시기는 바람직하게는 메톡시, 트리플루오로메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, s-부톡시, t-부톡시, n-펜톡시, s-펜톡시, 2-메틸-부톡시, n-헥속시, 시클로-헥실옥시, n-헵톡시, 시클로-헵틸옥시, n-옥틸옥시, 시클로옥틸옥시, 2-에틸헥실옥시, 펜타플루오로에톡시 및 2,2,2-트리플루오로에톡시를 의미하는 것으로 취해진다. 일반적으로, 본 발명에 따른 알킬, 알케닐, 알키닐, 알콕시 또는 티오알킬기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리형이며, 여기서 하나 이상의 비인접 CH₂ 기들은 상기 언급된 기들로 치환될 수 있고; 나아가 하나 이상의 H 원자들이 또한 D 또는 F에 의해 치환될 수 있다.

[0029] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 고리마다 1 개의 X의 최대값은 N을 나타내며, 나머지 기 X는, 각 경우 상동적으로 또는 상이하게 CR¹를 나타낸다. X는 특별히 바람직하게는, 각 경우 상동적으로 또는 상이하게, CR¹을 나타낸다. 따라서, 화학식 (1)의 바람직한 화합물은 하기 화학식 (2)의 화합물들이다:



[0030] [식 중, 사용된 기호 및 지수는 상기 제시된 의미를 갖고 있으며, 기 Ar가 그 위치에 결합되어 있다면, 라디칼 R¹은 존재하지 않음].

[0032] 기 Ar은 카르바졸의 1-, 2-, 3- 또는 4-위치에 결합될 수 있을 수 있다. 본 발명의 바람직한 구현예에서, 기 Ar은 카르바졸의 1-, 2- 또는 3-위치에 결합되어 있다. 따라서, 하기 화학식 (2a), (2b) 및 (2c)의 화합물이 바람직하다,

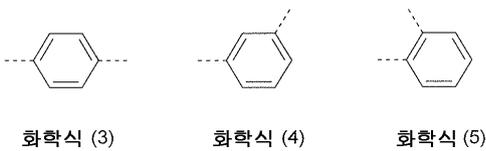


[0033]

[0034] [식 중, 사용된 기호 및 지수는 상기 제시된 의미를 갖고 있음].

[0035] 상기 언급된 화학식 (2a) 및 (2b) 의 화합물이 특히 바람직하다.

[0036] 본 발명의 바람직한 구현예에서, n 은 1, 2 또는 3 이며, Ar 은 하나 이상의 라디칼 R 에 의해 치환될 수 있는 페닐렌기를 나타낸다. 여기서, Ar 은 각 경우 상동적으로 또는 상이하게, 화학식 (3), (4) 또는 (5) 로부터 선택되는 기를 나타낸다:

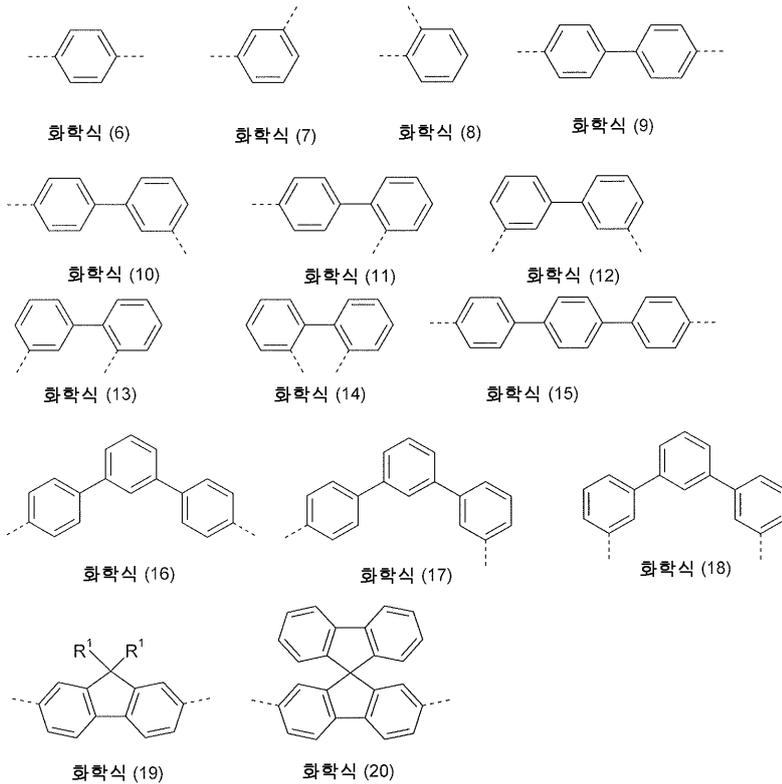


[0037]

[0038] [식 중, 각 경우 점선은 이들 기들의 연결을 나타내고, 이들 기 각각이 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수 있음].

[0039] 본 발명의 추가의 바람직한 구현예에서, n 은 1 이고, Ar 은 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있는 플루오레닐렌 또는 스피로비플루오레닐렌기를 나타낸다.

[0040] 기 $-(Ar)_n-$ 은 특히 바람직하게는 화학식 (6) 내지 (20) 로부터 선택되는 기를 나타낸다:



[0041]

[식 중, 각 경우 점선은 이들 기들의 연결을 나타내고, 이들 기 각각은 또한 하나 이상의 라디칼 R 로 치환될 수 있고, R 및 R¹ 은 상기 제시된 의미를 가짐].

[0043]

Ar 또는 상기 기재된 Ar 의 바람직한 구현예에 결합되어 있는 라디칼 R 은 바람직하게는, 각각 상동적으로 또는 상이하게, H, D, F, CN, 페닐, 비페닐 또는 터페닐로서, 상기 언급된 기들에서 각 아릴기가 하나 이상의 라디칼 R¹ 에 의해 치환될 수 있고, R¹ 이 바람직하게는 각 경우 상동적으로 또는 상이하게 H 또는 1 내지 5 개의 C 원자를 지닌 알킬기를 나타내는 것으로 이루어진 군, 또는 탄소 원자를 통해 연결되어 있고, 하나 이상의 라디칼 R¹ 에 의해 치환될 수 있는 카르바졸기로부터 선택된다. R 은 특히 바람직하게는 H, 페닐, 비페닐 또는 터페닐 또는 탄소 원자를 통해 연결되어 있는 N-페닐카르바졸기로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0044]

본 발명의 추가로 바람직한 구현예에서, Ar¹ 은 각각 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있는 페닐, 비페닐, 터페닐 또는 퀴터페닐로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0045]

본 발명의 추가로 바람직한 구현예에서, Ar² 은 각 경우 상동적으로 또는 상이하게 각각 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있는 페닐, 비페닐, 터페닐 또는 퀴터페닐로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0046]

본 발명의 추가로 바람직한 구현예에서, R¹ 은 각 경우 상동적으로 또는 상이하게 H, F, 1 내지 10 개의 C 원자를 지닌 직쇄 알킬기, 3 내지 10 개의 C 원자를 지닌 분지형 또는 고리형 알킬기로서, 하나 이상의 비인접 CH₂ 기들이 R²C=CR² 에 의해 치환될 수 있으며, 하나 이상의 H 원자들이 F 에 의해 치환될 수 있는 것, 또는 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있는 6 내지 10 개의 C 원자를 지닌 아릴기로 이루어진 군, 또는 각각 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있는 디벤조푸란 또는 디벤조티오펜기, 또는 탄소 원자를 통해 연결되어 있고 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있는 카르바졸기로부터 선택된다.

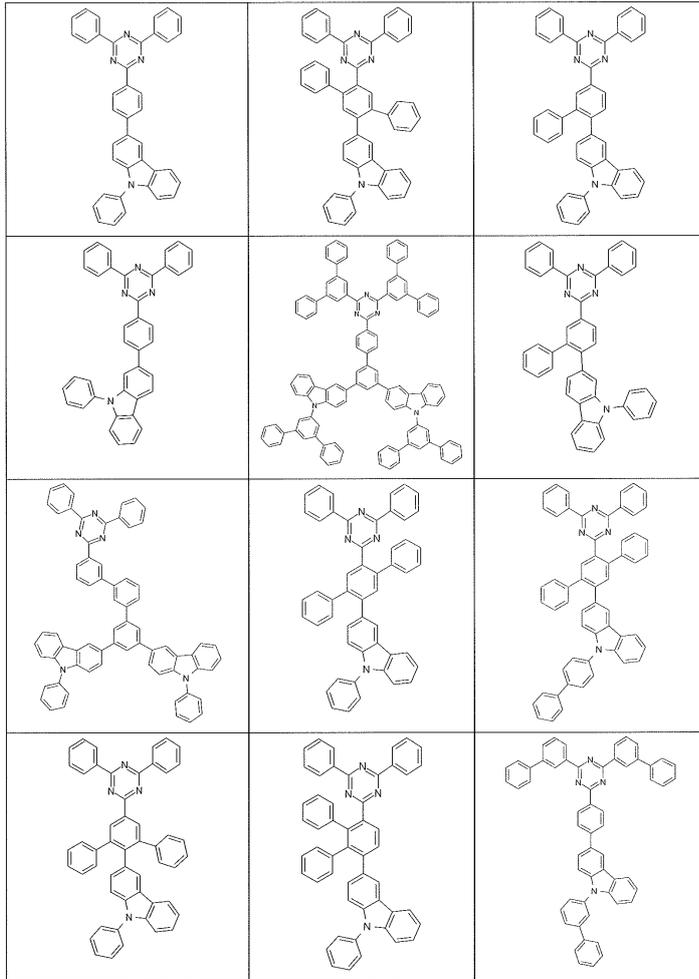
[0047]

R¹ 은 특히 바람직하게는 각 경우 상동적으로 또는 상이하게 H, 1 내지 5 개의 C 원자를 지닌 직쇄 알킬기 또는 3 내지 5 개의 C 원자를 지닌 고리형 알킬기, 또는 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있는 6 내지 10 개의 C

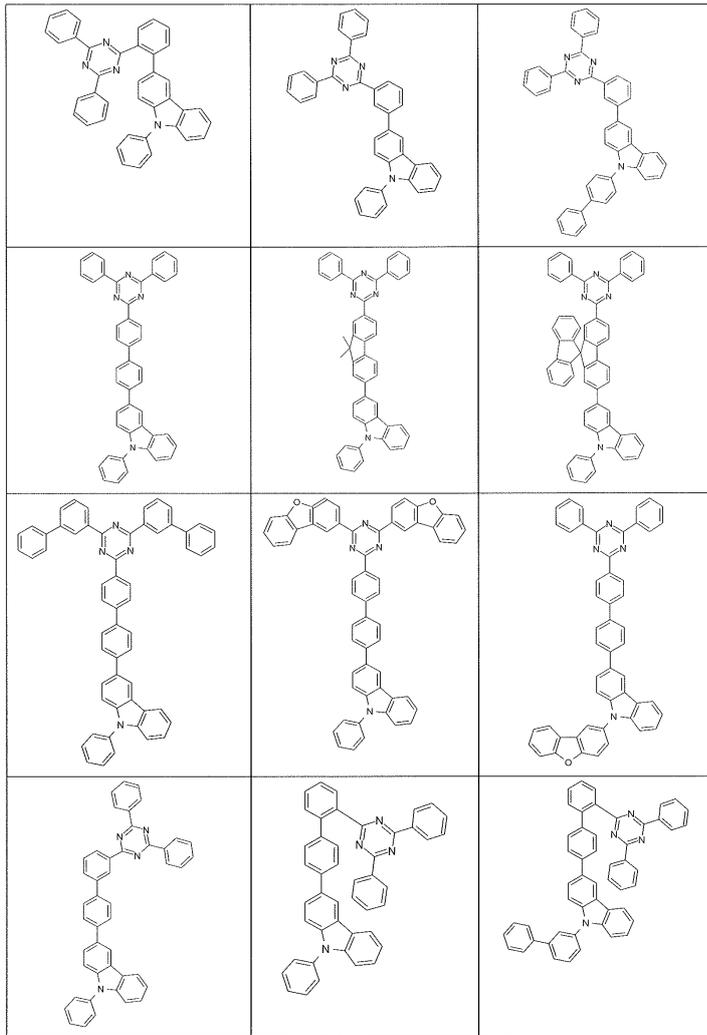
원자를 지닌 아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된다.

- [0048] 본 발명의 상기 언급된 구현예들은 필요에 따라 서로 조합될 수 있다. 상기에서 바람직한 것으로 언급된 구현예들은 특히 바람직하게는 서로 조합된다.
- [0049] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 화학식 (1), (2), (2a), (2b) 및 (2c) 의 화합물에 대해 사용되는 기호 및 지수에 이하의 것이 적용된다:
- [0050] Ar 은, 각 경우 상동적으로 또는 상이하게, 상기 언급된 화학식 (3), (4) 또는 (5) 의 기를 나타내거나 (여기서 n 은 1, 2 또는 3 임); 또는 하나 이상의 라디칼 R¹ 에 의해 치환될 수 있는 플루오레닐렌 또는 스피로 비플루오레닐렌기 (여기서, n 은 1) 을 나타내고;
- [0051] R 은, 각 경우 상동적으로 또는 상이하게, H, D, F, CN, 페닐, 비페닐 또는 터페닐로서, 상기 언급된 기들의 각 아릴기들이 하나 이상의 라디칼 R¹ 에 의해 치환될 수 있고, R¹ 이 바람직하게는, 각 경우 상동적으로 또는 상이하게 H 또는 1 내지 5 개의 C 원자를 지닌 알킬기를 나타내는 것, 또는 탄소 원자를 통해 연결되어 있고, 하나 이상의 라디칼 R¹ 에 의해 치환될 수 있는 카르바졸로 이루어진 군으로부터 선택되고;
- [0052] Ar¹ 은 페닐, 비페닐, 터페닐 또는 쿼터페닐로서, 각각 하나 이상의 라디칼 R¹ 에 의해 치환될 수 있는 것들로 이루어진 군으로부터 선택되고;
- [0053] Ar² 은, 각 경우 상동적으로 또는 상이하게, 페닐, 비페닐, 터페닐 또는 쿼터페닐로서, 각각 하나 이상의 라디칼 R¹ 에 의해 치환될 수 있는 것들로 이루어진 군으로부터 선택되고;
- [0054] R¹ 은, 각 경우 상동적으로 또는 상이하게, H, D, F, 1 내지 10 개의 C 원자를 지닌 직쇄 알킬기 또는 3 내지 10 개의 C 원자를 지닌 분지형 또는 고리형 알킬기로서, 하나 이상의 비-인접 CH₂ 기들이 R²C=CR² 에 의해 치환될 수 있고, 하나 이상의 H 원자들이 F 에 의해 치환될 수 있는 것, 또는 6 내지 10 개의 C 원자를 지니고, 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있는 아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되거나, 또는 각각 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있는 디벤조푸란 또는 디벤조티오펜기이거나; 또는 탄소 원자를 통해 연결되어 있고, 하나 이상의 라디칼 R² 에 의해 치환될 수 있는 카르바졸기이다.
- [0055] 본 발명의 특별히 바람직한 구현예에서, 화학식 (1), (2), (2a), (2b) 및 (2c) 의 화합물에 대해 사용되는 기호 및 지수에 이하의 것이 적용된다:
- [0056] -(Ar)_n- 은 상기 제시된 화학식 (6) 내지 (20) 중 하나의 기를 나타내고;
- [0057] R 은, 각 경우 상동적으로 또는 상이하게, H, 페닐, 비페닐, 터페닐 또는, 탄소 원자를 통해 연결되어 있는 N-페닐-카르바졸기로 이루어진 군으로부터 선택되고;
- [0058] Ar¹ 은 페닐, 비페닐, 터페닐 또는 쿼터페닐로서, 각각 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있는 것으로 이루어진 군으로부터 선택되고;
- [0059] Ar² 은, 각 경우 상동적으로 또는 상이하게, 페닐, 비페닐, 터페닐 또는 쿼터페닐로서, 각각 하나 이상의 라디칼 R¹ 로 치환될 수 있는 것으로 이루어진 군으로부터 선택되고;
- [0060] R¹ 은, 각 경우 상동적으로 또는 상이하게, H, 1 내지 5 개의 C 원자를 지닌 직쇄 알킬기 또는 3 내지 5 개의 C 원자를 지닌 분지형 또는 고리형 알킬기, 또는 6 내지 10 개의 C 원자를 지닌 아릴기로서, 하나 이상의 라디칼 R² 로 치환될 수 있는 것으로 이루어진 군으로부터 선택된다.

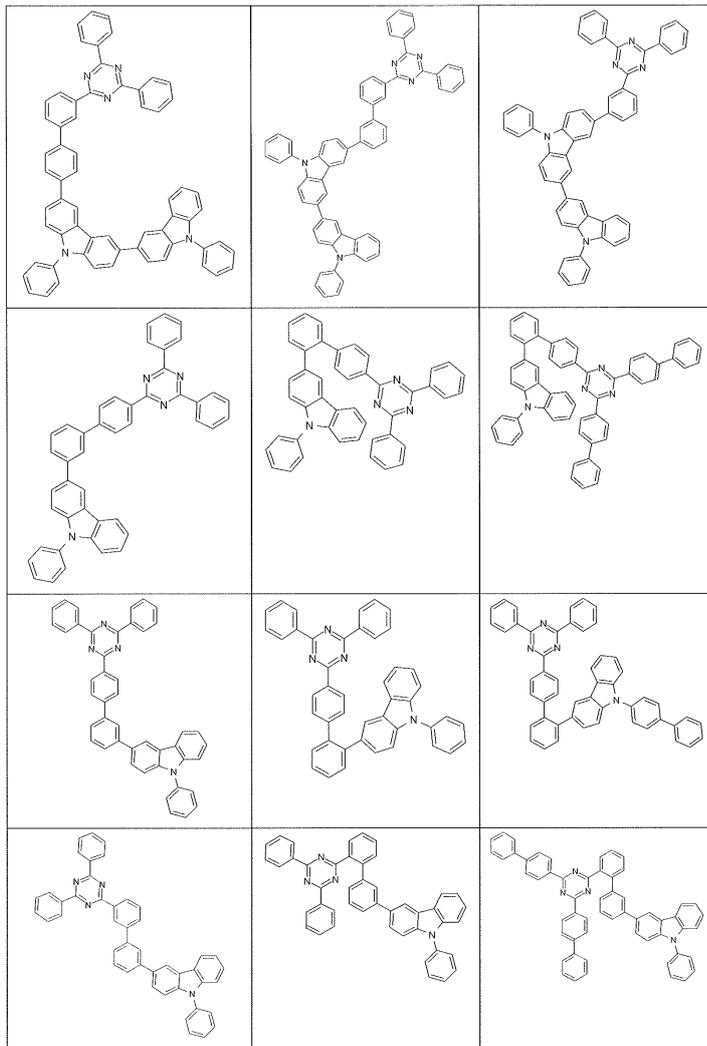
[0061] 본 발명에 따른 화합물의 예시는 하기 제시된 구조들이다.



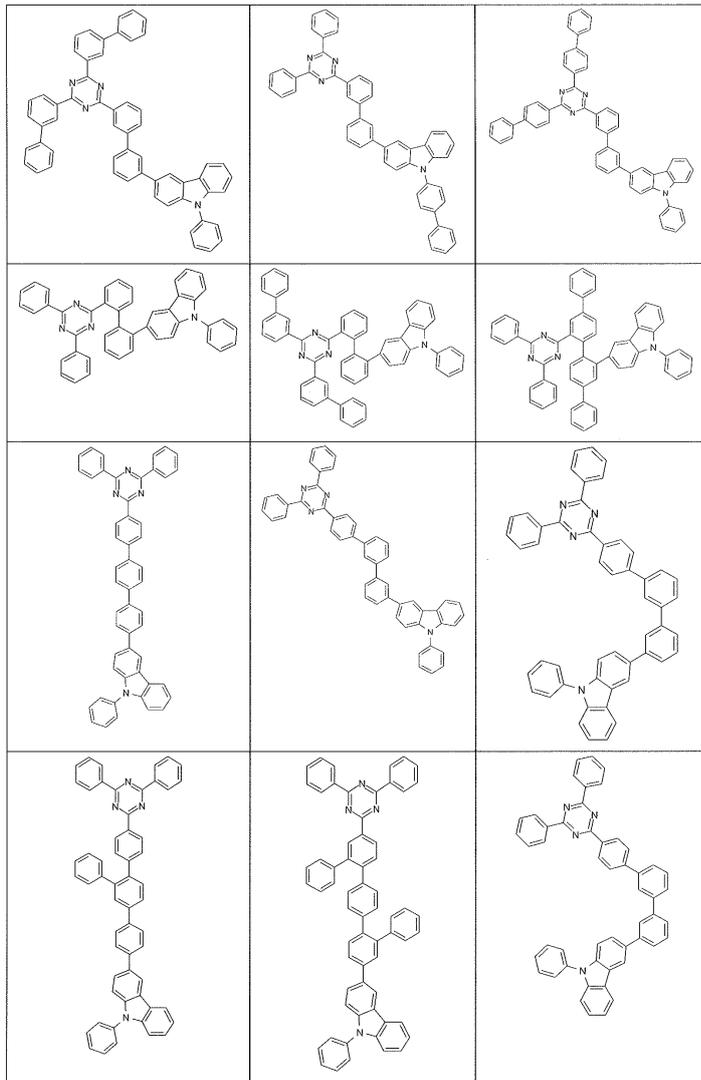
[0062]



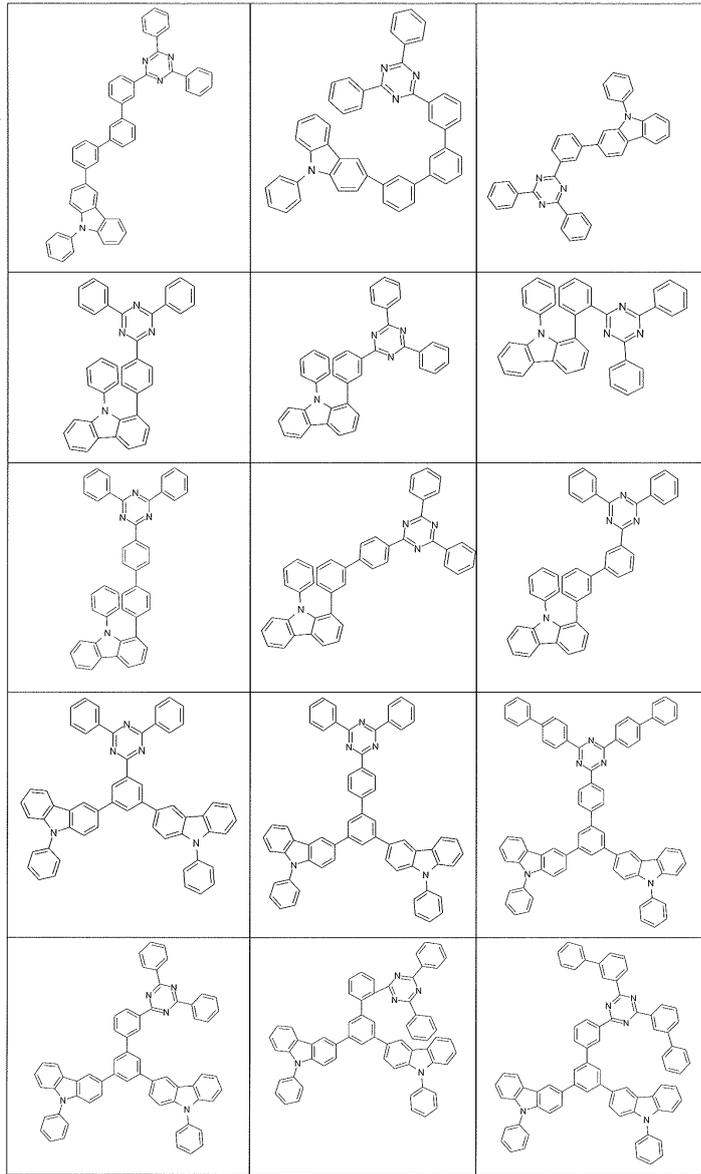
[0063]



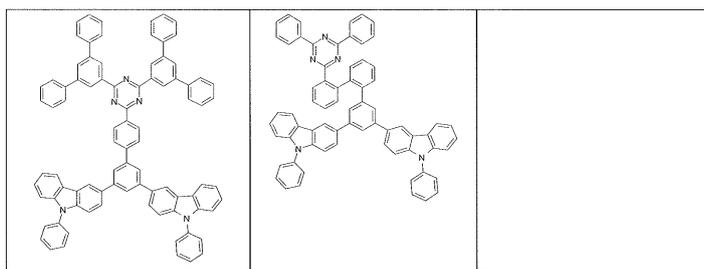
[0064]



[0065]



[0066]

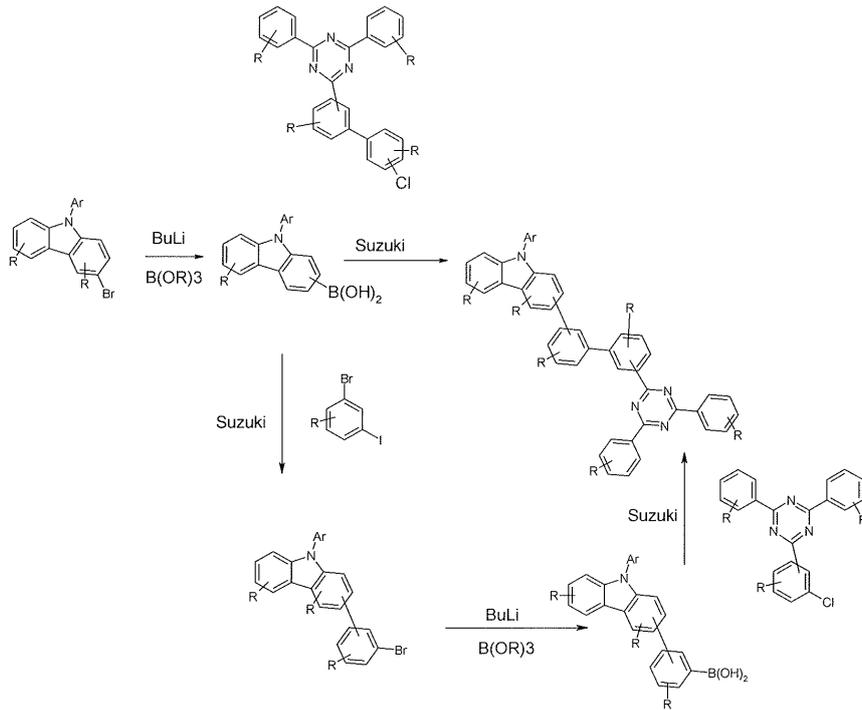


[0067]

[0068]

본 발명에 따른 화합물들은 예를 들어 브롬화, Suzuki 커플링, Ullmann 커플링, Hartwig-Buchwald 커플링 등과 같은 당업자에게 공지된 합성 단계로 제조될 수 있다. 적합한 합성 공정은 하기 반응식 1에 일반적 용어로 제시되어 있다:

[0069] 반응식 1



[0070]

[0071] 따라서, 본 발명은 단위체 $(Ar^2)_2$ 트리아진- $(Ar)_n$ 이 Suzuki 커플링에 의해 도입되는 것을 특징으로 하는 본 발명에 따른 화합물의 제조 방법에 관한 것이다.

[0072] 본 발명은 나아가 본 발명에 따른 하나 이상의 화합물 및 하나 이상의 추가 화합물을 함유하는 혼합물에 관한 것이다. 추가의 화합물은 예를 들어 본 발명에 따른 화합물이 매트릭스 재료, 특히 인광 도펀트로서 사용되는 경우 형광 또는 인광 도펀트일 수 있다. 적합한 도펀트는 유기 전계발광 소자와 연계하여 하기 제시하며, 본 발명에 따른 혼합물용으로 바람직하다.

[0073] 예를 들어 스핀 코팅 또는 인쇄 프로세스에 의해 용액 또는 액상으로부터의 가공을 위해서는, 본 발명에 따른 화합물 또는 혼합물의 용액 또는 제형물이 필요하다. 둘 이상의 용매의 혼합물을 사용하는 것이 바람직할 수 있다. 적합하고 바람직한 용매는 예를 들어 톨루엔, 아니솔, o-, m- 또는 p-자일렌, 메틸 벤조에이트, 디메틸아니솔, 메시틸렌, 테트라린, 베라트롤, THF, 메틸-THF, THP, 클로로벤젠, 디옥산 또는 이들 용매의 혼합물이다.

[0074] 따라서, 본 발명은 추가로 본 발명에 따른 하나 이상의 화합물 또는 혼합물 및 하나 이상의 용매, 특히 유기 용매를 함유하는 제형물, 특히 용액, 현탁액 또는 미니에멀전에 관한 것이다. 그러한 유형의 용액이 제조될 수 있는 방법은 당업자에게 공지되어 있으며, 예를 들어 WO 2002/072714, WO 2003/019694 및 이들의 인용 문헌에 기재되어 있다.

[0075] 본 발명에 따른 화합물 및 혼합물은 전자 소자에 사용하기에 적합하다. 전자 소자는 하나 이상의 유기 화합물을 함유하는 하나 이상의 층을 포함하는 소자를 의미하는 것으로 취해진다. 그러나, 본원에서 구성성분은 또한 유기 재료 또는 무기 재료로부터 전적으로 이루어진 층을 포함할 수도 있다.

[0076] 따라서, 본 발명은 전자 소자, 특히 유기 전계발광 소자에서의 본 발명에 따른 화합물 또는 혼합물의 용도에 관한 것이다.

[0077] 본 발명은 나아가 상기 언급된 본 발명에 따른 화합물 또는 혼합물 중 하나 이상을 함유하는 전자 소자에 관한 것이다. 화합물에 대해 상기 언급되었던 바람직한 것이 전자 소자에도 적용된다.

[0078] 전자 소자는 바람직하게는 유기 전계발광 소자 (OLED, PLED), 유기 집적 회로 (O-IC), 유기 전계 효과 트랜지스터 (O-FET), 유기 박막 트랜지스터 (O-TFT), 유기 발광 트랜지스터 (O-LET), 유기 태양 전지 (O-SC), 유기 염료-감작 태양 전지, 유기 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 필드-오프 장치 (O-FQDs), 발광 전기화학 전지 (LECs), 유기 레이저 다이오드 (O-lasers) 및 "유기 플라즈몬 발광 소자" 로 이루어진 군으로부터 선택되며 (D.

M. Koller *et al.*, *Nature Photonics* 2008, 1-4), 바람직하게는 유기 전계발광 소자 (OLED, PLED), 특별히 인광 OLED 이다.

[0079] 유기 전계발광 소자는 캐소드, 애노드 및 하나 이상의 발광층을 포함한다. 이들 층과는 별도로, 또한 예를 들어 각 경우 하나 이상의 정공-주입층, 정공-수송층, 정공-차단층, 전자-수송층, 전자-주입층, 엑시톤 (exciton)-차단층, 전자-차단층 및/또는 전하-생성층에 추가의 층을 포함할 수 있다. 마찬가지로, 예를 들어 두 층 사이에 엑시톤-차단 기능을 지닌 사이층이 도입되는 것도 가능하다. 그러나, 각각의 그러한 층들이 반드시 존재할 필요는 없다는 점을 지적해야 한다. 여기서 유기 전계발광 소자는 하나의 발광층 또는 여러 발광층을 포함할 수 있다. 여러 발광층이 존재하는 경우, 이들은 바람직하게는 전체적으로 380 nm 내지 750 nm 의 여러 발광 최대값을 지니게 되어, 전반적으로 백색 발광, 즉 형광 또는 인광을 낼 수 있는 다양한 발광 화합물들이 발광층에 이용된다. 특히 바람직한 것은 청색, 녹색 및 오렌지색 또는 적색 발광을 내는 3 개 발광층을 지닌 시스템이다 (기본적 구조에 대한 참고문헌은, 예를 들어 WO 2005/011013). 이들은 형광 또는 인광 발광층일 수 있고, 여기서 형광 및 인광 발광층은 서로 병용된다.

[0080] 상기 제시된 구현예에 따르면 본 발명에 따른 화합물은 정밀 구조에 따라 다양한 층에 채용될 수 있다. 정밀 치환에 따라서는 인광 발광체 및/또는 전자-수송층 및/또는 전자-차단 또는 엑시톤-차단층 및/또는 정공-수송층을 위한 형광 또는 인광 발광체를 위한 매트릭스 재료로서 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물을 함유하는 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 상기 제시된 바람직한 구현예는 또한 유기 전자 소자에서의 재료 이용에도 적용된다.

[0081] 본 발명의 바람직한 구현예에서, 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물은 발광층에서 특별하게는 인광 화합물을 위한 인광 화합물 또는 형광 화합물을 위한 매트릭스 재료로서 채용된다. 여기서, 유기 전계발광 소자는 하나의 발광층 또는 여러개의 발광층을 포함하는데, 여기서 하나 이상의 발광층이 본 발명에 따른 하나 이상의 화합물을 매트릭스 재료로서 함유한다.

[0082] 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물이 발광층에서의 발광 화합물을 위한 매트릭스 재료로 채용되는 경우, 이는 하나 이상의 인광 재료 (삼중항 발광체) 와 병용하여 채용된다. 본 발명의 맥락에서 인광이란 1 을 초과하는 스핀 다중도를 지닌 여기된 상태, 특히 여기된 삼중항 상태로부터의 발광을 의미하는 것으로 취해진다. 본 출원의 목적 상, 모든 발광 전이-금속 착물 및 발광 란탄 착물, 특히 모든 이리듐, 백금 및 구리 착물이 인광 화합물로 간주된다.

[0083] 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물 및 발광 화합물을 함유하는 혼합물은 발광체 및 매트릭스 재료를 함유하는 전체 혼합물을 기준으로 99 내지 1 부피%, 바람직하게는 98 내지 10 부피%, 특히 바람직하게는 97 내지 60 부피%, 특별하게는 95 내지 80 부피% 의 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물을 함유한다. 상응하여, 혼합물은 발광체 및 매트릭스 재료를 함유하는 전체 혼합물을 기준으로 1 내지 99 부피%, 바람직하게는 2 내지 90 부피%, 특히 바람직하게는 3 내지 40 부피%, 특별히 5 내지 20 부피% 의 발광체를 함유한다.

[0084] 본 발명의 추가의 바람직한 구현예는 추가 매트릭스 재료와 병용되는 인광 발광체용 매트릭스 재료로서의 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물의 용도이다. 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물과 병용하여 채용될 수 있는 특히 적합한 매트릭스 재료는 예를 들어 WO 2004/013080, WO 2004/093207, WO 2006/005627 또는 WO 2010/006680 에 따른 방향족 케톤, 방향족 포스핀 옥시드 또는 방향족 술폰옥시드 또는 술폰, 또는 WO 2005/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527 또는 WO 2008/086851 에 개시되어 있는 트리아릴아민, 카르바졸 유도체, 예를 들어 CBP (N,N-비스-카르바졸릴비페닐), 예를 들어 WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따른 인돌로카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 2010/136109 및 WO 2011/000455 에 따른 인데노카르바졸 유도체, 예를 들어 EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160 에 따른 아자-카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 2007/137725 에 따른 양극성 매트릭스 재료, 예를 들어 WO 005/111172 에 따른 실란, 예를 들어 WO 2006/117052 에 따른 아자보롤, 예를 들어 WO 2010/015306, WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따른 트리아진 유도체, 예를 들어 EP 652273 또는 WO 2009/062578 에 따른 아연 착물, 예를 들어 WO 2010/054729 에 따른 디아자실롤 또는 테트라아자실롤 유도체, 예를 들어 WO 2010/054730 에 따른 디아자포스폴 유도체, 예를 들어 US 2009/0136779, WO 2010/050778, WO 2011/042107, WO 2011/088877 또는 미공개 출원 EP 11003232.3 에 따른 가교된 카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 2012/048781 에 따른 트리페닐렌 유도체, 또는 예를 들어 WO 2011/116865 또는 WO 2011/137951 에 따른 락탐이다. 실제 발광체보다 더 짧은 파장에서 발광하는 추가적인 인광 발광체가 마찬가지로 보조-호스트로서 혼합물에 존재할 수 있다.

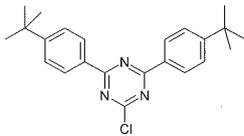
- [0085] 적합한 인광 화합물 (= 삼중항 발광체) 은 특히 적합한 여기서 바람직하게는 가시광선 영역에서 발광하며, 추가로 원자 번호 20 초과, 바람직하게는 38 초과 및 84 미만, 특히 바람직하게는 56 초과 및 80 미만인 하나 이상의 원자를 포함하는 화합물, 특별하게는 그러한 원자 번호의 금속이다. 사용되는 인광 발광체는 바람직하게는 구리, 몰리브덴, 텅스텐, 레늄, 루테튬, 오스뮴, 로듐, 이리듐, 팔라듐, 백금, 은, 금 또는 유로퓸을 포함하는 화합물, 특히 이리듐 또는 백금을 포함하는 화합물이다. 본 발명의 목적상, 상기 언급된 금속을 함유하는 모든 발광 화합물들은 인광 화합물로 간주된다.
- [0086] 상기 기재된 발광체의 예시는 출원 WO 00/70655, WO 2001/41512, WO 2002/02714, WO 2002/15645, EP 1191613, EP 1191612, EP 1191614, WO 05/033244, WO 05/019373, US 2005/0258742, WO 2009/146770, WO 2010/015307, WO 2010/, WO 2010/054731, WO 2010/054728, WO 2010/086089, WO 2010/099852, WO 2010/102709, WO 2011/032626, WO 2011/, WO 2011/157339 또는 WO 2012/007086 에서 밝혀졌다. 일반적으로, 인광 OLED 용으로 선행 기술에 따라 사용되고, 유기 전계발광 분야의 당업자에게 공지된 모든 인광 착물들이 적합하며, 당업자는 모든 신규성 없이 추가 인광 착물을 이용할 수 있다.
- [0087] 본 발명의 추가 구현예에서, 예를 들어 WO 2005/053051 에 기재된 바와 같이 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자는 별도의 정공-주입층 및/또는 정공-수송층 및/또는 정공-차단층 및/또는 전자-수송층을 포함하지 않으며, 즉 발광층이 정공-주입층 또는 애노드에 직접 인접하지 않고/않거나 발광층이 전자-수송층 또는 전자-주입층 또는 캐소드에 직접 인접하지 않는다. 추가로, 예를 들어 WO 2009/030981 에 기재된 바와 같이 발광층에 직접 인접한 정공-수송 또는 정공-주입 재료로서 발광층 중의 금속 착물과 동일하거나 또는 유사한 금속 착물을 이용하는 것이 가능하다.
- [0088] 정공-수송층 또는 정공-주입층 또는 엑시톤- 또는 전자-차단층에 본 발명에 따른 화합물을 채용하는 것도 가능하다.
- [0089] 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자의 추가 층에 선행 기술에 따라 일반적으로 채용되는 모든 재료를 이용하는 것이 가능하다. 따라서, 당업자는 신규성 없이 화학식 (1) 또는 바람직한 구현예에 따른 화합물과 병용하여 유기 전계발광 소자용으로 공지된 모든 재료를 채용하는 것이 가능하다.
- [0090] 추가로, 10^{-5} mbar 미만, 바람직하게는 10^{-6} mbar 미만의 초기 압력에서 진공 승화 단위체에 재료가 증기-증착되는 승화 프로세스를 수단으로 하여 하나 이상의 층이 코팅되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 그러나, 초기 압력은 예를 들어 10^{-7} mbar 미만으로 더 높거나 또는 더 낮을 수 있다.
- [0091] 하나 이상의 층이 OVPD (유기 증기상 증착 (organic vapour phase deposition)) 프로세스를 수단으로 하거나 또는 10^{-5} mbar 내지 1 bar 의 압력에서 재료가 적용되는 담체-기체 승화의 보조를 이용하여 코팅되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 그러한 프로세스의 특별한 경우는 OVJP (유기 증기 젯트 인쇄) 프로세스인데, 여기서 재료가 노즐을 통해 적용되고, 이에 따라 구조형성된다 (예를 들어, M. S. Arnold et al., *Appl. Phys. Lett.* **2008**, *92*, 053301).
- [0092] 추가로, 예를 들어 스핀 코팅에 의해 또는 예를 들어 잉크-젯 인쇄, LITI (광 유도 가열 이미징, 가열 이동 인쇄), 스크린 인쇄, 플렉소그래픽 인쇄, 오프셋 인쇄 또는 노즐 인쇄와 같은 임의의 원하는 인쇄 프로세스를 수단으로 하는 것과 같이, 용액으로부터 하나 이상의 층이 제조되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 소자가 바람직하다. 예를 들어 적합한 치환에 의해 수득되는 가용성 화합물들이 이러한 목적에 필수적이다.
- [0093] 예를 들어 하나 이상의 층이 용액으로부터 적용되고, 하나 이상의 추가적인 층이 증기 증착에 의해 적용되는 하이브리드 프로세스가 또한 가능하다. 따라서, 예를 들어 용액으로부터 발광층을 적용하고, 증기 증착에 의해 전자-수송층을 적용하는 것이 가능하다.
- [0094] 그러한 프로세스는 일반적으로 당업자에게 공지되어 있으며, 신규성 없이 본 발명에 따른 화합물을 함유하는 유기 전계발광 소자에 적용될 수 있다.
- [0095] 유기 전계발광 소자 사용시, 본 발명에 따른 화합물은 선행 기술에 비해 다음과 같은 놀라운 장점을 하나 이상 지닌다:
- [0096] 1. 해당 소자의 전력 효율은 선행 기술에 따른 시스템에 비해 증대된다.
- [0097] 2. 해당 소자의 안정성은 선행 기술에 따른 시스템에 비해 증대되어, 특히 더 긴 수명으로 반증된다.

- [0098] 3. 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자는 저감된 작동 전압을 지닌다.
- [0099] 4. 본 발명에 따른 화합물은 쉽게 접근가능하게 고수율로 합성되어 존재한다.
- [0100] 5. 본 발명에 따른 화합물은 매우 우수한 열 안정성을 지니며, 따라서 높은 승화 안정성을 지닌다.
- [0101] 이제, 본 발명을 이에 제한됨 없이 하기 실시예에 의해 더욱 상세하게 설명한다.

[0102] **실시예**

[0103] 이하의 합성은, 달리 언급되지 않으면 보호-기체 분위기 하에 건조된 용매에서 실시된다. 용매 및 시약은 예를 들어 Sigma-ALDRICH 또는 ABCR 로부터 구매할 수 있다. 해당하는 CAS 번호는 또한 문헌으로부터 공지된 각 화합물에 대해 제공된다.

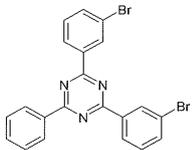
[0104] **실시예 1: 2,4-비스-(4-tert-부틸페닐)-6-클로로-1,3,5-트리아진**



[0105]

[0106] 5.7 g 의 마그네슘 (234.6 mmol) 을 먼저 500 ml 4-분지 플라스크에 도입하고, 50 g 의 브로모-4-tert-부틸페닐 (234.6 mmol) 의 200 ml 의 THF 중 용액을 서서히 적가했다. 반응 혼합물을 비등 상태에서 1.5 h 동안 가열하고, 후속하여 실온으로 냉각시켰다. 200 ml 의 THF 중의 시아노겐 클로라이드 (18.8 g, 102 mmol) 를 먼저 제 2 플라스크에 도입하고, 0°C 로 냉각시켰다. 냉각시킨 Grignard 시약을 그 온도에서 적가하고, 혼합물을 실온에서 12 h 동안 교반했다. 이후, 150 ml 의 HCl 를 반응 혼합물에 첨가하고, 수상을 디클로로메탄으로 3 회 추출했다. 조합한 유기상을 물로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 증발시켰다. 잔사를 에탄올로부터 재결정화했다. 수율은 31 g (81.6 mmol, 80%) 이다.

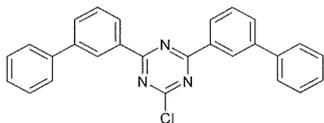
[0107] **실시예 2: 2,4-비스(3-브로모페닐)-6-페닐-1,3,5-트리아진**



[0108]

[0109] 49 ml (392 mmol) 의 벤조일 클로라이드, 52.3 g (392 mmol) 의 AlCl₃ 및 8.5 ml 의 티오닐 클로라이드를 먼저 보호-기체 분위기 하에 500 ml 의 1,2-디클로로벤젠에 도입했다. 300 ml 의 1,2-디클로로벤젠에 용해시킨 150 g (824 mmol) 의 3-브로모벤조니트릴을 상기 용액에 실온에서 적가 깔때기를 통해 적가하고, 후속하여 혼합물을 100°C 에서 1 h 동안 교반한 후, 40°C 에서 18 h 동안 교반했다. 이후, 1.5 l 의 메탄올을 반응 혼합물에 첨가하고, 잔사를 분리했다. 잔사를 뜨거운 메탄올을 이용해 교반하여 세척하여, 59 g (126 mmol) (32%) 의 생성물을 제공했다.

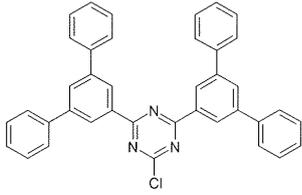
[0110] **실시예 3: 2,4-비스비페닐-3-일-6-클로로-1,3,5-트리아진**



[0111]

[0112] 5.2 g 의 마그네슘 (0.215 mol) 을 먼저 500 ml 4-분지 플라스크에 도입하고, 50 g 의 브로모비페닐 (214 mmol) 의 200 ml 의 THF 중의 용액을 서서히 적가했다. 반응 혼합물을 비등 상태에서 1.5 h 동안 가열하고, 후속하여 실온으로 냉각시켰다. 150 ml 의 THF 중의 시아노겐 클로라이드 (17.2 g, 93 mmol) 를 제 2 플라스크에 도입하고, 0°C 로 냉각시켰다. 이어서, 냉각된 Grignard 시약을 그 온도에서 적가하고, 혼합물을 RT 에서 12 h 동안 교반했다. 이후, 150 ml 의 HCl 를 반응 혼합물에 첨가하고, 수상을 디클로로메탄으로 3 회 추출했다. 조합한 유기상을 물로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 증발시켰다. 잔사를 EtOH 로부터 재결정화했다. 수율은 32.8 g (78 mmol, 84%) 였다.

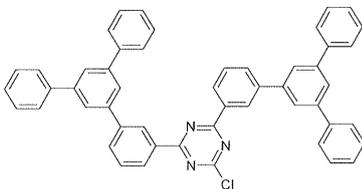
[0113] 실시예 4: 2-클로로-4,6-비스[1,1';3',1'']터페닐-5'-일-1,3,5-트리아진



[0114]

[0115] 3.93 g 의 마그네슘 (162 mmol) 을 먼저 500 ml 4-분지 플라스크에 도입하고, 50 g 의 5'-브로모[1,1';3',1'']터페닐 (162 mmol) 의 150 ml 의 THF 중 용액을 서서히 적가했다. 반응 혼합물을 비등 상태로 1.5 h 동안 가열하고, 후속하여 실온으로 냉각시켰다. 150 ml 의 THF 중의 시아노겐 클로라이드 (13 g, 70 mmol) 를 먼저 제 2 플라스크에 도입하고, 0°C 로 냉각시켰다. 냉각시킨 Grignard 시약을 그 온도에서 적가하고, 혼합물을 실온에서 12 h 동안 교반했다. 이후, 150 ml 의 HCl 를 반응 혼합물에 첨가하고, 수상을 디클로로메탄을 이용해 3 회 추출했다. 조합한 유기상을 물로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 증발시켰다. 잔사를 EtOH 로부터 재결정화했다. 수율은 27.8 g (49 mmol, 70%) 였다.

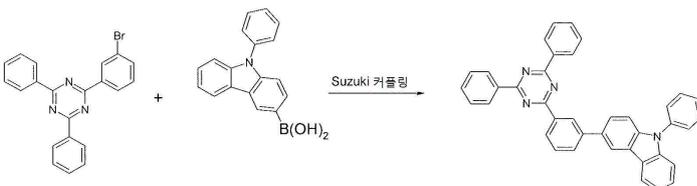
[0116] 실시예 5: 2-클로로-4,6-비스(3-([3,1';5,1'']테르펜-1-일)페닐-1-일)-1,3,5-트리아진



[0117]

[0118] 2.0 g 의 마그네슘 (81 mmol) 을 처음에 500 ml 4-분지 플라스크에 도입하고, 31.2 g 의 5'-(3-브로모페닐)[1,1';3',1'']터페닐 (81 mmol) 의 100 ml 의 THF 중 용액을 서서히 적가했다. 반응 혼합물을 비등 상태에서 1.5 h 동안 가열하고, 후속하여 실온으로 냉각시켰다. 50 ml 의 THF 중의 시아노겐 클로라이드 (6.4 g, 35 mmol) 를 먼저 제 2 플라스크에 넣고, 0°C 로 냉각시켰다. 냉각된 Grignard 시약을 그 온도에서 적가하고, 혼합물을 실온에서 12 h 동안 교반했다. 이후, 150 ml 의 HCl 를 반응 혼합물에 첨가하고, 수상을 디클로로메탄을 이용해 3 회 추출했다. 조합한 유기상을 물로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고 증발시켰다. 잔사를 톨루엔으로부터 재결정화했다. 수율은 6.8 g (9.4 mmol, 28%) 이다.

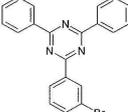
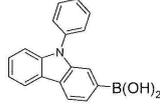
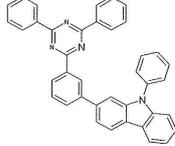
[0119] 실시예 6: 3-[3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐]-9-페닐-9H-카르바졸



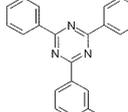
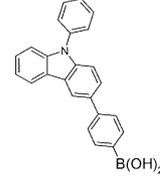
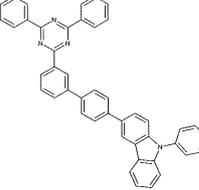
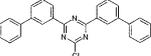
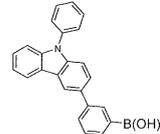
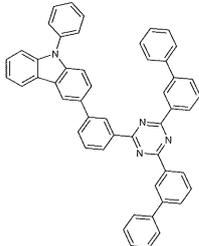
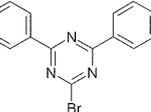
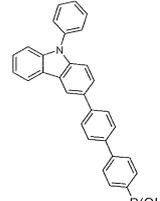
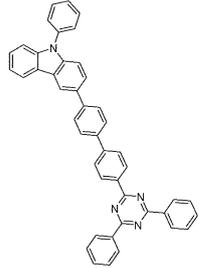
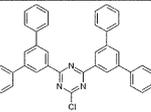
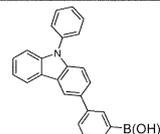
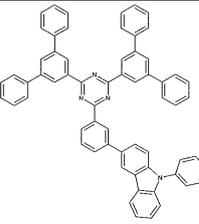
[0120]

[0121] 28.2 g (110.0 mmol) 의 (9-페닐-9H-카르바졸-3-일)보론산, 42.6 g (110.0 mmol) 의 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 및 44.6 g (210.0 mmol) 의 트리오포타슘 포스페이트를 500 ml 의 톨루엔, 500 ml 의 디옥산 및 500 ml 의 물에 현탁시켰다. 913 mg (3.0 mmol) 의 트리-*o*-톨릴포스핀 및 이어서 112 mg (0.5 mmol) 의 팔라듐(II)-아세테이트를 상기 현탁액에 첨가하고, 반응 혼합물을 환류 하에 16 h 동안 가열했다. 냉각 후, 유기상을 분리해내고, 실리카 겔을 통해 여과하고, 200 ml 의 물로 3 회 세척한 후, 후속하여 건조시키 까지 증발시켰다. 잔사를 톨루엔 및 디클로로메탄/이소프로판올로부터 재결정화하고, 최종적으로 고진공 (p = 5 x 10⁻⁷ mbar) 하에 승화시켰다. 순도는 99.9% (HPLC) 였다. 수율은 52 g (94 mmol) 이며, 이는 이론값의 86% 에 해당한다.

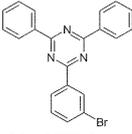
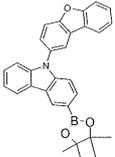
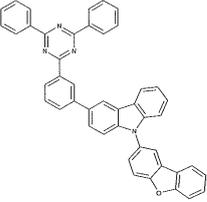
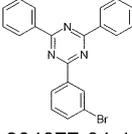
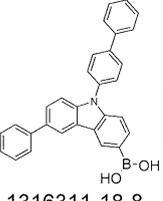
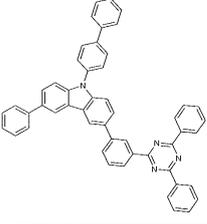
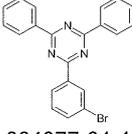
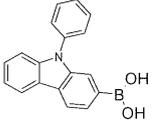
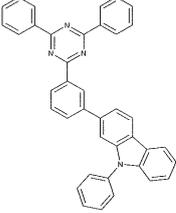
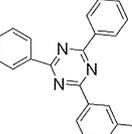
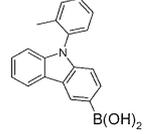
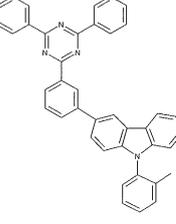
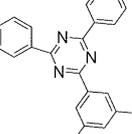
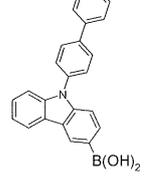
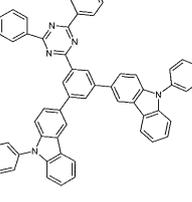
[0122] 하기 화합물들이 유사하게 수득된다:

	출발 재료 1	출발 재료 2	생성물	수율
6a	 864377-31-1	 1001911-63-2		79%

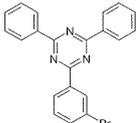
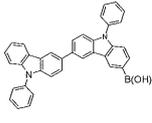
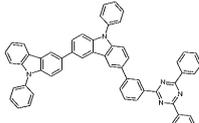
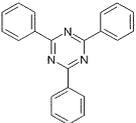
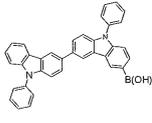
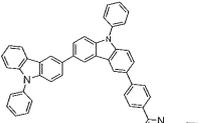
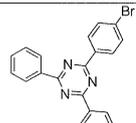
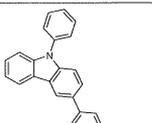
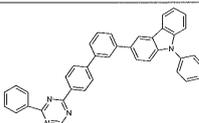
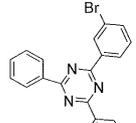
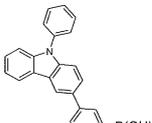
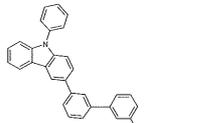
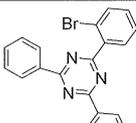
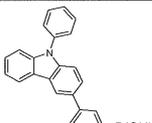
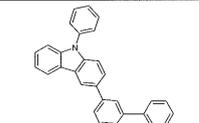
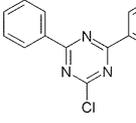
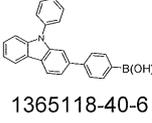
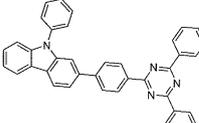
[0123]

6b	 864377-31-1	 40963-55-6		81%
6c		 854952-60-6		83%
6d	 80984-72-8	 1267247-78-8		77%
6e		 854952-60-6		88%

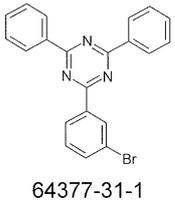
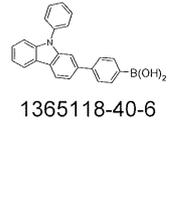
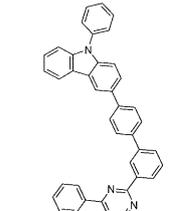
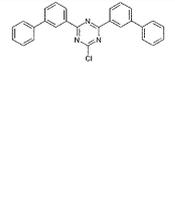
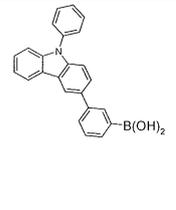
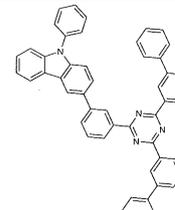
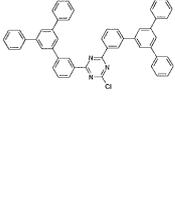
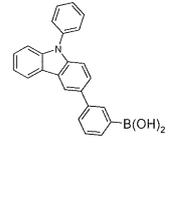
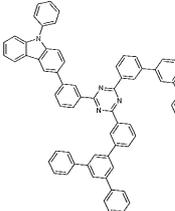
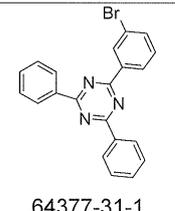
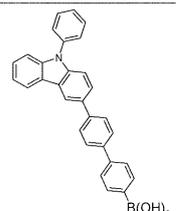
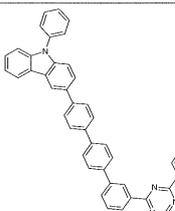
[0124]

6f	 <p>864377-31-1</p>	 <p>1338488-91-7</p>		76%
6g	 <p>864377-31-1</p>	 <p>1316311-18-8</p>		73%
6h	 <p>864377-31-1</p>	 <p>1001911-63-2</p>	 <p>864377-31-1</p>	88%
6i	 <p>864377-31-1</p>	 <p>1133057-95-0</p>		76%
6j	 <p>1073062-59-5</p>	 <p>1028648-22-7</p>		72%

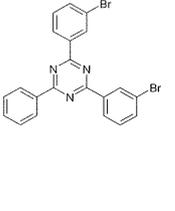
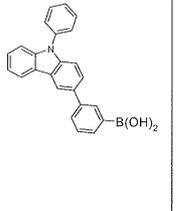
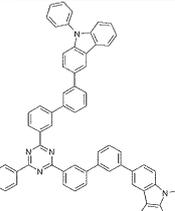
[0125]

6k	 864377-31-1	 918137-86-7		89%
6l	 23449-08-3	 918137-86-7		77%
6m	 23449-08-3	 854952-60-6		85%
6n	 64377-31-1	 854952-60-6		76%
6o	 77989-15-2	 854952-60-6		68%
6p	 80984-79-8	 1365118-40-6		78%

[0126]

6q	 64377-31-1	 1365118-40-6		69%
6r				84%
6s				80%
6t	 64377-31-1	 1267247-78-8		79%

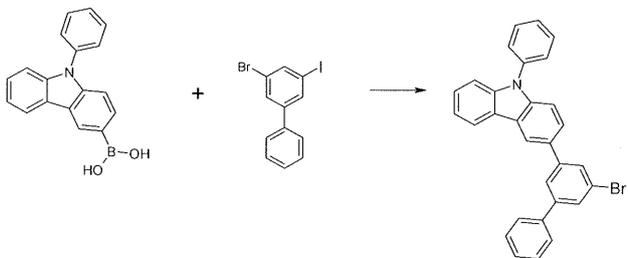
[0127]

6u				69%
----	---	---	---	-----

[0128]

[0129]

실시예 7: 3-(5-브로모비페닐-3-일)-9-페닐-9H-카르바졸



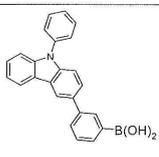
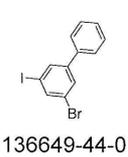
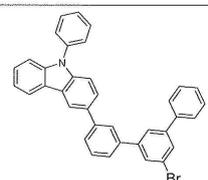
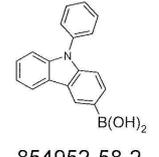
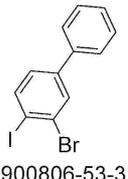
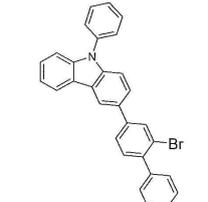
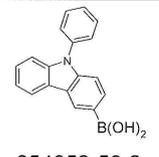
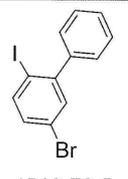
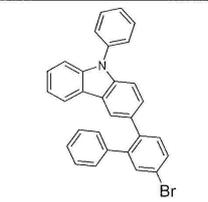
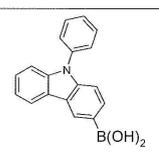
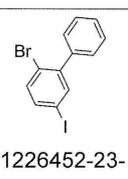
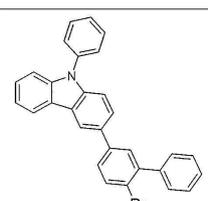
[0130]

[0131]

15.5 g (43.3 mmol) 의 3-브로모-5-요오도비페닐 및 13.7 g (48 mmol) 의 (9-페닐-9H-카르바졸-3-일)보론산을 80 ml 의 톨루엔에 녹이고, 탈기시켰다. 281 ml 의 탈기된 2M K₂CO₃ 용액 및 2.5 g (2.2 mmol) 의 Pd(OAc)₂ 를 첨가했다. 후속하여, 반응 혼합물을 80°C 에서 48 h 동안 보호-기체 분위기에서 교반했다. 냉각된 용액을 톨루엔으로 희석하고, 물로 여러번 세척하고, 건조시키고 증발시켰다. 생성물을 톨루엔/헵탄

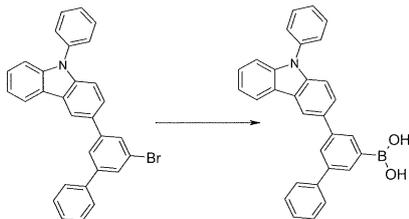
(1:2) 을 이용하는 실리카 겔 상의 컬럼 크로마토그래피로 정제했다. 순도는 98% 였다. 수율: 17.6 g (37 mmol), 이론값의 78%.

[0132] 하기 화합물들이 유사하게 수득되었다:

	출발 재료 1	출발 재료 2	생성물	수율
7a	 854952-60-6	 136649-44-0		70%
7b	 854952-58-2	 900806-53-3		69%
7c	 854952-58-2	 4510-78-5		68%
7d	 854952-58-2	 1226452-23-8		83%

[0133]

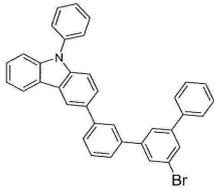
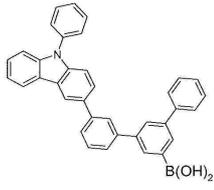
[0134] 실시예 8: 3-(5-(5-브로노비페닐-3-일)-9-페닐-9H-카르바졸



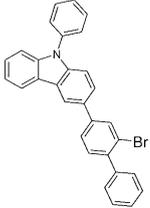
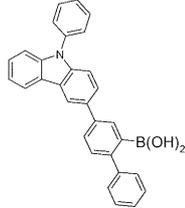
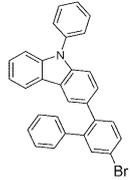
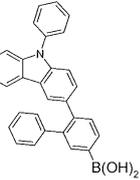
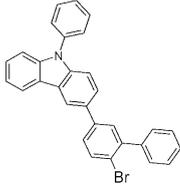
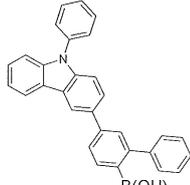
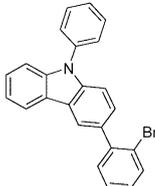
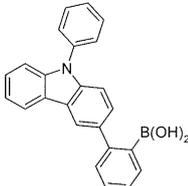
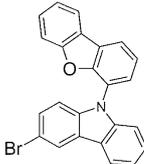
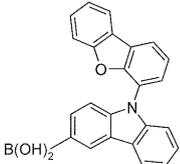
[0135]

[0136] 110 ml (276 mmol) 의 n-부틸리튬 (헥산 중 2.5 M) 을 -78°C 로 냉각시킨, 128 g (270 mmol) 의 3-(5-(5-브로노비페닐-3-일)-9-페닐-9H-카르바졸의 1500 ml 의 디에틸 에테르 중 용액에 적가했다. 반응 혼합물을 -78°C 에서 30 분간 교반했다. 혼합물이 실온이 되도록 하고, -78°C 로 재냉각시키고, 이어서 40 ml (351 mmol) 의 트리메틸 보레이트의 50 ml 의 디에틸 에테르 중 혼합물을 신속히 첨가했다. -10°C 로 승온시킨 후, 혼합물을 135 ml 의 2 N 염산을 이용해 가수분해했다. 유기상을 분리해내고, 물로 세척하고, 황산나트륨 상에서 건조시키고, 건조시까지 증발시켰다. 잔사를 300 ml 의 n-헵탄에 취하고, 무색 고체를 석션으로 여과제거하고, n-헵탄으로 세척하고, 진공에서 건조시켰다. 수율: 112 g (256 mmol), 이론값의 95%.

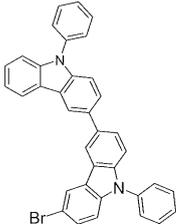
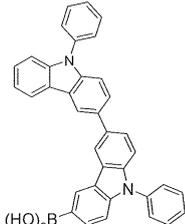
[0137] 하기 화합물들이 유사하게 수득된다:

	출발 재료 1	생성물	수율
8a			64%

[0138]

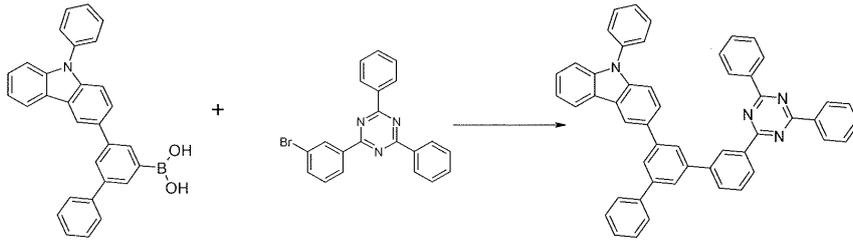
8b			60%
8c			63%
8d			69%
8e	 1190100-35-6		59%
8f	 1345970-20-8		83%

[0139]

8g			73%
----	---	---	-----

[0140]

[0141] 실시예 9: 3-[3''-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)[1,1':3',1'']터페닐-5'-일]-9-페닐-9H-카르바졸



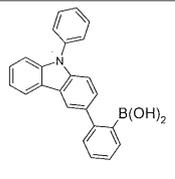
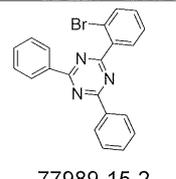
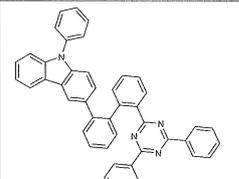
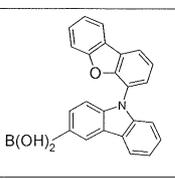
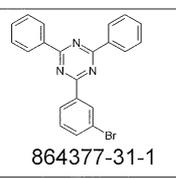
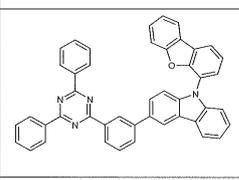
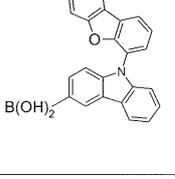
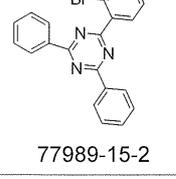
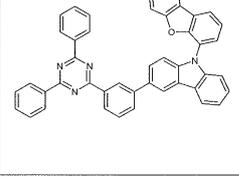
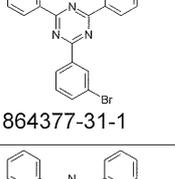
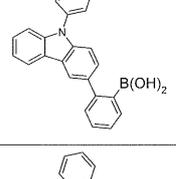
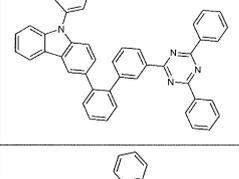
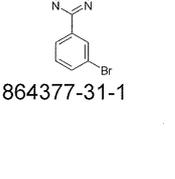
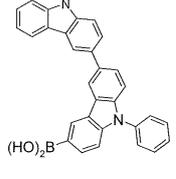
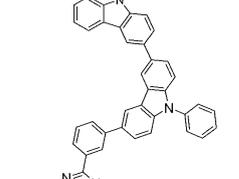
[0142]

[0143] 2.47 g (8.1 mmol) 의 테트라키스트리페닐-포스포노팔라듐(0)을 15.5 g (40 mmol) 의 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진, 17.5 g (40 mmol) 의 3-(5-보로노비페닐-3-일)-9-페닐-9H-카르바졸 및 63.9 g (127 mmol) 의 Na₂CO₃ 의 500 ml 의 DMF 중의 세계 교반하는 현탁액에 첨가하고, 후속하여 혼합물을 환류 하에 16 h 동안 가열했다. 냉각 후, 석출해 낸 고체를 석션으로 여과제거하고, 50 ml 의 톨루엔으로 3 회 세척하고, 50 ml 의 에탄올:물 (1:1, v:v) 을 이용해 3 회, 그리고 100 ml 의 에탄올을 이용해 3 회 세척하고, DMF (약 15 ml/g) 로부터 3 회 재결정화하고, 최종적으로 고진공 (p = 5 x 10⁻⁷ mbar) 하에 승화시켰다. 수율 27 g (38 mmol), 이론값의 85.0%; 순도 99.9% (HPLC)

[0144] 하기 화합물들이 유사하게 수득된다:

	출발 재료 1	출발 재료 2	생성물	수율
9a		 864377-31-1		86%
9b		 77989-15-2		67%
9c		 23449-08-3		69%
9d		 864377-31-1		76%

[0145]

9e		 77989-15-2		82%
9f		 864377-31-1		80%
9g		 77989-15-2		64%
9h	 864377-31-1			73%
9i	 864377-31-1			71%

[0146]

[0147]

실시예: OLED 의 제조

[0148]

본 발명에 따른 OLED 및 선행기술에 따른 OLED 를 본원에 기재된 상황 (층 두께 변화, 재료) 에 맞게 맞추어둔 WO 04/058911 에 따른 일반 프로세스로 제조했다.

[0149]

다양한 OLED 에 대한 데이터를 하기 실시예 V1 내지 E17 (표 1 및 2 참조) 에 제시한다. 개선된 프로세싱에 대해서는 두께 50 nm 로 구조형성된 ITO (인듐 주석 옥사이드) 로 코팅된 유리판을 20 nm 의 PEDOT:PSS (독일 Heraeus Precious Metals GmbH 사에서 CLEVIOS™ VP AI 4083 로 판매하는 폴리-(3,4-에틸렌디옥시티오펜)폴리(스티렌술포네이트) 를 수용액으로부터의 스핀 코팅에 의해 적용) 으로 코팅했다. 그렇게 코팅된 유리판은 OLED 가 적용되어 있는 기판을 형성한다. OLED 은 본래 다음과 같은 층 구조를 지니고 있다: 기판/정공-수송층 (HTL)/중간층 (IL)/전자-차단층 (EBL)/발광층 (EML)/광학 정공-차단층 (HBL)/전자-수송층 (ETL)/임의의 전자-주입층 (EIL) 및 최종적으로 캐소드. 캐소드는 두께가 100 nm 인 알루미늄 캐소드에 의해 형성된다. OLED 의 정밀 구조는 표 1 에 제시되었다. OLED 제조에 필요한 재료는 표 3 에 제시된다. 나아가, 본원에서 "6a" 와 같은 언급은 상기 기재된 실시예 6a 에 언급된 재료에 관한 것이다. 이는 또한 본 발명에 따른 타 화합물들에 대해 유사하게 적용된다.

[0150]

모든 재료들이 진공 챔버에서 가열 증기 증착 (thermal vapour deposition) 에 의해 적용된다. 본원에서 발광층은 늘 하나 이상의 매트릭스 재료 (호스트 재료) 및 발광 도펀트 (발광체) 로 이루어지며, 이는 공동증발에 의해 특정 부피비로 매트릭스 재료 또는 재료들과 혼합된다. H1:VCbz1:TEG1 (55%:35%:10%) 와 같은 표현은 본원에서 재료 H1 가 층 중에 55 부피% 의 비율로 존재하며, VCbz1 가 층 중에 35 부피% 의 비율로 존재하고, TEG1 가 층 중에 10 부피% 의 비율로 존재함을 의미한다. 유사하게, 전자-수송층은 또한 두 재료의 혼합물로 이루어질 수 있다.

[0151] OLED 는 표준 방법에 의해 특징분석될 수 있다. 그러한 목적을 위해, 전계발광 스펙트럼, 전류 효율 (cd/A 로 측정), 전력 효율 (lm/W 로 측정) 및 Lambert 발광 특징을 가정하여 전류/전압/시감 농도 특징 선 (IUL 특징 선) 으로부터 산출되는 시감 농도의 함수로서의 외부 양자 효율 (EQE, 백분율로 측정), 및 수명이 결정된다.

전계발광 스펙트럼은 1000 cd/m² 의 시감 농도에서 결정되고, CIE 1931 x 및 y 색상 좌표가 그로부터 산출된다. 표 2 에서의 표현 U1000 는 1000 cd/m² 의 시감 농도에 필요한 전압을 나타낸다. CE1000 및 PE1000 는 1000 cd/m² 에서 달성되는 전류 및 전력 효율을 나타낸다. 최종적으로, EQE1000 은 1000 cd/m² 의 조작 시감 농도에서의 외부 양자 효율을 나타낸다. 수명 LT 는 일정한 전류에서 조작시 시감 농도가 최초 시감 농도 L0 로부터 특정 비율 L1 로 강하하는 시간으로 정의된다. 표 2 에서 L0 = 10000 cd/m² 및 L1 = 80% 의 표현은, 컬럼 LT 에 표시된 수명이 최초 시감 농도가 10000 cd/m² 에서 8000 cd/m² 로 강하한 시간에 해당함을 의미한다.

[0152] 다양한 OLED 의 데이터가 표 2 에 요약되어 있다. 실시예 V1-V6 는 선행 기술에 따른 재료를 함유하는 OLED 이며, 실시예 E1-E17 은 본 발명에 따른 재료를 함유하는 OLED 의 데이터를 보여준다.

[0153] 실시예 중 일부는 본 발명에 따른 화합물들의 장점을 설명하기 위해 하기에 더욱 상세하게 설명한다. 그러나, 이것은 오직 표 2 에 제시된 데이터의 선별내용을 대변한다는 것을 지적해야 한다. 표로부터 알 수 있는 바와 같이, 선행 기술과 비교되는 개선점은 모든 파라미터에서의 일부 경우에서, 더욱 상세하게 기술되지 않은 본 발명에 따른 화합물의 이용시에도 달성될 수 있는 것이며, 일부의 경우 효율 또는 전압 또는 수명의 개선만이 관찰된다. 그러나, 상기 파라미터들 중 하나의 개선이라도 유의한 진전을 나타내는데, 이는 다양한 적용에서 상이한 파라미터와 관련하여 최적화를 필요로 하기 때문이다.

[0154] **인광 OLED 에서의 매트릭스 재료로서의 본 발명에 따른 화합물의 이용**

[0155] 녹색-발광 도펀트 TEG1 와 병용하여, 본 발명에 따른 재료는 선행 기술에 비해 유의한 개선을 나타낸다. 15% 까지 개선된 전력 효율 (실시예 V1 및 E3) 및 40% 더 나아진 수명 (실시예 V2 및 E3) 이 획득되었다.

[0156] 두 재료를 EML 에서 도펀트 TEG1 과의 혼합물로서 사용하는 경우, H2 의 VCbz1 와의 사용 (실시예 V4 및 E10) 에 비해 본 발명에 따른 재료 6n 을 VCbz1 와 병용하여 사용하면 약 30% 만큼 개선된 수명 및 약 20% 더 높은 효율이 획득되었다.

[0157] 적색-발광 도펀트 TER1 (실시예 V6 및 E17) 의 이용시 유사하게 우수한 개선이 또한 획득되었다.

[0158] 따라서, 본 발명에 따른 재료는 인광 OLED 에서 매트릭스 재료로 사용시 선행 기술에 비해 유의한 개선을 제공하게 된다.

[0159] **본 발명에 따른 화합물의 전자-수송 재료로서의 이용**

[0160] 전자-수송 재료로서 본 발명에 따른 화합물 6n 의 사용시, 선행 기술에 따른 물질 H3 (실시예 V5 및 E16) 을 이용하는 것에 비해 현저히 더 낮은 전압 및 더 나은 효율이 획득된다 (실시예 V5 및 E16).

[0161] 표 1: OLED 의 구조

Ex.	HTL 두께	IL 두께	EBL 두께	EML 두께	HBL 두께	ETL 두께	EIL 두께
V1	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	H1:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
V2	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	H2:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
V3	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	H3:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
V4	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	H2:VCbz1:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	IC1 10nm	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	---
V5	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	H3 40nm	LiQ 3nm
V6	SpA1 90nm	HATCN 5nm	SpMA1 130nm	H1:TER1 (92%:8%) 40nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---

[0162]

E1	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	6:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E2	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	6a:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E3	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	6b:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E4	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	6c:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E5	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	6f:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E6	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	6h:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E7	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	6j:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E8	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	6k:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E9	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	6n:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E10	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	6n:VCbz1:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	IC1 10nm	ST1:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E11	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	6o:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E12	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	6p:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E13	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	9:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E14	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	9f:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E15	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	9h:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E16	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	6n 40nm	LiQ 3nm
E17	SpA1 90nm	HATCN 5nm	SpMA1 130nm	6n:TER1 (92%:8%) 40nm	---	ST1:LiQ (50%:50%) 40nm	---

[0163]

[0164]

표 2: OLED 의 데이터

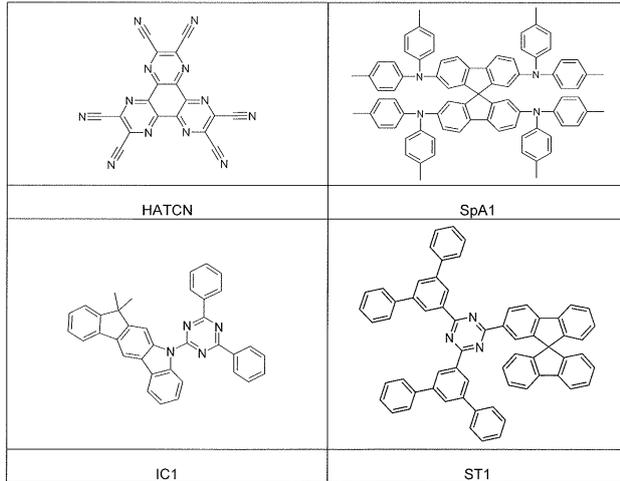
Ex.	U1000 (V)	CE1000 (cd/A)	PE1000 (lm/W)	EQE 1000	CIE x/y at 1000 cd/m ²	L0	L1 %	LT (h)
V1	4.0	55	43	15.3%	0.33/0.62	10000 cd/m ²	80	65
V2	4.1	44	34	12.3%	0.32/0.62	10000 cd/m ²	80	110
V3	4.9	56	36	15.6%	0.33/0.62	10000 cd/m ²	80	105
V4	4.0	50	39	13.8%	0.33/0.62	10000 cd/m ²	80	240
V5	4.4	53	38	14.7%	0.33/0.62	10000 cd/m ²	80	90
V6	4.6	9.3	6.4	9.8%	0.67/0.33	4000 cd/m ²	80	290

[0165]

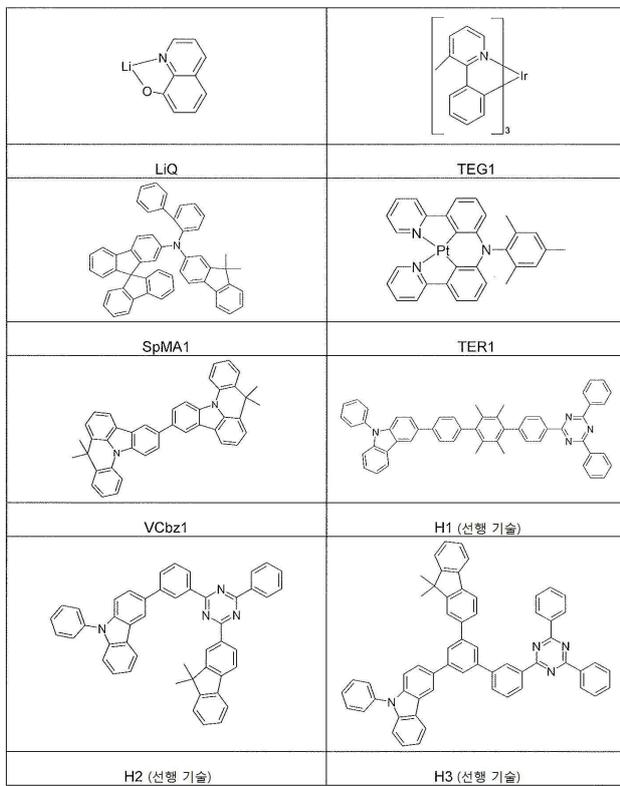
E1	4.2	56	42	15.5%	0.32/0.62	10000 cd/m ²	80	85
E2	4.2	55	41	15.3%	0.33/0.63	10000 cd/m ²	80	115
E3	3.7	59	50	16.5%	0.32/0.62	10000 cd/m ²	80	155
E4	4.4	54	39	15.0%	0.33/0.62	10000 cd/m ²	80	130
E5	4.1	58	44	16.1%	0.33/0.62	10000 cd/m ²	80	120
E6	4.3	51	38	14.3%	0.33/0.62	10000 cd/m ²	80	110
E7	4.0	57	45	15.9%	0.33/0.62	10000 cd/m ²	80	135
E8	4.8	53	35	14.8%	0.33/0.63	10000 cd/m ²	80	90
E9	4.0	60	47	16.8%	0.33/0.62	10000 cd/m ²	80	140
E10	3.8	57	47	15.8%	0.33/0.62	10000 cd/m ²	80	305
E11	4.2	59	44	16.4%	0.33/0.62	10000 cd/m ²	80	140
E12	4.1	57	44	15.9%	0.32/0.63	10000 cd/m ²	80	110
E13	4.1	59	45	16.3%	0.33/0.62	10000 cd/m ²	80	130
E14	3.7	55	46	15.2%	0.33/0.62	10000 cd/m ²	80	105
E15	4.2	60	45	16.6%	0.33/0.62	10000 cd/m ²	80	135
E16	3.2	59	58	16.5%	0.33/0.62	10000 cd/m ²	80	110
E17	4.5	10.8	7.6	11.7%	0.67/0.33	4000 cd/m ²	80	360

[0166]

[0167] 표 3: OLED 를 위한 재료의 구조식



[0168]



[0169]