



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2024년01월17일

(11) 등록번호 10-2625926

(24) 등록일자 2024년01월12일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C07D 491/04 (2006.01) C07D 209/80 (2006.01)
C07D 401/04 (2006.01) C07D 403/04 (2006.01)
C07D 403/10 (2006.01) C07D 403/14 (2006.01)
C07D 405/10 (2006.01) C07D 405/14 (2006.01)
C07D 409/14 (2006.01) C07D 471/04 (2006.01)
C07D 471/06 (2006.01)

(52) CPC특허분류

C07D 491/04 (2013.01)
C07D 209/80 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2019-7024550

(22) 출원일자(국제) 2018년01월22일

심사청구일자 2021년01월13일

(85) 번역문제출일자 2019년08월21일

(65) 공개번호 10-2019-0112026

(43) 공개일자 2019년10월02일

(86) 국제출원번호 PCT/EP2018/051407

(87) 국제공개번호 WO 2018/138039

국제공개일자 2018년08월02일

(30) 우선권주장

17152962.1 2017년01월25일
유럽특허청(EPO)(EP)

(56) 선행기술조사문헌

CN104513192 A*

(뒷면에 계속)

전체 청구항 수 : 총 11 항

심사관 : 최정예

(54) 발명의 명칭 카르바졸 유도체

(57) 요약

본 발명은, 특히 전자 디바이스에서 사용하기 위한, 카르바졸 유도체에 관한 것이다.

본 발명은 또한 본 발

명의 화합물의 제조를 위한 방법 및 이들을 포함하는 전자 디바이스에 관한 것이다.

(52) CPC특허분류

C07D 401/04 (2013.01)
C07D 403/04 (2013.01)
C07D 403/10 (2013.01)
C07D 403/14 (2013.01)
C07D 405/10 (2013.01)
C07D 405/14 (2013.01)
C07D 409/14 (2013.01)
C07D 471/04 (2022.08)
C07D 471/06 (2013.01)

(72) 발명자

요슈텐 도미니크

독일 60487 프랑크푸르트 암 마인 암 바인가르텐 7

그로스만 토비야스

독일 64297 다름슈타트 로이터알레 71

크뢰버 요나스

독일 60311 프랑크푸르트 암 마인 파르가쎄 4

(56) 선행기술조사문헌

KR1020110113468 A*
KR1020120081539 A*
KR1020140100860 A*
KR1020150065383 A*
KR1020160062603 A*
KR1020170120233 A*
KR1020170120767 A*
KR1020080109000 A*
KR1020170134076 A*

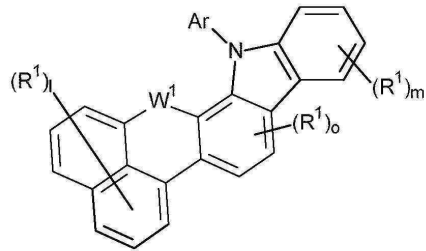
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

명세서

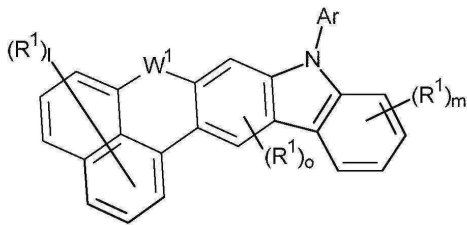
청구범위

청구항 1

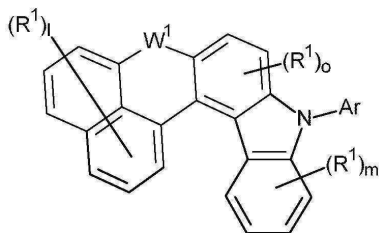
하기 식 (VIa), (VIb), (VIc), (VIe) 또는 (VIf) 의 적어도 하나의 구조를 포함하는 화합물로서



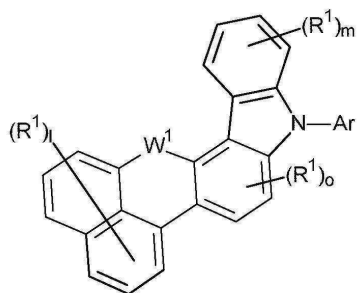
식 (VIa)



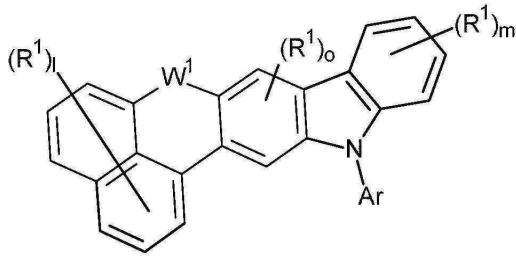
식 (VIb)



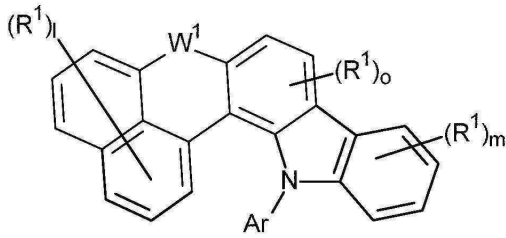
식 (VIc)



식 (VIe)



식 (Vle)



식 (Vlf)

식중에서 사용된 기호들은 다음과 같으며:

W^1 는 O, S, $C(R^1)_2$, 또는 $Si(R^1)_2$ 이고;

R^1 은 각각의 경우 동일 또는 상이하고 H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO_2 , $N(Ar^1)_2$, $N(R^2)_2$, $C(=O)Ar^1$, $C(=O)R^2$, $P(=O)(Ar^1)_2$, $P(Ar^1)_2$, $B(Ar^1)_2$, $B(OR^2)_2$, $Si(Ar^1)_3$, $Si(R^2)_3$, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시 기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시 기 또는 2 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 (이들 각각은 하나 이상의 R^2 라디칼에 의해 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 $-R^2C=CR^2-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^2)_2$, $Ge(R^2)_2$, $Sn(R^2)_2$, C=O, C=S, C=Se, $C=NR^2$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^2-$, NR^2 , $P(=O)(R^2)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 로 대체될 수도 있고 그리고 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 로 대체될 수도 있음), 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각각의 경우에 하나 이상의 R^2 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R^2 라디칼로 치환될 수도 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R^2 라디칼로 치환될 수도 있는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬기, 또는 이들 시스템들의 조합이고; 동시에, 2 개 이상의 인접한 R^1 라디칼들은, 동일한 탄소 원자에 결합되었을 때, 함께 단환 또는 다환의, 지방족, 헤테로지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성할 수도 있고;

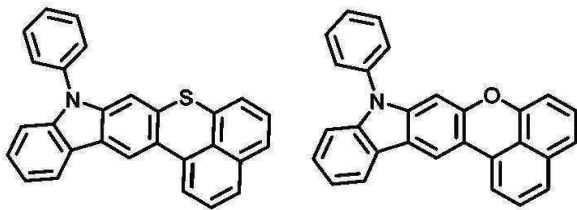
Ar 은 각각의 경우에 동일 또는 상이하고, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R^1 라디칼로 치환될 수도 있는 헤테로방향족 고리 시스템이고;

Ar^1 는 각각의 경우 동일 또는 상이하며, 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R^2 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고; 동시에, 동일한 실리콘 원자, 질소 원자, 인 원자 또는 붕소 원자에 결합된 2 개의 Ar^1 라디칼은 또한, 단일 결합에 의한 브릿지 또는 $B(R^2)$, $C(R^2)_2$, $Si(R^2)_2$, C=O, $C=NR^2$, $C=C(R^2)_2$, O, S, S=O, SO_2 , $N(R^2)$, $P(R^2)$ 및 $P(=O)R^2$ 로부터 선택된 브릿지를 통해 함께 연결될 수도 있고;

R^2 는 각각의 경우 동일 또는 상이하하며, H, D, F, Cl, Br, I, CN, $B(OR^3)_2$, NO_2 , $C(=O)R^3$, $CR^3=C(R^3)_2$, $C(=O)OR^3$, $C(=O)N(R^3)_2$, $Si(R^3)_3$, $P(R^3)_2$, $B(R^3)_2$, $N(R^3)_2$, NO_2 , $P(=O)(R^3)_2$, OSO_2R^3 , OR^3 , $S(=O)R^3$, $S(=O)_2R^3$, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시기 (이들의 각각은 하나 이상의 R^3 라디칼로 치환될 수도 있고, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 $-R^3C=CR^3-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^3)_2$, $Ge(R^3)_2$, $Sn(R^3)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=NR^3$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^3-$, NR^3 , $P(=O)(R^3)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 로 대체될 수도 있고, 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 로 대체될 수도 있음), 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각각의 경우 하나 이상의 R^3 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R^3 라디칼로 치환될 수도 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기, 또는 이들 시스템의 조합이고; 동시에, 2개 이상의 인접한 R^2 치환기들은 함께 또한 단환 또는 다환, 지방족, 헤테로지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성할 수도 있고;

R^3 는 각각의 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드록시 라디칼, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (여기서, 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I 또는 CN 으로 대체될 수 있고, 1 내지 4 개의 탄소 원자를 각각 갖는 하나 이상의 알킬 기들에 의해 치환될 수도 있음) 로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 2개 이상의 인접한 R^3 치환기는 함께 또한 단환 또는 다환, 지방족, 헤테로지방족, 방향족, 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성할 수도 있고;

l 은 0, 1, 2, 3, 4, 5 또는 6 이고, m 은 0, 1, 2, 3 또는 4 이고 o 는 0, 1 또는 2 이며; 하기 화합물들



을 제외하는 화합물.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기 Ar 기는 정공 수송 기를 포함하거나 또는 구성하는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 3

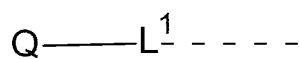
제 1 항에 있어서,

상기 Ar 기는 전자 수송 기를 포함하거나 또는 구성하는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 4

제 3 항에 있어서,

상기 Ar 기는 하기 식 (QL) 에 의해 표현될 수 있는 기이고



식 (QL)

식 중, L^1 은 결합 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R^1 라디칼에 의해 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내고, Q 는 전자 수송 기이며,

여기서 R^1 은 각각의 경우 동일 또는 상이하고 H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO_2 , $N(Ar^1)_2$, $N(R^2)_2$, $C(=O)Ar^1$, $C(=O)R^2$, $P(=O)(Ar^1)_2$, $P(Ar^1)_2$, $B(Ar^1)_2$, $B(OR^2)_2$, $Si(Ar^1)_3$, $Si(R^2)_3$, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시 기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시 기 또는 2 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 (이들 각각은 하나 이상의 R^2 라디칼에 의해 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 $-R^2C=CR^2-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^2)_2$, $Ge(R^2)_2$, $Sn(R^2)_2$, C=O, C=S, C=Se, $C=NR^2$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^2-$, NR^2 , $P(=O)(R^2)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 로 대체될 수도 있고 그리고 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 로 대체될 수도 있음), 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각각의 경우에 하나 이상의 R^2 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R^2 라디칼로 치환될 수도 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R^2 라디칼로 치환될 수도 있는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬기, 또는 이들 시스템들의 조합이고; 동시에, 2 개 이상의 인접한 R^1 라디칼들은, 동일한 탄소 원자에 결합되었을 때, 함께 단환 또는 다환의, 지방족, 헤테로지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성할 수도 있고;

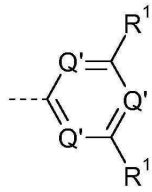
Ar^1 는 각각의 경우 동일 또는 상이하며, 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R^2 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고; 동시에, 동일한 실리콘 원자, 질소 원자, 인 원자 또는 붕소 원자에 결합된 2 개의 Ar^1 라디칼은 또한, 단일 결합에 의한 브릿지 또는 $B(R^2)$, $C(R^2)_2$, $Si(R^2)_2$, $C=O$, $C=NR^2$, $C=C(R^2)_2$, O, S, S=O, SO_2 , $N(R^2)$, $P(R^2)$ 및 $P(=O)R^2$ 로부터 선택된 브릿지를 통해 함께 연결될 수도 있고;

R^2 는 각각의 경우 동일 또는 상이하며, H, D, F, Cl, Br, I, CN, $B(OR^3)_2$, NO_2 , $C(=O)R^3$, $CR^3=C(R^3)_2$, $C(=O)OR^3$, $C(=O)N(R^3)_2$, $Si(R^3)_3$, $P(R^3)_2$, $B(R^3)_2$, $N(R^3)_2$, NO_2 , $P(=O)(R^3)_2$, OSO_2R^3 , OR^3 , $S(=O)R^3$, $S(=O)_2R^3$, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시 기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시 기 (이들의 각각은 하나 이상의 R^3 라디칼로 치환될 수도 있고, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 $-R^3C=CR^3-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^3)_2$, $Ge(R^3)_2$, $Sn(R^3)_2$, C=O, C=S, $C=NR^3$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^3-$, NR^3 , $P(=O)(R^3)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 로 대체될 수도 있고, 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 로 대체될 수도 있음), 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각각의 경우 하나 이상의 R^3 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R^3 라디칼로 치환될 수도 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기, 또는 이들 시스템의 조합이고; 동시에, 2개 이상의 인접한 R^2 치환기들은 함께 또한 단환 또는 다환, 지방족, 헤테로지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성할 수도 있고;

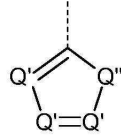
R^3 는 각각의 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드로카르빌 라디칼, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (여기서, 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I 또는 CN 으로 대체될 수 있고, 1 내지 4 개의 탄소 원자를 각각 갖는 하나 이상의 알킬 기들에 의해 치환될 수도 있음) 로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 2개 이상의 인접한 R^3 치환기는 함께 또한 단환 또는 다환, 지방족, 헤테로지방족, 방향족, 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성할 수도 있는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 5

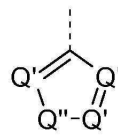
제 4 항에 있어서, Q 기가 식 (Q-1), (Q-2), (Q-3), (Q-4), (Q-5), (Q-6), (Q-7), (Q-8), (Q-9) 및 (Q-10)의 구조들로부터 선택되는 화합물로서



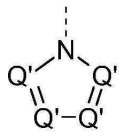
식 (Q-1)



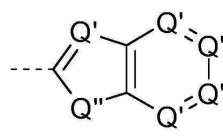
식 (Q-2)



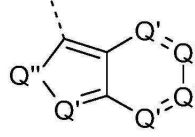
식 (Q-3)



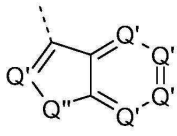
식 (Q-4)



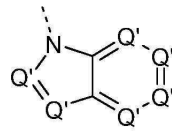
식 (Q-5)



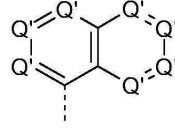
식 (Q-6)



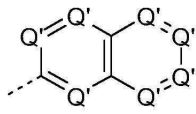
식 (Q-7)



식 (Q-8)



식 (Q-9)



식 (Q-10),

식 중, 점선 결합은 부착 위치를 나타내고,

Q' 는 각각의 경우 동일하거나 상이하며, CR¹ 또는 N 이고,

Q'' 는 NR¹, O 또는 S 이고;

여기서 적어도 하나의 Q' 는 N 이고,

R¹ 는 제 4 항에 정의된 바와 같은, 화합물.

청구항 6

제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 함유하는 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머로서,

수소 원자 또는 치환기보다는, 상기 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머에 대한 상기 화합물의 하나 이상의 결합이 있는, 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머.

청구항 7

제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 기재된 화합물 및 형광 방출체, 인광 방출체, TADF 를 나타내는 방출체, 호스트 재료, 전자 수송 재료, 전자 주입 재료, 정공 도체 재료, 정공 주입 재료, 전자 차단 재료 및 정공 차단 재료로 이루어지는 균으로부터 선택되는 적어도 하나의 추가 화합물을 포함하는, 조성물.

청구항 8

제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 기재된 화합물 및 적어도 하나의 용매를 포함하는, 제형.

청구항 9

제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 기재된 화합물로서,
상기 화합물은 전자 디바이스에서 호스트 재료, 정공 도체 재료, 또는 전자 수송 재료로서 사용되는, 화합물.

청구항 10

제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 기재된 화합물의 제조 방법으로서,
커플링 반응에서, 적어도 하나의 질소 함유 복소환 기를 포함하는 화합물이 적어도 하나의 방향족 또는 헤테로 방향족 기를 포함하는 화합물에 연결되는 것을 특징으로 하는, 제조 방법.

청구항 11

제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 포함하는 전자 디바이스로서,
상기 전자 디바이스는 유기 전계발광 디바이스, 유기 집적 회로, 유기 전계 효과 트랜지스터, 유기 박막 트랜지스터, 유기 발광 트랜지스터, 유기 태양전지, 유기 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 필드 쉐이팅 디바이스, 발광 전기화학 전지 및 유기 레이저 다이오드로 이루어지는 군으로부터 선택되는, 전자 디바이스.

청구항 12

삭제

청구항 13

삭제

청구항 14

삭제

청구항 15

삭제

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은, 특히 전자 디바이스에서 사용하기 위한, 카르바졸 유도체에 관한 것이다. 본 발명은 또한 본 발명의 화합물의 제조를 위한 프로세스 및 이들 화합물을 포함하는 전자 디바이스에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 전계 발광 디바이스 (OLED) 에 사용되는 방출 재료들은 종종 인광을 나타내는 유기금속 착물이다. 양자 역학적인 이유로, 유기금속 화합물을 인광 방출체로서 사용하여 에너지 및 전력 효율이 4 배에 이르기까지 가능하다. 일반적으로, OLED 에 있어서, 특히 또한 인광을 나타내는 OLED 에 있어서, 예를 들어, 효율, 작동 전압 및 수명에 관하여, 여전히 개선의 필요가 있다.

[0003] 유기 전계발광 디바이스의 특성은 이용되는 방출체에 의해서만 결정되는 것은 아니다. 또한 특히 호스트/매트릭스 재료, 정공 차단 재료, 전자 수송 재료, 정공 수송 재료 및 전자 또는 엑시톤 차단 재료와 같은 사용되는 다른 재료들이 여기에서 특히 중요하다. 이러한 재료들에 대한 개선은 전계발광 디바이스에 대한 뚜렷한 개선을 가져올 수 있다.

[0004] 종래 기술에 따르면, 인광 화합물에 사용되는 매트릭스 재료의 예들은 카르바졸 유도체를 포함하지만, 또한 카르바졸 구조 및 벤조크산텐으로부터 유도된 구조 양자 모두를 갖는 공지된 화합물이 있다. 이들의 치환에 따라, 이들 화합물은 전자 수송 재료로서 사용될 수 있다. 예를 들어, KR 2015/0065383 은 대응하는 화합물을 설명한다. 그러나, 설명된 벤조크산텐 유도체는 카르바졸 기가 형성되는 나프탈렌 구조를 포함한다.

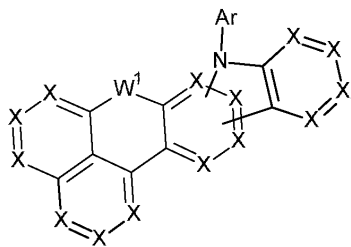
발명의 내용

해결하려는 과제

- [0005] 일반적으로, 이들 재료의 경우에, 예를 들어 매트릭스 재료, 정공 도체 재료 또는 전자 수송 재료로서의 사용을 위해, 특히 수명과 관련한 것 뿐만 아니라 디바이스의 효율 및 작동 전압과 관련하여 개선이 여전히 필요하다. 또한, 화합물은 높은 컬러 순도를 가져야 한다.
- [0006] 따라서, 본 발명에 의해 다루어지는 문제점은 유기 전자 디바이스에서, 특히 유기 전계발광 디바이스에서의 사용에 적합하고 이 디바이스에 사용될 때 양호한 디바이스 특성에 이르는 것, 및 대응하는 전자 디바이스를 제공하는 것이다.
- [0007] 보다 구체적으로는, 본 발명에 의해 다루어지는 문제점이 높은 수명, 양호한 효율 및 낮은 작동 전압에 이르는 화합물을 제공하는 것이다. 특히, 매트릭스 재료, 정공 도체 재료 또는 전자 수송 재료의 특성 역시, 유기 전계발광 디바이스의 수명 및 효율에 본질적인 영향을 미친다.
- [0008] 본 발명에 의해 다루어지는 다른 문제점은 인광 또는 형광 OLED 에서, 특히 매트릭스 재료로서 사용하기에 적합한 화합물을 제공하는 것으로 고려될 수 있다. 보다 구체적으로는, 본 발명에 의해 다루어지는 문제점은 적색, 황색 및 녹색 인광 OLED 에 적합한 매트릭스 재료를 제공하는 것이다.
- [0009] 또한, 화합물들은, 특히 이들이 유기 전계발광 디바이스에서 매트릭스 재료로서, 정공 도체 재료로서 또는 전자 수송 재료로서 사용될 때, 우수한 컬러 순도를 갖는 디바이스로 이어져야 한다.
- [0010] 또한, 화합물은 매우 간단한 방식으로 가공 가능해야하고, 특히 양호한 용해도 및 막 형성을 나타내야 한다. 예를 들어, 화합물은 상승된 산화 안정성 및 향상된 유리 전이 온도를 나타내야 한다.
- [0011] 다른 목적은 우수한 성능을 갖는 전자 디바이스를 매우 저렴하게 그리고 일정한 품질로 제공하는 것으로 고려될 수 있다.
- [0012] 또한, 많은 목적을 위해 전자 디바이스를 사용하거나 적응시킬 수 있어야 한다. 보다 특히, 전자 디바이스의 성능은 넓은 온도 범위에 걸쳐 유지되어야 한다.

과제의 해결 수단

- [0013] 놀랍게도, 이하에 상세히 기재되는 특정 화합물이 이들 문제점을 해결하고 종래 기술로부터의 단점을 제거한다는 것을 알아냈다. 그 화합물의 사용은 특히 수명, 효율 및 작동 전압과 관련하여 유기 전자 디바이스, 특히 유기 전계발광 디바이스의 매우 양호한 특성에 이른다. 따라서, 본 발명은 이러한 화합물을 함유하는 전자 디바이스, 특히 유기 전계발광 디바이스, 및 대응하는 바람직한 실시형태들을 제공한다.
- [0014] 따라서, 본 발명은 하기 식 (I) 의 적어도 하나의 구조를 포함하는 화합물을 제공한다:



식 (I)

- [0015]
- [0016] 식중에서 사용된 기호들은 다음과 같다:
- [0017] X 는 각각의 경우에 동일 또는 상이하며 N 또는 CR¹, 바람직하게는 CR¹이거나 또는 인돌로 기가 X 에 결합되는 경우 C 이다;
- [0018] W¹ 는 O, S, C(R¹)₂, P(=O)Ar 또는 Si(R¹)₂, 바람직하게는 O, S, C(R¹)₂ 또는 P(=O)Ar, 보다 바람

직하계는 O, S 또는 $C(R^1)_2$, 가장 바람직하게는 O 또는 S 이다;

[0019] R^1 은 각각의 경우 동일 또는 상이하고 H, D, F, Cl, Br, I, CN, NO_2 , $N(Ar^1)_2$, $N(R^2)_2$, $C(=O)Ar^1$, $C(=O)R^2$, $P(=O)(Ar^1)_2$, $P(Ar^1)_2$, $B(Ar^1)_2$, $B(OR^2)_2$, $Si(Ar^1)_3$, $Si(R^2)_3$, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시 기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시 기 또는 2 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 (이들 각각은 하나 이상의 R^2 라디칼에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 $-R^2C=CR^2-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^2)_2$, $Ge(R^2)_2$, $Sn(R^2)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=Se$, $C=NR^2$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^2-$, NR^2 , $P(=O)(R^2)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 로 대체될 수도 있고 그리고 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 로 대체될 수 있음), 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각각의 경우에 하나 이상의 R^2 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R^2 라디칼로 치환될 수도 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R^2 라디칼로 치환될 수도 있는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬기, 또는 이들 시스템들의 조합이고; 동시에, 2 개 이상의 바람직하게는 인접한 R^1 라디칼들은 함께 단환 또는 다환의, 지방족, 헤테로지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성할 수도 있다;

[0020] Ar 은 각각의 경우에 동일 또는 상이하고, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 바람직하게는 비방향족 R^1 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이다;

[0021] Ar^1 는 각각의 경우 동일 또는 상이하며, 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 바람직하게는 비방향족 R^2 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이다; 동시에, 동일한 실리콘 원자, 질소 원자, 인 원자 또는 붕소 원자에 결합된 두 개의 Ar^1 라디칼은 또한, 단일 결합에 의한 브릿지 또는 $B(R^2)$, $C(R^2)_2$, $Si(R^2)_2$, $C=O$, $C=NR^2$, $C=C(R^2)_2$, O, S, S=O, SO_2 , $N(R^2)$, $P(R^2)$ 및 $P(=O)R^2$ 로부터 선택된 브릿지를 통해 함께 연결될 수도 있다;

[0022] R^2 는 각각의 경우 동일 또는 상이하며, H, D, F, Cl, Br, I, CN, $B(OR^3)_2$, NO_2 , $C(=O)R^3$, $CR^3=C(R^3)_2$, $C(=O)OR^3$, $C(=O)N(R^3)_2$, $Si(R^3)_3$, $P(R^3)_2$, $B(R^3)_2$, $N(R^3)_2$, NO_2 , $P(=O)(R^3)_2$, OSO_2R^3 , OR^3 , $S(=O)R^3$, $S(=O)_2R^3$, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시 기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시 기 (이들의 각각은 하나 이상의 R^3 라디칼로 치환될 수도 있고, 여기서 하나 이상의 비인접 CH_2 기는 $-R^3C=CR^3-$, $-C\equiv C-$, $Si(R^3)_2$, $Ge(R^3)_2$, $Sn(R^3)_2$, $C=O$, $C=S$, $C=NR^3$, $-C(=O)O-$, $-C(=O)NR^3-$, NR^3 , $P(=O)(R^3)$, $-O-$, $-S-$, SO 또는 SO_2 로 대체될 수도 있고, 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2 로 대체될 수 있음), 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각각의 경우 하나 이상의 R^3 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R^3 라디칼로 치환될 수도 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기, 또는 이들 시스템들의 조합이고; 동시에, 2개 이상의 바람직하게는 인접한 R^2 치환기들은 함께 또한 단환 또는 다환, 지방족, 헤테로지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성할 수도 있다;

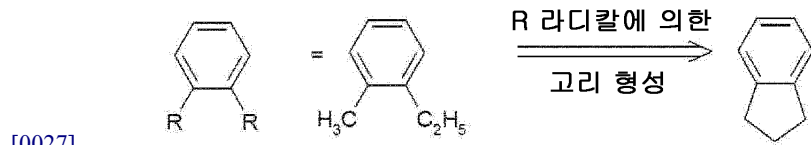
[0023] R^3 는 각각의 경우에 동일 또는 상이하고, H, D, F, CN, 탄소수 1 내지 20 의 지방족 히드로카르빌 라디칼, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (여기서, 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I 또는 CN 으로 대체될 수도 있고, 1 내지 4 개의 탄소 원자를 각각 갖는 하나 이상의 알킬기들에 의해 치환될 수도 있음) 로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 2개 이상의 바람직하게는 인접한 R^3 치환기는 함께 또한 단환 또는 다환, 지방족, 헤테로지방족, 방향족, 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성

할 수도 있다.

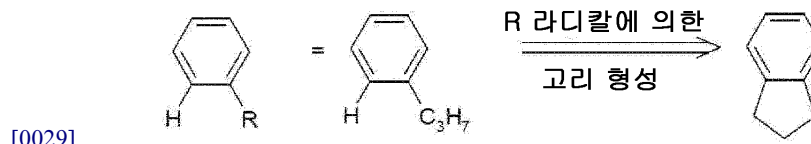
[0024] 식 (I) 에서 인돌로 기는 여기서 2 개의 인접한 X 원자에 결합한다. 또한, 인돌로 기는, W¹ 기 및 인돌로 기의 질소 원자가 중심 페닐 고리에 대하여 cis 위치 또는 trans 위치에 있도록 두 개의 정렬로 결합할 수도 있다.

[0025] 본 발명의 맥락에서 인접한 탄소 원자는 서로 직접 결합된 탄소 원자이다. 또한, 라디칼의 정의에서 "인접한 라디칼" 은 이러한 라디칼이 동일한 탄소 원자 또는 인접한 탄소 원자에 결합됨을 의미한다. 이들 정의는 대응하여, 특히 "인접 기" 및 "인접 치환기"라는 용어에 적용된다.

[0026] 2 개 이상의 라디칼이 함께 고리를 형성할 수도 있다는 문구는, 본 설명의 맥락에서, 특히, 2 개의 라디칼이 2 개의 수소 원자의 공식적인 제거에 의한 화학적 결합에 의해 서로 연결된다는 것을 의미하는 것으로 이해되어야 한다. 이는 다음의 스킴에 의해 예시된다:



[0028] 그러나, 추가적으로 위에 언급된 문구는 또한 2 개의 라디칼 중 하나가 수소인 경우에는 제 2 라디칼이 수소 원자가 결합된 위치에 결합되어 고리를 형성한다는 것을 의미하는 것으로 이해되어야 한다. 이는 다음의 스킴에 의해 예시될 것이다:



[0030] 본 발명의 맥락에서 융합된 아릴 기, 융합된 방향족 고리 시스템 또는 융합된 헤테로방향족 고리 시스템은, 예를 들어, 2개의 탄소 원자가 예를 들어 나프탈렌에서와 같이 적어도 2 개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리에 속하도록, 2개 이상의 방향족 기가 공통 예지를 따라 서로 융합 (fuse), 즉 어닐레이트 (annellate) 되는 기이다. 대조적으로, 예를 들어, 플루오렌에서 2 개의 방향족 기는 공통 예지를 갖지 않기 때문에, 플루오렌은 본 발명의 맥락에서 융합된 아릴 기가 아니다. 대응하는 정의들은 헤테로아릴 기 및 헤테로원자를 함유할 수도 있지만 또한 함유할 필요가 없는 융합된 고리 시스템에 적용된다.

[0031] 본 발명의 맥락에서 아릴 기는 6 내지 60 탄소 원자를, 바람직하게는 6 내지 40 탄소 원자를, 보다 바람직하게는 6 내지 30 탄소 원자들을 함유하고; 본 발명의 맥락에서 헤테로아릴 기는 2 내지 60 탄소 원자를, 바람직하게는 2 내지 40 탄소 원자를, 보다 바람직하게는 2 내지 30 탄소 원자를, 그리고 적어도 하나의 헤테로원자를 함유하는데, 다만, 탄소 원자와 헤테로원자의 총 합은 적어도 5 이다. 헤테로원자들은 바람직하게 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 아릴기 또는 헤테로아릴 기는 여기서 단순 (simple) 방향족 환, 즉, 벤젠 또는 단순 헤테로방향족 환, 예를 들어 피리딘, 피리미딘, 티오펜 등, 또는 융합된 아릴 또는 헤테로아릴기, 예를 들어 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 퀴놀린, 이소퀴놀린 등을 의미하는 것으로 여겨진다.

[0032] 본 발명의 맥락에서 방향족 고리 시스템은 고리 시스템에서 6 내지 60 개의 탄소 원자, 바람직하게는 6 내지 40 개의 탄소 원자, 보다 바람직하게는 6 내지 30 개의 탄소 원자를 함유한다. 본 발명의 맥락에서 헤테로방향족 고리 시스템은 고리 시스템에서 1 내지 60 개의 탄소 원자, 바람직하게는 1 내지 40 개의 탄소 원자, 보다 바람직하게는 1 내지 30 개의 탄소 원자, 그리고 적어도 하나의 헤테로원자를 함유하는데, 다만, 탄소 원자와 헤테로원자의 총 합은 적어도 5 이다. 헤테로원자들은 바람직하게는 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 본 발명의 맥락에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 반드시 아릴 또는 헤테로아릴 기만을 함유하는 것이 아니라, 또한 2 개 이상의 아릴 또는 헤테로아릴 기가 비방향족 단위 (바람직하게는 H 외의 10 % 미만의 원자), 예를 들어 탄소, 질소 또는 산소 원자 또는 카르보닐 기에 의해 인터럽트될 수 있는 시스템을 의미하는 것으로 이해되어야 한다. 따라서, 예를 들면, 9,9'-스피로바이플루오렌, 9,9'-디아릴플루오렌, 트리아릴아민, 디아릴 에테르, 스틸벤 등과 같은 시스템들은 또한 본 발명의 맥락에서 방향족 고리 시스템, 그리고 마찬가지로 2 개 이상의 아릴 기가 예를 들면 선형 또는 환형 알킬 기 또는 실릴 기에 의해 인터럽트되는 시스템들로 간주되어야 한다. 또한, 2개 이상의 아릴 또는 헤테로아릴 기가 서로 직접 결합된 시스템, 예를 들면, 바이페닐, 테

르페닐, 쿼터페닐 또는 바이피리딘은 마찬가지로 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 간주되어야 한다.

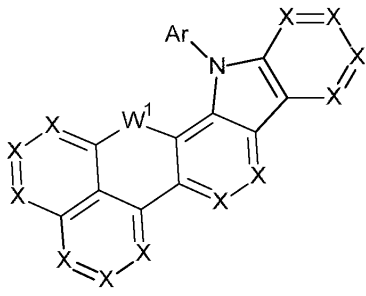
[0033] 본 발명의 맥락에서의 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알콕시 기는 단환, 이환 또는 다환 기를 의미하는 것으로 이해된다.

[0034] 본 발명의 맥락에서, 개별적인 수소 원자 또는 CH₂ 기가 또한 위에 언급된 기에 의해 대체될 수도 있는 C₁- 내지 C₂₀-알킬기는 예를 들어, 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, 시클로프로필, n-부틸, i-부틸, s-부틸, t-부틸, 시클로부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, s-펜틸, t-펜틸, 2-펜틸, 네오펜틸, 시클로펜틸, n-헥실, s-헥실, t-헥실, 2-헥실, 3-헥실, 네오헥실, 시클로헥실, 1-메틸시클로펜틸, 2-메틸펜틸, n-헵틸, 2-헵틸, 3-헵틸, 4-헵틸, 시클로헵틸, 1-메틸시클로헥실, n-옥틸, 2-에틸헥실, 시클로옥틸, 1-바이시클로[2.2.2]옥틸, 2-바이시클로[2.2.2]옥틸, 2-(2,6-디메틸)옥틸, 3-(3,7-디메틸)옥틸, 아다만틸, 트리플루오로메틸, 펜타플루오로에틸, 2,2,2-트리플루오로에틸, 1,1-디메틸-n-헥스-1-일, 1,1-디메틸-n-헵트-1-일, 1,1-디메틸-n-옥트-1-일, 1,1-디메틸-n-데크-1-일, 1,1-디메틸-n-도데크-1-일, 1,1-디메틸-n-테트라데크-1-일, 1,1-디메틸-n-헥사데크-1-일, 1,1-디메틸-n-옥타데크-1-일, 1,1-디에틸-n-헥스-1-일, 1,1-디에틸-n-헵트-1-일, 1,1-디에틸-n-옥트-1-일, 1,1-디에틸-n-데크-1-일, 1,1-디에틸-n-도데크-1-일, 1,1-디에틸-n-테트라데크-1-일, 1,1-디에틸-n-헥사데크-1-일, 1,1-디에틸-n-옥타데크-1-일, 1-(n-프로필)시클로헥스-1-일, 1-(n-부틸)시클로헥스-1-일, 1-(n-헥실)시클로헥스-1-일, 1-(n-옥틸)시클로헥스-1-일 및 1-(n-데실)시클로헥스-1-일 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다.

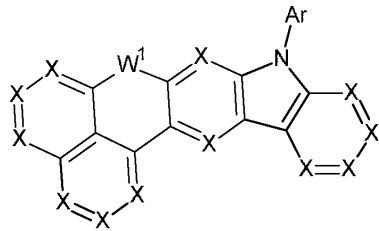
알케닐 기는 예를 들어, 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 시클로펜테닐, 헥세닐, 시클로헥세닐, 헵테닐, 시클로헵테닐, 옥테닐, 시클로옥테닐 또는 시클로옥타디에닐을 의미하는 것으로 이해된다. 알킬닐 기는 예를 들어, 에틸닐, 프로피닐, 부틸닐, 펜틸닐, 헥실닐, 헵틸닐 또는 옥틸닐을 의미하는 것으로 이해된다. C₁- 내지 C₄₀-알콕시 기는, 예를 들어 메톡시, 트리플루오로메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, s-부톡시, t-부톡시 또는 2-메틸부톡시를 의미하는 것으로 이해된다.

[0035] 5 내지 60 개, 바람직하게는 5 내지 40 개, 방향족 고리 원자, 보다 바람직하게는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고, 또한 각각의 경우 위에 언급된 라디칼로 치환될 수도 있고, 임의의 원하는 위치를 통해 방향족 또는 헤테로방향족 시스템에 연결될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은, 예를 들어 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센, 페난트렌, 벤조페난트렌, 피렌, 크리센, 페릴렌, 플루오란텐, 벤조플루오란텐, 나프타센, 펜타센, 벤조피렌, 바이페닐, 바이페닐렌, 테르페닐, 테르페닐렌, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 디하이드로페난트렌, 디하이드로피렌, 테트라하이드로피렌, 시스- 또는 트랜스-인데노플루오렌, 시스- 또는 트랜스-모노벤조인데노플루오렌, 시스- 또는 트랜스-디벤조인데노플루오렌, 트루센, 이소트루센, 스피로트루센, 스피로 이소트루센, 푸란, 벤조푸란, 이소벤조푸란, 디벤조푸란, 티오펜, 벤조티오펜, 이소벤조티오펜, 디벤조티오펜, 피롤, 인돌, 이소인돌, 카르바졸, 인돌로카르바졸, 인데노카르바졸, 피리딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 아크리딘, 페난트리딘, 벤조-5,6-퀴놀린, 벤조-6,7-퀴놀린, 벤조-7,8-퀴놀린, 페노티아진, 페녹사진, 피라졸, 인다졸, 이미다졸, 벤즈이미다졸, 나프티미다졸, 페난트리미다졸, 피리미다졸, 피라진이미다졸, 퀴녹살린이미다졸, 옥사졸, 벤즈옥사졸, 나프티옥사졸, 안트루옥사졸, 페난트루옥사졸, 이스옥사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴녹살린, 1,5-디아자안트라센, 2,7-디아자피렌, 2,3-디아자피렌, 1,6-디아자피렌, 1,8-디아자피렌, 4,5-디아자피렌, 4,5,9,10-테트라아자페릴렌, 피라진, 페나진, 페녹사진, 페노티아진, 플루오루빈, 나프티리딘, 아자카르바졸, 벤조카르볼린, 페난트롤린, 1,2,3-트리아졸, 1,2,4-트리아졸, 벤조트리아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아졸, 1,2,5-옥사디아졸, 1,3,4-옥사디아졸, 1,2,3-티아디아졸, 1,2,4-티아디아졸, 1,2,5-티아디아졸, 1,3,4-티아디아졸, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 1,2,3-트리아진, 테트라졸, 1,2,4,5-테트라진, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,3,5-테트라진, 퓨린, 프테리딘, 인돌리진 및 벤조티아디아졸에서 유도된 기를 의미하는 것으로 이해된다.

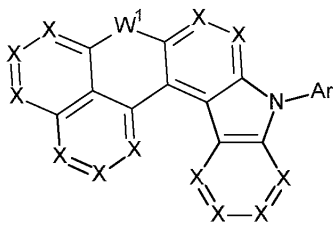
[0036] 바람직한 구성에서, 본 발명의 화합물은 식 (IIa), (IIb), (IIc), (IIe) 또는 (IIf) 의 적어도 하나의 구조를 포함할 수도 있다



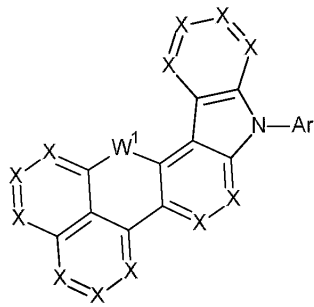
식 (IIa)



식 (IIb)

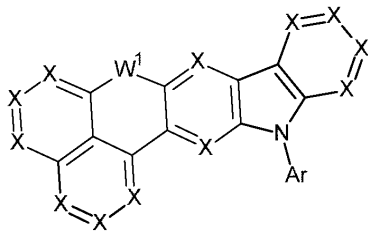


식 (IIc)

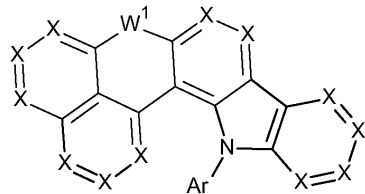


식 (IIId)

[0037]



식 (IIe)

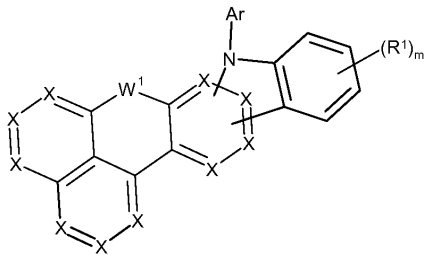


식 (IIf)

[0038]

[0039] 식 중 사용된 기호 Ar, W¹ 및 X 는 특히 식 (I) 에 대해 위에 주어진 정의를 갖는다.

[0040] 바람직하게는, 본 발명의 화합물은 식 (III) 의 적어도 하나의 구조를 포함할 수도 있다:

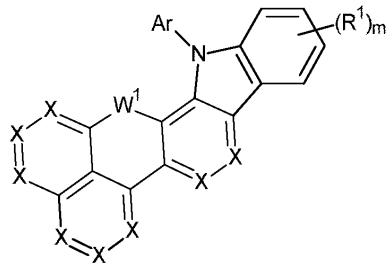


식 (III)

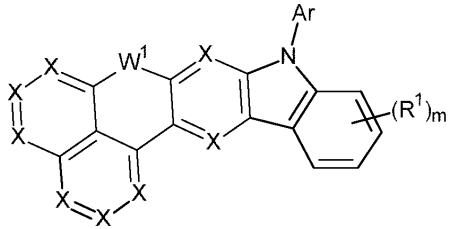
[0041]

[0042] 식 중 기호 R¹, Ar, W¹ 및 X 는 특히 식 (I) 에 대해 위에 주어진 정의를 가지며, m 은 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1, 2 또는 3 이다.

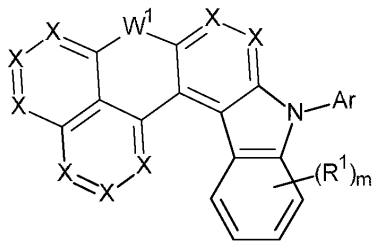
[0043] 바람직하게, 본 발명의 화합물은 식 (IIIa), (IIIb), (IIIc), (IIId), (IIIe) 또는 (IIIf) 의 적어도 하나의 구조를 포함할 수도 있다



식 (IIIa)

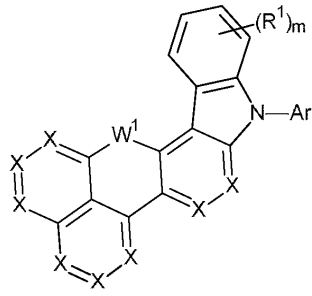


식 (IIIb)

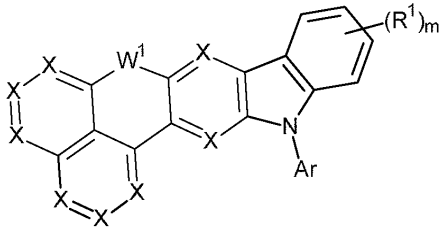


식 (IIIc)

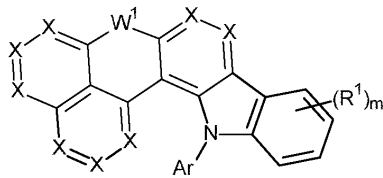
[0044]



식 (IIIId)



식 (IIIe)

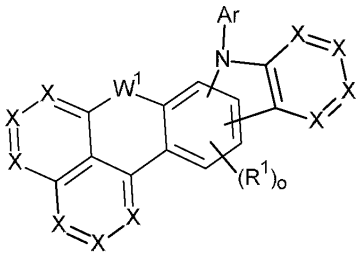


식 (IIIf)

[0045]

[0046] 식 중 기호 R^1 , Ar, W^1 및 X 는 특히 식 (I) 에 대해 위에 주어진 정의를 가지며, m 은 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1, 2 또는 3 이다.

[0047] 추가의 바람직한 실시형태에서, 본 발명의 화합물은 식 (IV) 의 적어도 하나의 구조를 포함할 수도 있다

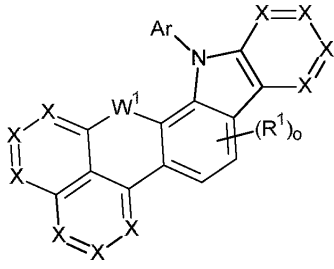


식 (IV)

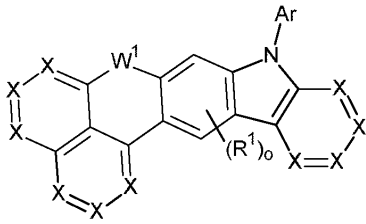
[0048]

[0049] 식 중 기호 R^1 , Ar, W^1 및 X 는 특히 식 (I) 에 대해 위에 주어진 정의를 가지며, o 는 0, 1 또는 2, 바람직하게는 0 또는 1 이다.

[0050] 바람직하게는, 본 발명의 화합물은 식 (IVa), (IVb), (IVc), (IVd), (IVe) 또는 (IVf) 의 적어도 하나의 구조를 포함할 수도 있다

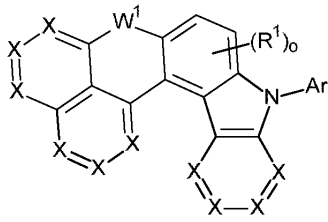


식 (IVa)

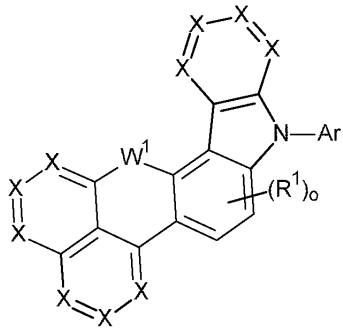


식 (IVb)

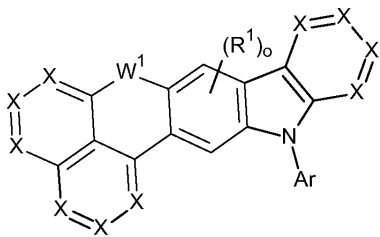
[0051]



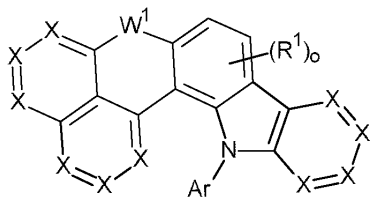
식 (IVc)



식 (IVd)



식 (IVe)



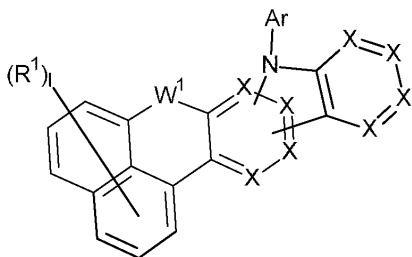
식 (IVf)

[0052]

[0053] 식 중 사용된 기호 R^1 , Ar, W^1 및 X 는 특히 식 (I) 에 대해 위에 제시된 정의를 가지며, o 는 0, 1 또는 2, 바 람직하게는 0 또는 1 이다.

[0054]

추가적 바람직한 구성에서, 본 발명의 화합물은 식 (V) 의 적어도 하나의 구조를 포함할 수도 있다

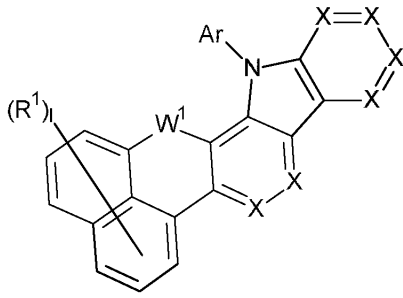


식 (V)

[0055]

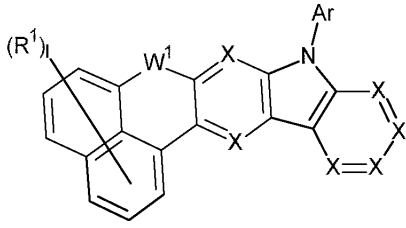
[0056] 식 중 기호 R^1 , Ar, W^1 및 X 는 특히 식 (I) 에 대해 위에 주어진 정의를 가지며, 1 은 0, 1, 2, 3, 4, 5 또는 6, 바람직하게는 0, 1, 2, 3 또는 4, 보다 바람직하게는 0, 1 또는 2 이다.

[0057] 바람직하게는, 본 발명의 화합물은 식 (Va), (Vb), (Vc), (Vd), (Ve) 또는 (Vf) 의 적어도 하나의 구조를 포함할 수도 있다

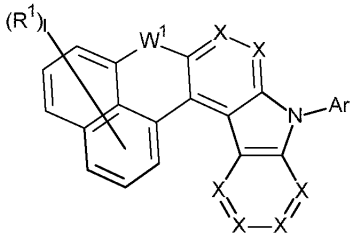


식 (Va)

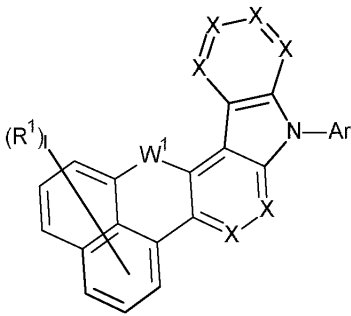
[0058]



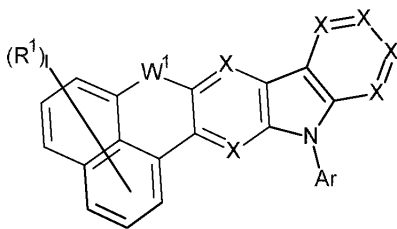
식 (Vb)



식 (Vc)

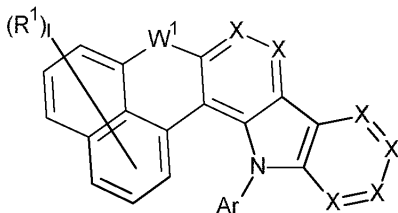


식 (Vd)



식 (Ve)

[0059]



식 (Vf)

[0060]

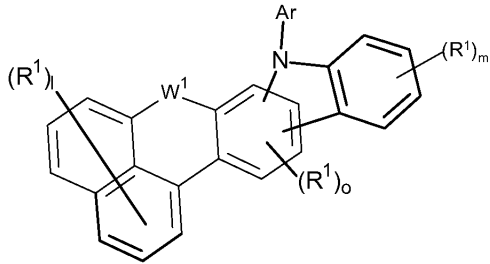
[0061] 식 중 사용된 기호 R^1 , Ar, W^1 및 X 는 특히 식 (I) 에 대해 위에 제시된 정의를 가지며, 1 은 0, 1, 2, 3, 4, 5 또는 6, 바람직하게는 0, 1, 2, 3 또는 4, 보다 바람직하게는 0, 1 또는 2 이다.

[0062] 또한, 고리 당 2 개 이하의 X 기가 N 이고, 바람직하게는 고리 당 적어도 1 개, 보다 바람직하게는 적어도 2 개

의 X 기가 C-H 및 C-D 로부터 선택되는 구조를 갖는 화합물이 바람직하다.

[0063] 식 (I), (IIa), (IIb), (IIc), (IId), (IIe), (IIf), (III), (IIIa), (IIIb), (IIIc), (IIId), (IIIe), (IIIIf), (IV), (IVa), (IVb), (IVc), (IVd), (IVe), (IVf), (V), (Va), (Vb), (Vc), (Vd), (Ve) 및/또는 (Vf) 의 구조를 갖는 화합물이 또한 바람직하고, 여기서 4개 이하의 X 기, 바람직하게는 2개 이하의 X 기 그리고 특히 1개 이하의 X 기가 N 이고, 보다 바람직하게는 인들로 기가 결합되지 않는 모든 X 기가 CR¹ 이고, 여기서 X 에 의해 표현되는 바람직하게는 4개 이하, 보다 바람직하게는 3개 이하 그리고 특히 바람직하게는 2개 이하의 CR¹ 기들은 CH 기가 아니다.

[0064] 바람직하게는, 본 발명의 화합물은 식 (VI) 의 적어도 하나의 구조를 포함할 수도 있다

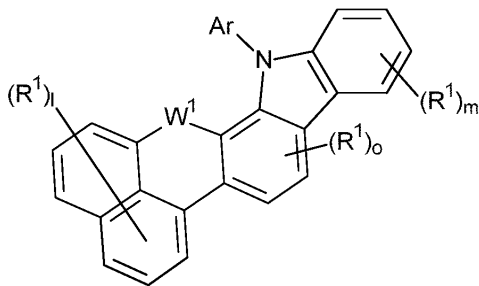


식 (VI)

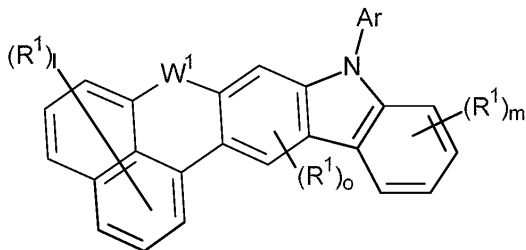
[0065]

[0066] 식 중 기호 R¹, Ar 및 W¹ 는 특히 식 (I) 에 대해 위에 주어진 정의를 가지며, j 은 0, 1, 2, 3, 4, 5 또는 6, 바람직하게는 0, 1, 2, 3 또는 4, 보다 바람직하게는 0, 1 또는 2 이고, m 은 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1, 2 또는 3 이고, o 은 0, 1 또는 2, 바람직하게는 0 또는 1 이다.

[0067] 추가의 바람직한 실시형태에서, 본 발명의 화합물은 식 (VIa), (VIb), (VIc), (VIId), (VIE) 또는 (VIIf) 의 적어도 하나의 구조를 가질 수도 있다

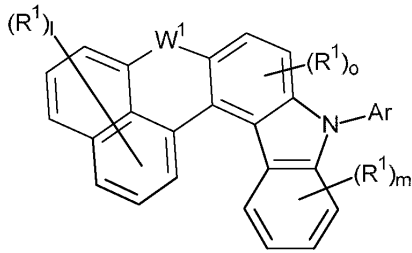


식 (VIa)

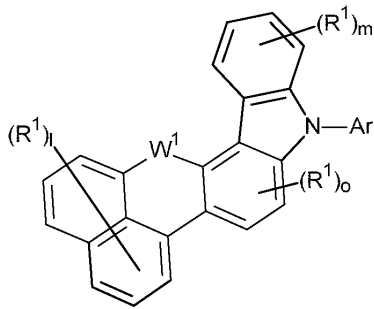


식 (VIb)

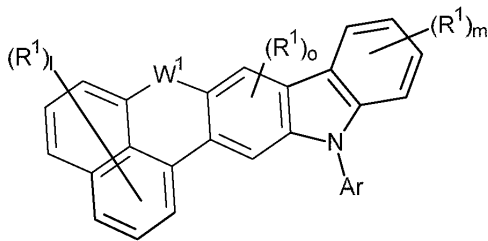
[0068]



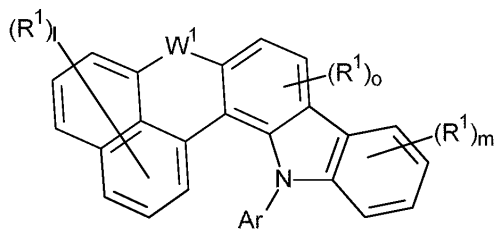
식 (VIc)



식 (VIId)



식 (VIe)



식 (VIIf)

[0069]

[0070]

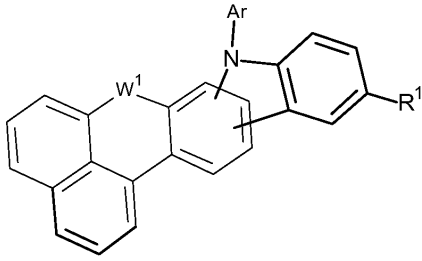
[0071] 식 중 사용된 기호 R^1 , Ar 및 W^1 는 특히 식 (I) 에 대해 위에 주어진 정의를 가지며, l 는 0, 1, 2, 3, 4, 5 또는 6, 바람직하게는 0, 1, 2, 3 또는 4, 보다 바람직하게는 0, 1 또는 2 이고, m 은 0, 1, 2, 3 또는 4, 바람직하게는 0, 1, 2 또는 3 이고, o 은 0, 1 또는 2, 바람직하게는 0 또는 1 이다.

[0072] 또한, 식 (VI), (VIa), (VIb), (VIc), (VIId), (VIe) 및/또는 (VIIf) 의 구조에서, 인덱스 l, m 및 o 의 총 합은 6 이하, 바람직하게는 4 이하, 그리고 더욱 바람직하게는 2 이하인 경우가 있을 수도 있다.

[0073] 또한, 식 (I), (IIa), (IIb), (IIc), (IId), (IIe), (IIf), (III), (IIIa), (IIIb), (IIIc), (IIId), (IIIe), (IIIf), (IV), (IVa), (IVb), (IVc), (IVd), (IVe), (IVf), (V), (Va), (Vb), (Vc), (Vd), (Ve), (Vf), (VI), (VIa), (VIb), (VIc), (VIId), (VIe) 및/또는 (VIIf) 에서, H 또는 D 가 아닌 정확히 하나의 R^1 라디칼이 존재하고, 그래서 다른 X 기가 N, CH 또는 CD 이거나, 또는 다른 말로 인덱스 l, m 및 o 의 총 합이 정확히 1 인 경우가 있을 수도 있다. 바람직하게는, 이 R^1 라디칼은 이들 식에서 카르바졸 기에 결합되며, 여기서 R^1 라디칼

은 보다 바람직하게는 W^1 기에 대한 결합을 직접 갖지 않는 카르바졸의 고리에 결합된다. 이 R^1 치환기는 바람직하게는 카르바졸 단위의 질소 원자에 대해 파라 (para) 위치에 있다.

[0074] 바람직하게는, 본 발명의 화합물은 식 (VII) 의 적어도 하나의 구조를 포함할 수도 있다

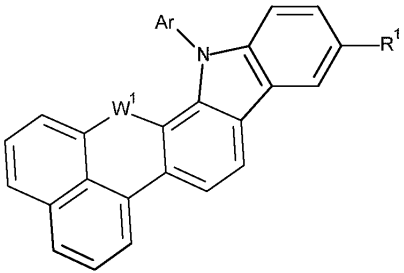


식 (VII)

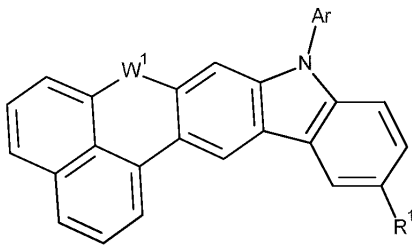
[0075]

[0076] 식 중 기호 R^1 , Ar 및 W^1 는 특히 식 (I) 에 대해 위에 주어진 정의를 갖는다. 이 경우, R^1 은 바람직하게는 H 또는 D 가 아니다.

[0077] 추가의 바람직한 실시형태에서, 본 발명의 화합물은 식 (VIIa), (VIIb), (VIIc), (VIId), (VIIe) 및/또는 (VIIf) 의 적어도 하나의 구조를 포함할 수도 있다

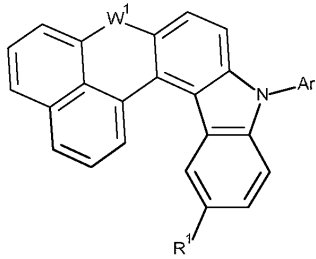


식 (VIIa)

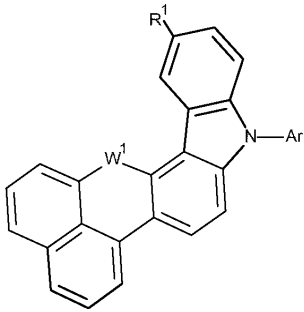


식 (VIIb)

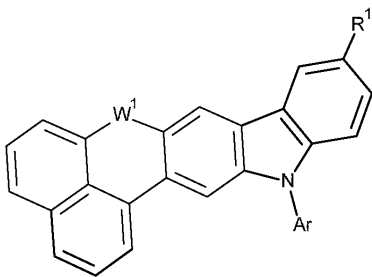
[0078]



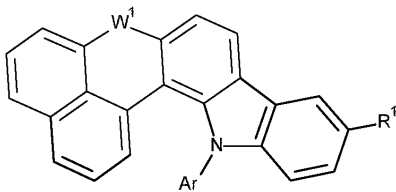
식 (VIIC)



식 (VIId)



식 (VIIE)



식 (VIIF)

[0079]

[0080] 식 중 사용된 기호 Ar, W¹ 및 R¹ 은 특히 식 (I) 에 대해 위에 제시된 정의를 갖는다. 이 경우, R¹ 은 바람직하게는 H 또는 D 가 아니다.

[0081] 바람직하게는, 식 (I) 내지 (VII) 중 하나의 식 또는 대응하는 바람직한 실시형태들의 적어도 하나의 구조를 포함하는 화합물은 식(I) 내지 (VII) 중 하나의 식 또는 바람직한 실시형태들의 구조에 의해 표현된다.

[0082] 바람직하게는, 식 (VII), (VIIa), (VIIb), (VIIC), (VIId), (VIIe) 및/또는 (VIIF) 에서 카르바졸 기에 결합된 R¹ 라디칼은, 5 내지 24 개 방향족 고리 원자, 바람직하게는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 가지며 각각의 경우 하나 이상의 R² 라디칼로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않는, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이다. R¹ 라디칼이 식 (VII), (VIIa), (VIIb), (VIIC), (VIId), (VIIe) 및/또는 (VIIF) 에서 카르바졸 기에 결합되는 바람직한 기들은, 페닐, 오르토-, 메타- 또는 파라-바이페닐, 테르페닐, 특히 분지형 테르페닐, 쿼터페닐, 특히 분지형 쿼터페닐, 1- 또는 2-나프틸, 1-, 2-, 3- 또는 4-플루오레닐, 1-, 2-, 3- 또는

4-스피로바이플루오레닐, 피리딜, 피리미디닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-디벤조푸라닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-디벤조티에닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-카르바졸릴 및 인데노카르바졸릴 (이들 각각은 하나 이상의 R^2 라디칼로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않음) 를 나타내거나 특히 포함할 수도 있다. 플루오렌 또는 인데노카르바졸릴 라디칼은 바람직하게는 인데노 탄소 원자 상의 2 개의 R^2 라디칼에 의해 치환된다. 카르바졸 또는 인데노카르바졸 라디칼은 이들이 질소 원자를 통해 결합되지 않을 때, H 및 D 가 아닌 R^2 라디칼에 의해, 바람직하게는 방향족 또는 헤테로방향족 R^2 라디칼에 의해, 질소 원자 상에서 치환되는 것이 바람직하다.

[0083] 또한, 식 (I), (IIa), (IIb), (IIc), (IId), (IIe), (IIf), (III), (IIIa), (IIIb), (IIIc), (IIId), (IIIe), (IIIf), (IV), (IVa), (IVb), (IVc), (IVd), (IVe), (IVf), (V), (Va), (Vb), (Vc), (Vd), (Ve), (Vf), (VI), (VIa), (VIb), (VIc), (VId), (VIe), (VI f), (VII), (VIIa), (VIIb), (VIIc), (VIId), (VIIe) 및/또는 (VIIf) 의 헤테로원자 고리 시스템의 R^1 치환기들은 베이스 구조의 헤테로방향족 고리 시스템의 고리 원자들과, 융합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 바람직하게는 임의의 융합된 고리 시스템을 형성하지 않는 경우가 있을 수도 있다. 이것은 R^1 라디칼에 결합될 수도 있는 가능한 R^2 또는 R^3 치환기와의 융합된 고리 시스템의 형성을 포함한다.

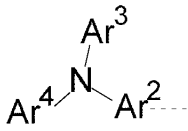
[0084] 바람직한 구성에서, 본 발명의 화합물은 식 (I), (IIa), (IIb), (IIc), (IId), (IIe), (IIf), (III), (IIIa), (IIIb), (IIIc), (IIId), (IIIe), (IIIf), (IV), (IVa), (IVb), (IVc), (IVd), (IVe), (IVf), (V), (Va), (Vb), (Vc), (Vd), (Ve), (Vf), (VI), (VIa), (VIb), (VIc), (VId), (VIe), (VI f), (VII), (VIIa), (VIIb), (VIIc), (VIId), (VIIe) 및/또는 (VIIf) 의 구조들에 의해 표현될 수 있다. 바람직하게는, 식 (I), (IIa), (IIb), (IIc), (IId), (IIe), (IIf), (III), (IIIa), (IIIb), (IIIc), (IIId), (IIIe), (IIIf), (IV), (IVa), (IVb), (IVc), (IVd), (IVe), (IVf), (V), (Va), (Vb), (Vc), (Vd), (Ve), (Vf), (VI), (VIa), (VIb), (VIc), (VId), (VIe), (VI f), (VII), (VIIa), (VIIb), (VIIc), (VIId), (VIIe) 및/또는 (VIIf) 의 구조들을 포함하는 화합물은, 분자량이 5000 g/mol 이하, 바람직하게는 4000 g/mol 이하, 특히 바람직하게는 3000 g/mol 이하, 특별히 바람직하게는 2000 g/mol 이하 그리고 가장 바람직하게는 1200 g/mol 이하이다.

[0085] 또한, 본 발명의 바람직한 화합물들의 특징은 이것들이 승화성이라는 것이다. 이들 화합물은 일반적으로 약 1200 g/몰 미만의 몰 질량을 갖는다.

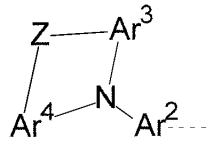
[0086] 바람직하게는, 기호 Ar 또는 Ar^1 으로 표현되는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템의 방향족 또는 헤테로방향족 기는 추가 기의 각각의 원자에 직접, 즉 방향족 또는 헤테로방향족 기의 원자를 통해 결합된다.

[0087] 일 실시형태에서, Ar 기는 정공 수송 기를 포함하거나 또는 구성할 수도 있다. 정공 수송 기는 당해 기술 분야에 공지되어 있으며, 바람직하게는 트리아릴아민 또는 카르바졸 기를 포함한다.

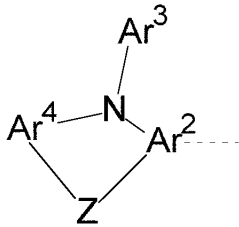
[0088] 바람직하게는, 정공 수송 기가 기를 포함하고 바람직하게는 하기 식 (H-1) 내지 (H-3) 으로부터 선택되는 기인 경우가 있을 수도 있다



식 (H-1)



식 (H-2)



식 (H-3)

[0089]

[0090] 식 중, 점선 결합은 질소 원자에 대한 부착 위치를 표시하고, 또한:

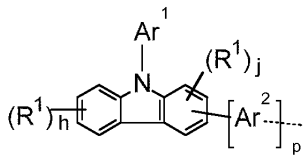
[0091] Ar^2 , Ar^3 , Ar^4 는 각각 독립적으로, 6 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 아릴 기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 헤테로아릴 기이며, 이들 각각은 하나 이상의 R^1 라디칼에 의해 치환될 수도 있다;

[0092] 그리고

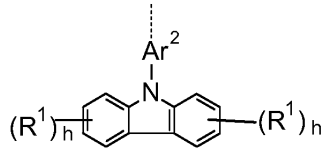
[0093] Z 는 $C(R^1)_2$, $Si(R^1)_2$, C=O, N- Ar^1 , BR^1 , PR^1 , $PO(R^1)$, SO, SO_2 , Se, O 또는 S, 바람직하게는 $C(R^1)_2$, N- Ar^1 , O 또는 S 이며, 여기서 기호 Ar^1 그리고 R^1 은 특히 식 (I) 에 대해 위에 주어진 정의를 갖는다.

[0094] 따라서, Ar 기는 식 (H-1), (H-2) 및/또는 (H-3) 의 라디칼을 포함할 수도 있고, 바람직하게는 식 (H-1), (H-2) 또는 (H-3) 의 라디칼일 수도 있다.

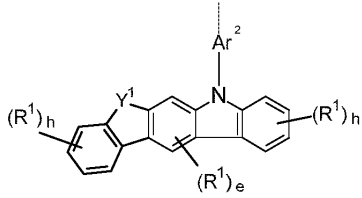
[0095] 또한, Ar 기는 기를 포함하고 바람직하게는 하기 식 (H-4) 내지 (H-26) 으로부터 선택되는 기인 경우가 있을 수도 있다



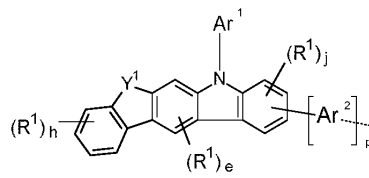
식 (H-4)



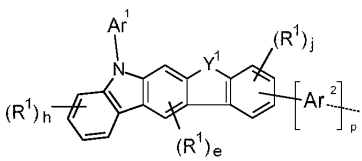
식 (H-5)



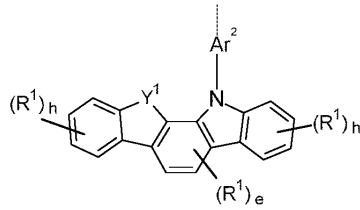
식 (H-6)



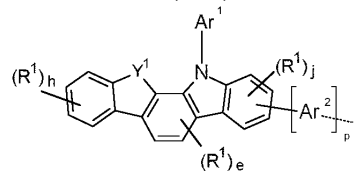
식 (H-7)



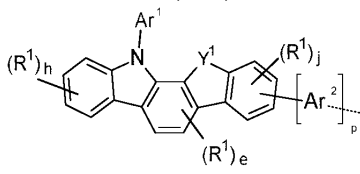
식 (H-8)



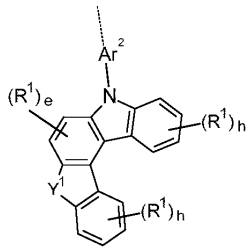
식 (H-9)



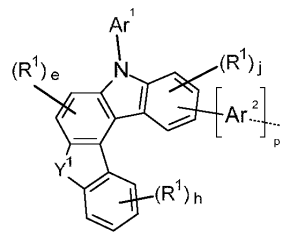
식 (H-10)



식 (H-11)

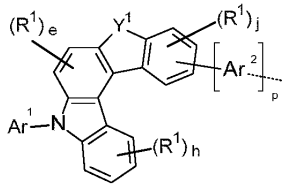


식 (H-12)

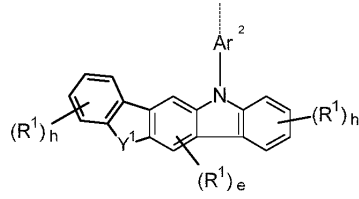


식 (H-13)

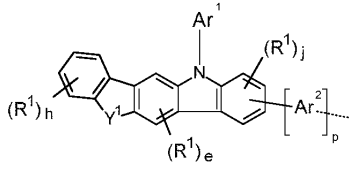
[0096]



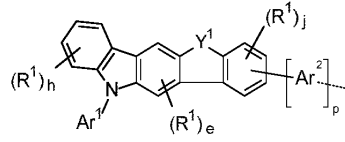
식 (H-14)



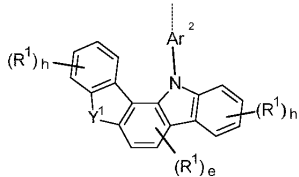
식 (H-15)



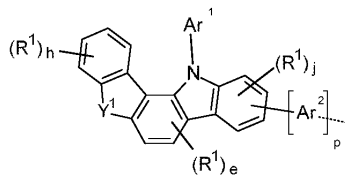
식 (H-16)



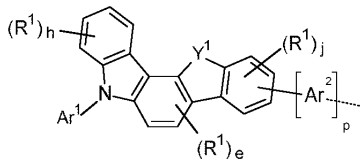
식 (H-17)



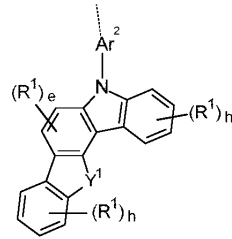
식 (H-18)



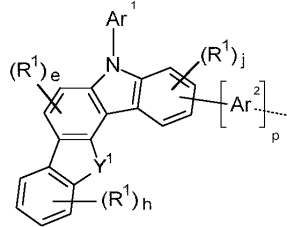
식 (H-19)



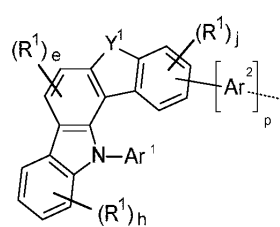
식 (H-20)



식 (H-21)

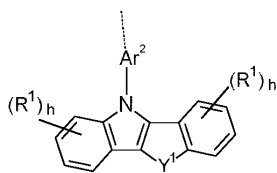


식 (H-22)

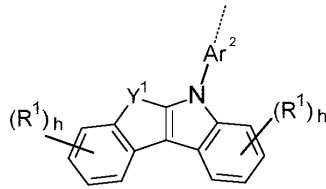


식 (H-23)

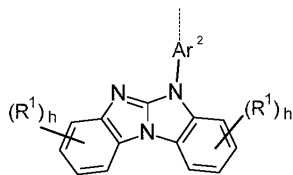
[0097]



식 (H-24)



식 (H-25)



식 (H-26)

[0098]

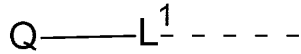
- [0099] 식 중 Y^1 는 O, S, $C(R^1)_2$ 또는 NAr^1 이고, 점선 결합은 질소 원자에 대한 부착 위치를 표시하고, e 는 0, 1 또는 2 이고, j 는 0, 1, 2 또는 3 이며, h 는 각각의 경우에 동일하거나 상이하고 0, 1, 2, 3 또는 4 이고, p 는 0 또는 1이고, Ar^1 및 R^1 은 특허 식 (I) 에 대해 위에 주어진 정의를 가지며, Ar^2 는 특허 식 (H-1) 또는 (H-2) 에 대해 위에 주어진 정의를 갖는다.
- [0100] 위에 상세히 나타낸 식 (H-1) 내지 (H-26) 의 정공 수송 기는 또한 식 (I) 또는 이 식의 바람직한 실시형태들의 화합물에서 바람직한 R^1 라디칼을 구성하고, 여기서 이 경우 식 (H-1) 내지 (H-26) 에 상세히 나타낸 R^1 기들은 R^2 라디칼에 의해 치환되어야 한다.
- [0101] 위의 문구로부터, 인덱스 $p = 0$ 이면, 대응하는 Ar^2 기가 부재하고 결합이 형성된다는 것이 명확하다.
- [0102] 바람직하게는, Ar^2 기는 방향족 또는 헤테로방향족 라디칼 또는 식 (H-1) 내지 (H-26) 의 Ar^2 기가 결합될 수도 있는 질소 원자와 관통 공액 (through-conjugation) 을 형성할 수도 있다.
- [0103] 본 발명의 추가의 바람직한 실시 형태에서, Ar^2 는 5 내지 14 개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 바람직하게는 6 내지 12개의 탄소 원자를 갖고 하나 이상의 R^1 라디칼로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않는 방향족 고리 시스템이며, 여기서 R^1 은 특허 식 (I) 에 대해, 위에서 주어진 정의를 가질 수도 있다. 보다 바람직하게는, Ar^2 는 6 내지 10 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 또는 6 내지 13 개의 헤테로방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템이며, 이들의 각각은 하나 이상의 R^1 라디칼로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않고, 여기서 R^1 은 특허 식 (I) 에 대해, 위에 주어진 정의를 가질 수도 있다.
- [0104] 더욱 바람직하게는, 특허 식 (H-1) 내지 (H-26) 에 도시된 기호 Ar^2 는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템의 방향족 또는 헤테로방향족 기가 추가 기의 각각의 원자에 직접, 즉 방향족 또는 헤테로방향족 기의 원자를 통해 결합되도록 5 내지 14 개의 고리 원자, 바람직하게는 6 내지 13 개의 고리 원자, 보다 바람직하게는 6 내지 10 개의 고리 원자를 갖는 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 라디칼이다.
- [0105] 추가로, 식 (H-1) 내지 (H-26) 에 보여진 Ar^2 기는 2 개 이하의 융합된 방향족 및/또는 헤테로방향족 6 원 고리를 갖는 방향족 고리 시스템을 포함하고; 바람직하게는, 융합된 6 원 고리를 갖는 임의의 융합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 포함하지 않는 경우가 있을 수도 있다. 따라서, 안트라센 구조보다 나프틸 구조가 바람직하다. 또한, 플루오레닐, 스피로바이플루오레닐, 디벤조푸라닐 및/또는 디벤조티에닐 구조가 나프틸 구조보다 바람직하다. 융합이 없는 구조, 예를 들어 페닐, 바이페닐, 테르페닐 및/또는 쿼터페닐 구조가 특히 바람직하다.
- [0106] 또한, 특허 식 (H-1) 내지 (H-26) 에 보여진 Ar^2 기는 1개 이하의 질소 원자, 바람직하게는 2개 이하의 헤테로 원자, 특히 바람직하게는 1개 이하의 헤테로원자를 갖고 가장 바람직하게는 헤테로원자를 갖지 않는 경우가 있을 수도 있다.
- [0107] 본 발명의 추가의 바람직한 실시형태에서, Ar^3 및/또는 Ar^4 는 각각의 경우 동일 또는 상이하고, 6 내지 24 개의 방향족 고리 원자, 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 보다 바람직하게는 6 내지 12 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 또는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템이며, 이들 각각은 하나 이상의 R^1 라디칼로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 미치환되고, 여기서 R^1 은 특허 식 (I) 에서 위에 주어진 정의를 가질 수도 있다.
- [0108] 추가의 바람직한 실시형태에서, Ar 기는 정공 수송 기를 포함하거나 바람직하게는 구성할 수도 있다. 전자 수송 기는 당해 기술 분야에서 널리 알려져 있으며 전자를 수송 및/또는 전도할 수 있는 화합물의 능력을 증진시킨다. 특히 전자 결핍 헤테로아릴 기가 이 목적에 적합하다. 이들은, 적어도 하나의 질소 원자를 갖는 헤테로방향족 6원 고리를 함유한다는 점에서 및/또는, 적어도 2 개의 헤테로 원자를 가지며 이 중 적어도 하나의 헤테로원자가 질소인 헤테로방향족 5원 고리를 함유한다는 점에서 정의된다. 또한 추가의 아릴 또는

헤테로아릴 기가 이들 구조 상에 융합되는 것이, 예를 들어, 퀴나졸린 또는 벤즈이미다졸에서처럼, 가능하다.

[0109] 이와 관련하여, 전자 수송 기를 갖는 본 발명의 화합물이, 매트릭스 재료 및/또는 전자 수송 재료로서, 특히 또한 정공 수송 기를 갖지만 전자 수송 기를 갖지 않는 본 발명의 화합물보다, 특히 바람직하다는 것이 강조되어야 한다.

[0110] 또한, 식 (I) 의 적어도 하나의 구조 또는 그의 바람직한 실시형태들을 포함하는 화합물에 의해 놀라운 이점들이 나타나며, 여기서 Ar 기는 피리딘, 피리미딘, 피라진, 피리다진, 트리아진, 퀴나졸린, 퀴놀살린, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 이미다졸 및/또는 벤즈이미다졸의 군으로부터 선택되는 적어도 하나의 구조를 포함하고, 피리미딘, 트리아진 및 퀴나졸린이 특히 바람직하다.

[0111] 본 발명의 바람직한 구성에서, Ar 기는 하기 식 (QL) 로 표현될 수 있는 기인 경우가 있을 수도 있다



식 (QL)

[0112]

[0113] 식 중, L^1 은 결합 또는 5 내지 40 개, 바람직하게는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R^1 라디칼에 의해 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 나타내고, Q 는 전자 수송 기이며, 여기서 R^1 은 특히 식 (I) 에 대해 위에 주어진 정의를 갖는다. 이 경우, 전자 수송 기는 위에 정의된 바와 같다.

[0114] 바람직하게는, L^1 기는 식 (QL) 의 L^1 기가 결합되는 질소 원자 및 Q 기와 관통 공역을 형성할 수도 있다. 방향족 또는 헤테로방향족 시스템의 관통 공역은 인접한 방향족 또는 헤테로방향족 고리 사이에 직접 결합이 형성되는 대로 형성된다. 예를 들어 황, 질소 또는 산소 원자 또는 카르보닐 기를 통해 위에 언급된 공역 기들 사이의 추가 결합은 공역에 해롭지 않다. 플루오렌 시스템의 경우, 2개의 방향족 고리는 직접 결합되고, 여기서 9 위치에서의 sp^3 -혼성화 탄소 원자는 이들 고리의 융합을 방지하지만 공역은 가능한데, 이는 9 위치에서의 이러한 sp^3 -혼성화 탄소 원자가 전자 수송 Q 기와 질소 원자 사이에 반드시 놓이는 것은 아니기 때문이다.

대조적으로, 제 2 스피로바이플루오렌 구조의 경우, 식 (QL) 의 L^1 기가 결합되는 방향족 또는 헤테로방향족 라디칼과 Q 기 사이의 결합이 스피로바이플루오렌 구조에서 동일한 페닐 기를 통하거나, 또는 서로 직접 결합되고 하나의 평면내에 있는 스피로바이플루오렌 구조에서의 페닐 기들을 통하는 경우, 관통 공역이 형성될 수 있다. 식 (QL) 의 L^1 기가 결합되는 방향족 또는 헤테로방향족 라디칼과 Q 기 사이의 결합이 9 위치에서의 sp^3 -혼성화 탄소 원자를 통해 결합된 제 2 스피로바이플루오렌 구조에서 상이한 페닐 기를 통해 결합되는 경우, 공역이 인터럽트된다.

[0115] 본 발명의 바람직한 실시 형태에서, L^1 은 결합이거나 또는 5 내지 14 개의 방향족 또는 헤테로방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 바람직하게는 6 내지 12개의 탄소 원자를 갖고 하나 이상의 R^1 라디칼로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않는 방향족 고리 시스템이며, 여기서 R^1 은 특히 식 (I) 에 대해, 위에서 주어진 정의를 가질 수도 있다. 보다 바람직하게는, L^1 은 6 내지 10 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 또는 6 내지 13 개의 헤테로방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템이며, 이들의 각각은 하나 이상의 R^1 라디칼로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않고, 여기서 R^1 은 특히 식 (I) 에 대해, 위에 주어진 정의를 가질 수도 있다.

[0116] 또한 바람직하게는, 특히 식 (QL) 에 나타낸 기호 L^1 은 각 경우 동일 또는 상이하고, 결합이거나 또는 5 내지 24 개의 고리 원자, 바람직하게는 6 내지 13 개의 고리 원자, 보다 바람직하게는 6 내지 10 개의 고리 원자를 갖는 아릴렌 또는 헤테로아릴렌 라디칼로서, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템의 방향족 또는 헤테로방향족 기가 추가 기의 각각의 원자에 직접, 즉 방향족 또는 헤테로방향족 기의 원자를 통해 결합된다.

[0117] 추가로, 식 (QL) 에 나타낸 L^1 기는 2 개 이하의 융합된 방향족 및/또는 헤테로방향족 6 원 고리를 갖는 방향족 고리 시스템을 포함하고; 바람직하게는, 임의의 융합된 방향족 또는 헤테로 방향족 고리 시스템을 포함하지 않

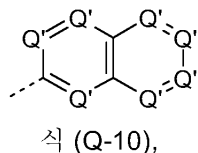
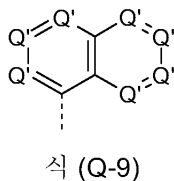
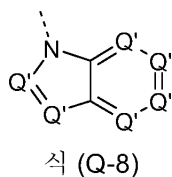
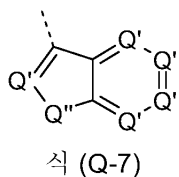
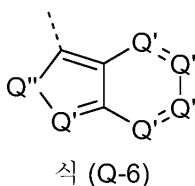
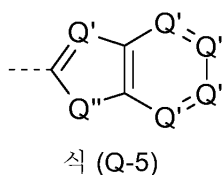
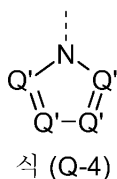
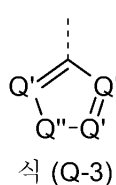
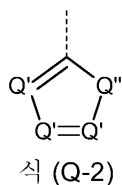
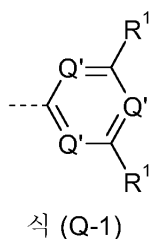
는 경우가 있을 수도 있다. 따라서, 안트라센 구조보다 나프틸 구조가 바람직하다. 또한, 플루오레닐, 스피로바이플루오레닐, 디벤조푸라닐 및/또는 디벤조티에닐 구조가 나프틸 구조보다 바람직하다.

[0118] 융합이 없는 구조, 예를 들어 페닐, 바이페닐, 테르페닐 및/또는 쿼터페닐 구조가 특히 바람직하다.

[0119] 적합한 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 L^1 의 예들은 오르토-, 메타- 또는 파라-페닐렌, 오르토-, 메타- 또는 파라-바이페닐렌, 테르페닐렌, 특히 분지형 테르페닐렌, 쿼터페닐렌, 특히 분지형 쿼터페닐렌, 플루오레닐렌, 스피로바이플루오레닐렌, 디벤조푸라닐렌, 디벤조티에닐렌 및 카르바졸릴렌 (이들의 각각은 하나 이상의 R^1 라디칼로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않는다) 으로 이루어지는 군으로부터 선택된다. L^1 이 카르바졸릴렌인 경우, 그것은 H 및 D 외의 R^1 라디칼에 의해, 카르바졸릴렌이 질소 원자를 통해 연결되어 있지 않을 때, 바람직하게는 방향족 또는 헤테로방향족 R^1 라디칼에 의해, 질소 상에서 치환되는 것이 바람직하다.

[0120] 또한, 특히 식 (QL)에 나타낸 L^1 기가 1개 이하의 질소 원자, 바람직하게는 2개 이하의 헤테로원자, 특히 바람직하게는 1개 이하의 헤테로원자를 갖고 보다 바람직하게는 헤테로원자를 갖지 않는 경우가 있을 수도 있다.

[0121] 바람직하게는, 특히 식 (QL)에 나타낸 Q 기, 또는 전자 수송 기는 식 (Q-1), (Q-2), (Q-3), (Q-4), (Q-5), (Q-6), (Q-7), (Q-8), (Q-9) 및/또는 (Q-10)의 구조들로부터 선택될 수도 있다



[0122]

[0123] 식 중, 점선 결합은 부착 위치를 나타내고,

[0124] Q'는 각각의 경우 동일하거나 상이하며, CR^1 또는 N 이고,

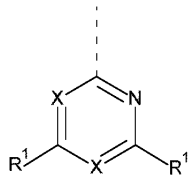
[0125] Q''는 NR^1 , O 또는 S 이고;

[0126] 여기서 적어도 하나의 Q'는 N 이고,

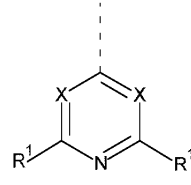
[0127] R^1 는 특히 식 (I)에서 위에 정의된 바와 같다.

[0128] 또한, 특히 식 (QL)에 나타낸 Q 기, 또는 전자 수송 기는 바람직하게는 식 (Q-11), (Q-12), (Q-13), (Q-14)

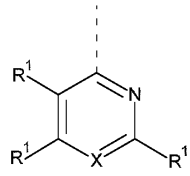
및/또는 (Q-15) 의 구조로부터 선택될 수도 있다



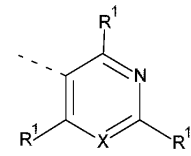
식 (Q-11)



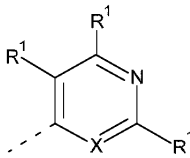
식 (Q-12)



식 (Q-13)



식 (Q-14)



식 (Q-15)

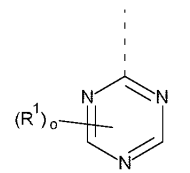
[0129]

[0130]

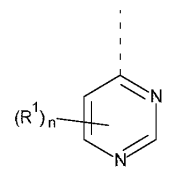
식 중 기호 R^1 은 특히 식 (I) 에 대해 위에 주어진 정의를 갖고, X 는 N 또는 CR^1 이고 점선 결합은 부착 위치를 표시하고, 여기서 X는 바람직하게는 질소 원자이다.

[0131]

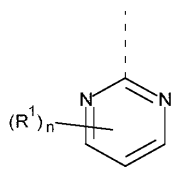
추가 실시 형태에서, 특히 식 (QL) 에 나타낸 Q 기, 또는 전자 수송 기는 식 (Q-16), (Q-17), (Q-18), (Q-19), (Q-20), (Q-21) 및/또는 (Q-22) 의 구조들로부터 선택될 수도 있다



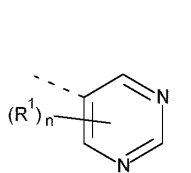
식 (Q-16)



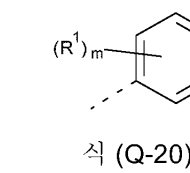
식 (Q-17)



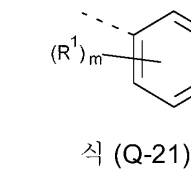
식 (Q-18)



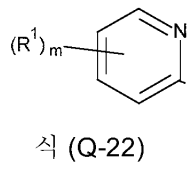
식 (Q-19)



식 (Q-20)



식 (Q-21)

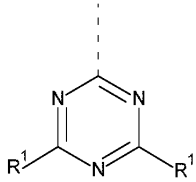


식 (Q-22)

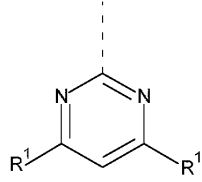
[0132]

[0133] 식 중 기호 R^1 은 특히 식 (I) 에 대해 위에 주어진 정의를 갖고, 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. 여기에서 식 (Q-16), (Q-17), (Q-18) 및 (Q-19) 의 구조가 바람직하다.

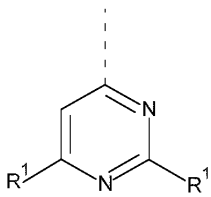
[0134] 추가의 실시 형태에서, 특히 식 (QL) 에 나타낸 Q 기, 또는 전자 수송 기는 식 (Q-23), (Q-24) 및/또는 (Q-25) 의 구조들로부터 선택될 수도 있다



식 (Q-23)



식 (Q-24)

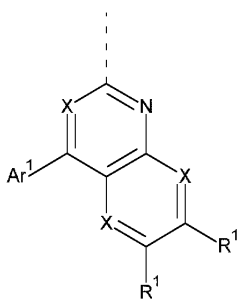


식 (Q-25)

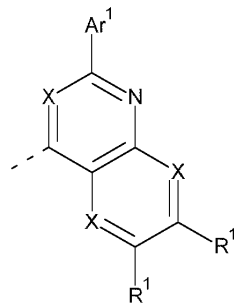
[0135]

[0136] 식 중 기호 R^1 은 특히 식 (I) 에 대해 위에 제시된 정의를 가지며, 점선 결합은 부착 위치를 표시한다.

[0137] 추가의 실시 형태에서, 특히 식 (QL) 에 나타낸 Q 기, 또는 전자 수송 기는 식 (Q-26), (Q-27), (Q-28), (Q-29) 및/또는 (Q-30) 의 구조들로부터 선택될 수도 있다

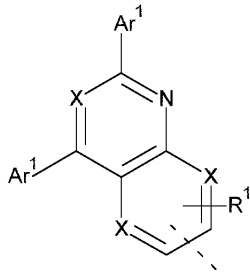


식 (Q-26)

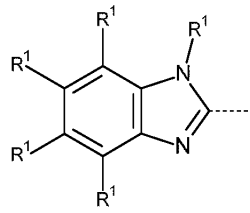


식 (Q-27)

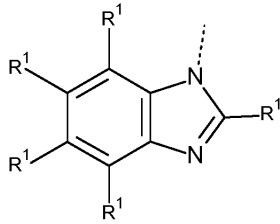
[0138]



식 (Q-28)



식 (Q-29)



식 (Q-30)

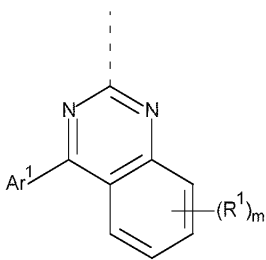
[0139]

[0140]

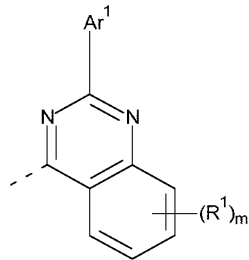
여기서 기호 X, Ar¹ 및 R¹는 특히 식 (I)에 대해 위에 주어진 정의를 가지며, 점선 결합은 부착 위치를 표시한다. 바람직하게는, 식 (Q-26), (Q-27) 및 (Q-28)의 구조들에서, 정확히 하나의 X가 질소 원자이다.

[0141]

바람직하게는, 특히 식 (QL)에 나타난 Q기, 또는 전자 수송기는 식 (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 구조들로부터 선택될 수도 있다

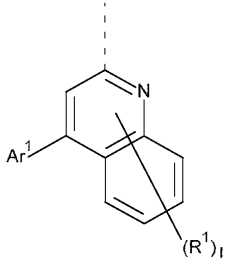


식 (Q-31)

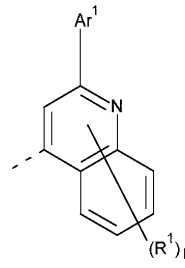


식 (Q-32)

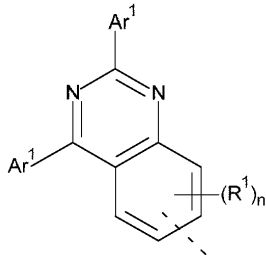
[0142]



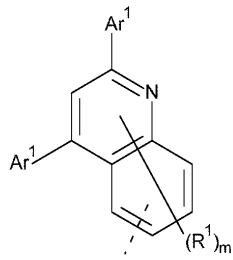
식 (Q-33)



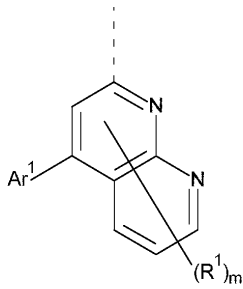
식 (Q-34)



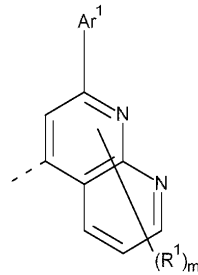
식 (Q-35)



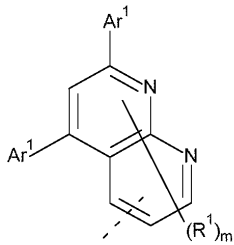
식 (Q-36)



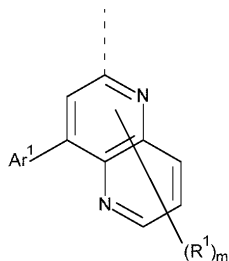
식 (Q-37)



식 (Q-38)

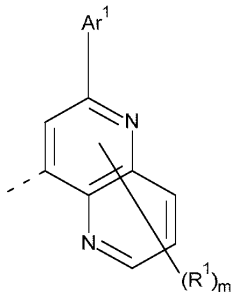


식 (Q-39)

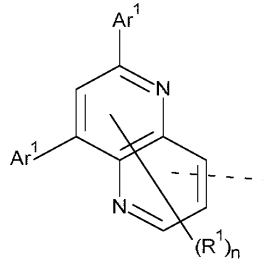


식 (Q-40)

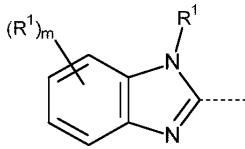
[0143]



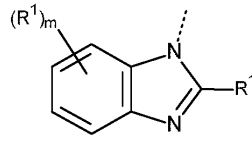
식 (Q-41)



식 (Q-42)



식 (Q-43)



식 (Q-44)

[0144]

[0145]

식 중, 기호 Ar¹ 및 R¹ 은 특히 식 (I) 에 대해 위에 제시된 정의를 갖고, 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, n 은 0, 1, 2 또는 3, 바람직하게는 0, 1 또는 2 이고, l 은 1, 2, 3, 4 또는 5, 바람직하게는 0, 1 또는 2 이다.

[0146]

위에 상세히 나타낸 식 (Q-1) 내지 (Q-44) 의 전자 수송 기는 또한 식 (I) 또는 이 식의 바람직한 실시형태들의 화합물에서 바람직한 R¹ 라디칼을 구성하고, 여기서 이 경우 식 (Q-1) 내지 (Q-44) 에 상세히 나타낸 R¹ 기들은 R² 라디칼에 의해 대체되어야 한다.

[0147]

또한, Ar 기는 정공 수송 기 및 전자 수송 기를 포함하는 경우가 있을 수도 있다. 그 구성에 따르면, 바람직한 기는 위에 상술된 식 (H-1) 내지 (H-26) 또는 (Q-1) 내지 (Q-44) 로부터 형성될 수도 있으며, 여기서, 예를 들어, R¹ 기는 정공 수송 또는 전자 수송 기일 수도 있으며, 여기서, 예를 들어, 식 (H-1) 내지 (H-26) 또는 (Q-1) 내지 (Q-44) 에 나타낸 R¹ 라디칼은 대응하는 R² 라디칼에 의해 대체될 수도 있다.

[0148]

본 발명의 추가의 바람직한 실시형태에서, Ar¹ 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자, 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 바람직하게는 아릴 또는 헤테로아릴 라디칼이고, 보다 바람직하게는 6 내지 10 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 방향족 고리 시스템, 바람직하게는 아릴 라디칼, 또는 5 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 헤테로방향족 고리 시스템, 바람직하게는 헤테로아릴 기이며, 이들의 각각은 하나 이상의 R² 라디칼로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않고, 여기서 R² 는 특히 식 (I) 에서 위에 상술된 정의를 가질 수도 있다.

[0149]

바람직하게는, 기호 Ar¹ 은 아릴 또는 헤테로아릴 라디칼로서, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템의 방향족 또는 헤테로방향족 기가 직접, 즉 방향족 또는 헤테로방향족 기의 원자를 통해, 추가의 기의 각각의 원자, 예를 들어, 위에 나타난 (H-1) 내지 (H-26) 또는 (Q-26) 내지 (Q-44) 기의 탄소 또는 질소 원자에 결합된다.

[0150]

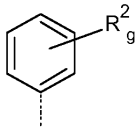
유리하게는, 식 (H-1) 내지 (H-26) 또는 (Q-26) 내지 (Q-44) 에서의 Ar¹ 은, 6 내지 12 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R² 라디칼로 치환될 수도 있지만 바람직하게는 치환되지 않는 방향족 고리 시스템이고, 여기서, R² 는 특히 식 (I) 에 대해 위에 상술된 정의를 가질 수도 있다.

[0151]

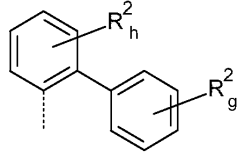
바람직하게는, 식 (H-1) 내지 (H-26) 또는 (Q-1) 내지 (Q-44) 에서의 R¹ 또는 R² 라디칼은, R¹ 또는 R² 라디칼이 결합되어 있는 아릴 기 또는 헤테로아릴 기 Ar¹, Ar², Ar³ 및/또는 Ar⁴ 의 고리 원자와 융합된 고리 시스템을 형성하지 않는다. 이것은 R¹ 또는 R² 라디칼에 결합될 수도 있는 가능한 R² 또는 R³ 치환기와의 융합된 고리 시스템의 형성을 포함한다.

- [0152] 또한, Ar, Ar¹, Ar², Ar³ 및/또는 Ar⁴ 가 페닐, 오르토-, 메타- 또는 파라-바이페닐, 테르페닐, 특히 오르토-, 메타- 또는 파라-테르페닐 또는 분지형 테르페닐, 쿼터페닐, 특히 오르토-, 메타- 또는 파라-쿼터페닐 또는 분지형 쿼터페닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-플루오레닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-스피로바이플루오레닐, 피리딜, 피리미디닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-디벤조푸라닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-디벤조티에닐, 피레닐, 트리아지닐, 이미다졸릴, 벤즈이미다졸릴, 벤즈옥사졸릴, 벤조티아졸릴, 1-, 2-, 3- 또는 4- 카르바졸릴, 1- 또는 2-나프틸, 안트라세닐, 바람직하게는 9-안트라세닐, 페난트레닐 및/또는 트리페닐레닐로 이루어진 군에서 선택되고, 이들 각각은 하나 이상의 R² 라디칼로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않고, 페닐, 스피로바이플루오렌, 플루오렌, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 안트라센, 페난트렌, 트리페닐렌 기가 특히 바람직하다.
- [0153] X 가 CR¹ 인 경우, 또는 방향족 및/또는 헤테로방향족 기가 R¹ 치환기로 치환되는 경우, 이들 R¹ 치환기는 바람직하게는 H, D, F, CN, N(Ar¹)₂, C(=O)Ar¹, P(=O)(Ar¹)₂, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 또는 알콕시 기 또는 3 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 또는 알콕시 기 또는 2 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 (이들 각각은 하나 이상의 R² 라디칼로 치환될 수 있고, 여기서 하나 이상의 비인접한 CH₂ 기는 0 로 대체될 수 있고, 여기서 하나 이상의 수소 원자는 D 또는 F 로 대체될 수도 있음), 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각각의 경우 하나 이상의 R² 라디칼로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 또는 5 내지 25 개의 방향족 고리 원자를 갖고, 하나 이상의 R² 라디칼로 치환될 수도 있는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬 기로 이루어진 군으로부터 선택되고; 동시에, 선택적으로, 2 개의 R¹ 치환기가 인접한 탄소 원자에 바람직하게 결합되어, 하나 이상의 R¹ 라디칼로 치환될 수도 있는 단환 또는 다환, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성할 수 있고, 여기서 Ar¹ 기는 특히 식 (I) 에 대해 위에 주어진 정의를 갖는다.
- [0154] 보다 바람직하게는, 이들 R¹ 치환기는 H, D, F, CN, N(Ar¹)₂, 1 내지 8 개의 탄소 원자를 갖고, 바람직하게는 1, 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬 기, 또는 3 내지 8 개의 탄소 원자, 바람직하게는 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬 기, 또는 2 내지 8 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 2, 3 또는 4 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 (이들의 각각은 하나 이상의 R² 라디칼로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않음), 또는 5 내지 24 개의 방향족 고리 원자, 바람직하게는 6 내지 18 개의 방향족 고리 원자, 보다 바람직하게는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각각의 경우에 하나 이상의 비방향족 R¹ 라디칼로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어진 군으로부터 선택되고; 동시에, 인접한 탄소 원자에 바람직하게 결합되는 2 개의 R¹ 치환기들은, 하나 이상의 R² 라디칼로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않는 단환 또는 다환 지방족 고리 시스템을 선택적으로 형성할 수도 있고, 여기서 Ar¹ 은 위에 제시된 정의를 가질 수도 있다.
- [0155] 가장 바람직하게는, R¹ 치환기들은 H, 및 6 내지 18 개 방향족 고리 원자, 바람직하게는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 가지며 각각의 경우 하나 이상의 비방향족 R² 라디칼로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않는, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어지는 군으로부터 선택된다. 적합한 R¹ 치환기의 예는 페닐, 오르토-, 메타- 또는 파라-바이페닐, 테르페닐, 특히 분지형 테르페닐, 쿼터페닐, 특히 분지형 쿼터페닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-플루오레닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-스피로바이플루오레닐, 피리딜, 피리미디닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-디벤조푸라닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-디벤조티에닐 및 1-, 2-, 3- 또는 4-카르바졸릴 (이들 각각은 하나 이상의 R² 라디칼로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않음) 로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0156] 또한, 식 (I), (IIa), (IIb), (IIc), (IId), (IIe), (IIf), (III), (IIIa), (IIIb), (IIIc), (IIId), (IIIe), (IIIf), (IV), (IVa), (IVb), (IVc), (IVd), (IVe), (IVf), (V), (Va), (Vb), (Vc), (Vd), (Ve), (Vf), (VI), (VIa), (VIb), (VIc), (VI d), (VIe), (VI f), (VII), (VIIa), (VIIb), (VIIc), (VIId), (VIIe) 및/또는 (VIIf) 의 구조에서, 적어도 하나의 R¹ 또는 Ar¹ 라디칼은 식 (R¹-1) 내지 (R¹-92) 로부터 선택된 기이거나, 또는 식 (H-1) 내지 (H-26), (Q-1) 내지 (Q-44) 의 구조에서, 적어도 하나의 Ar¹ 또는 R¹ 라디칼은 식 (R¹-1) 내지 (R¹-

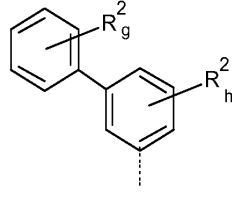
92)로부터 선택된 기인 경우가 있을 수도 있다



식 (R¹-1)

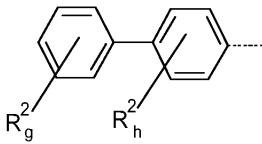


식 (R¹-2)

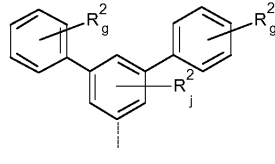


식 (R¹-3)

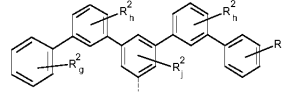
[0157]



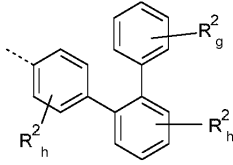
식 (R¹-4)



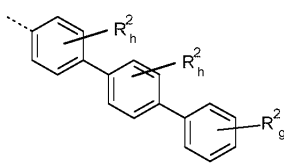
식 (R¹-5)



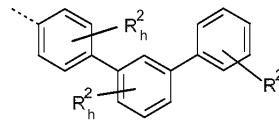
식 (R¹-6)



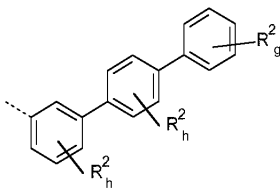
식 (R¹-7)



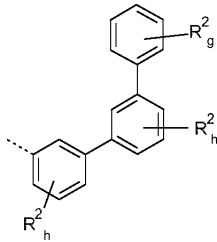
식 (R¹-8)



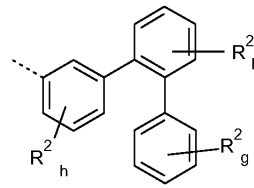
식 (R¹-9)



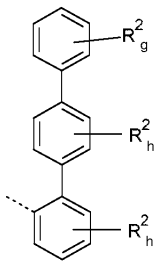
식 (R¹-10)



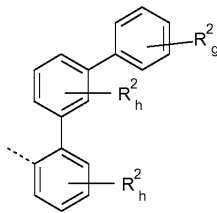
식 (R¹-11)



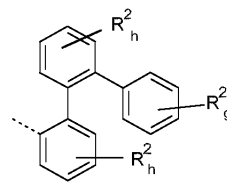
식 (R¹-12)



식 (R¹-13)

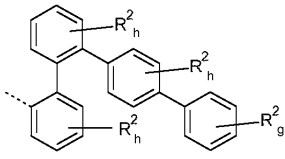


식 (R¹-14)

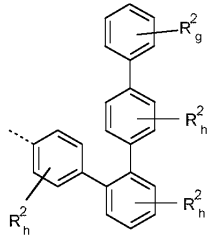


식 (R¹-15)

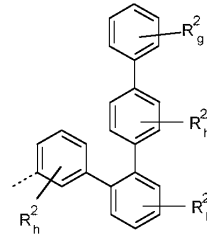
[0158]



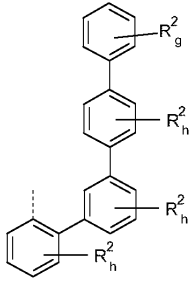
식 (R¹⁻¹⁶)



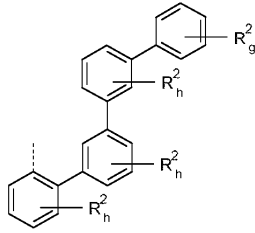
식 (R¹⁻¹⁷)



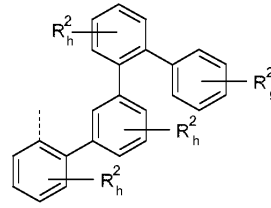
식 (R¹⁻¹⁸)



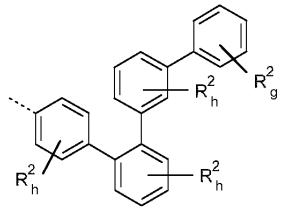
식 (R¹⁻¹⁹)



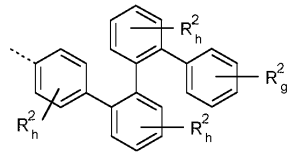
식 (R¹⁻²⁰)



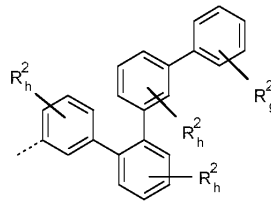
식 (R¹⁻²¹)



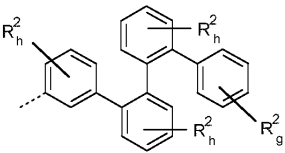
식 (R¹⁻²²)



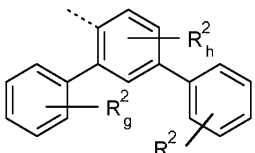
식 (R¹⁻²³)



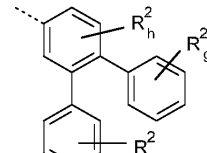
식 (R¹⁻²⁴)



식 (R¹⁻²⁵)

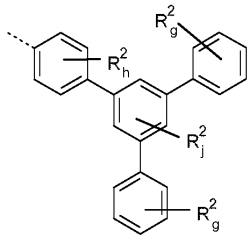


식 (R¹⁻²⁶)

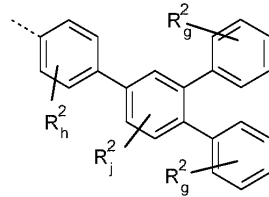


식 (R¹⁻²⁷)

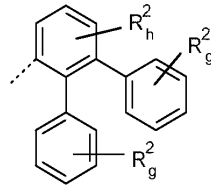
[0159]



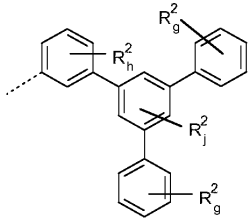
식 (R¹-28)



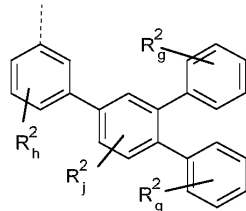
식 (R¹-29)



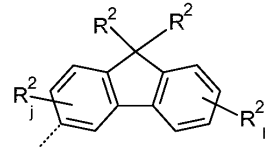
식 (R¹-30)



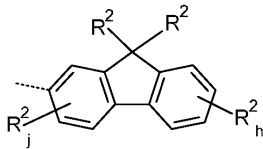
식 (R¹-31)



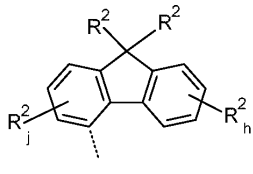
식 (R¹-32)



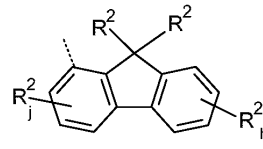
식 (R¹-33)



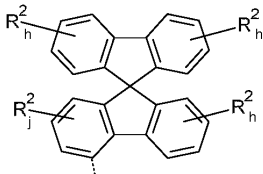
식 (R¹-34)



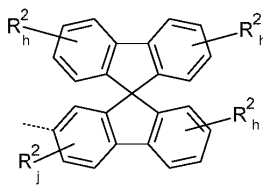
식 (R¹-35)



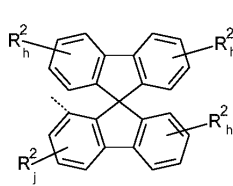
식 (R¹-36)



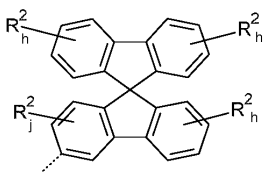
식 (R¹-37)



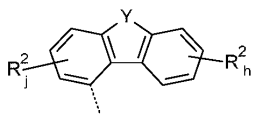
식 (R¹-38)



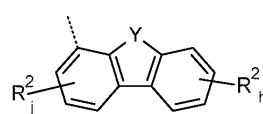
식 (R¹-39)



식 (R¹-40)

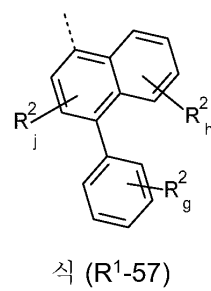
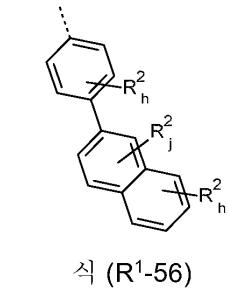
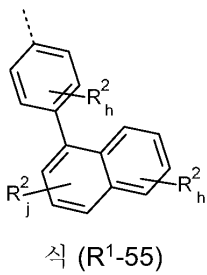
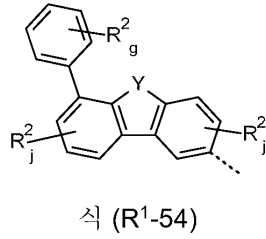
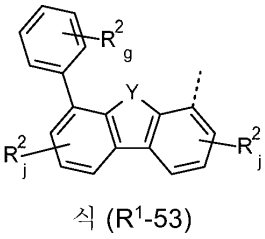
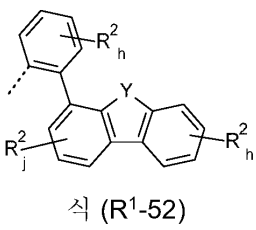
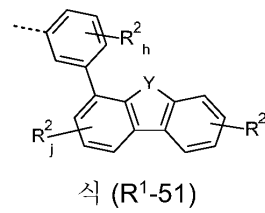
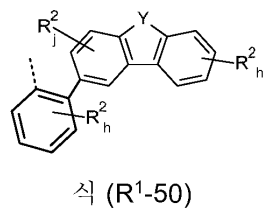
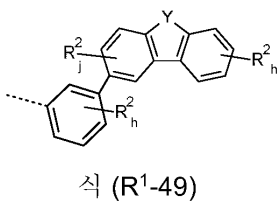
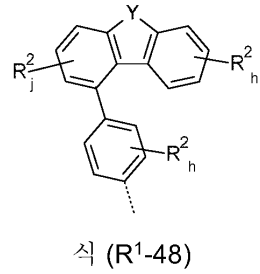
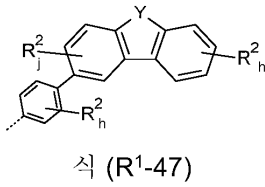
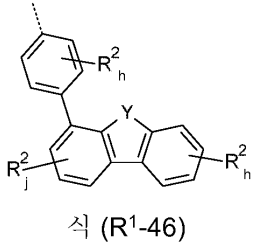
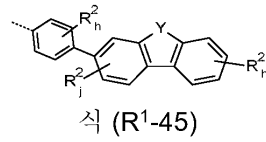
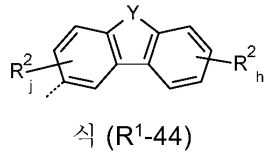
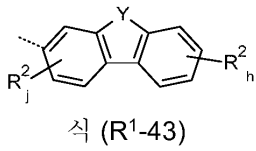


식 (R¹-41)

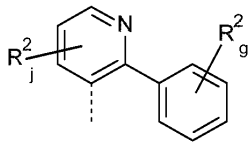


식 (R¹-42)

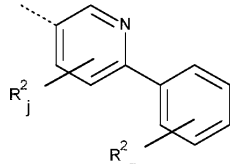
[0160]



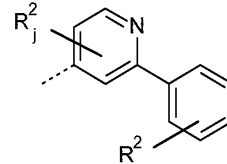
[0161]



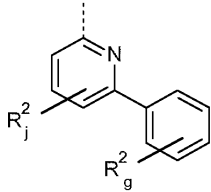
식 (R¹-58)



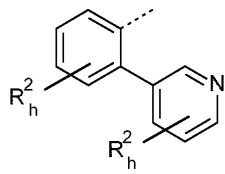
식 (R¹-59)



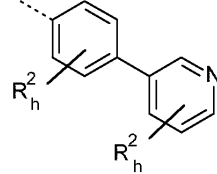
식 (R¹-60)



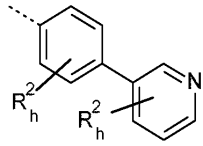
식 (R¹-61)



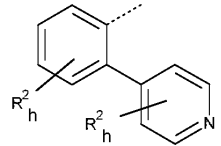
식 (R¹-62)



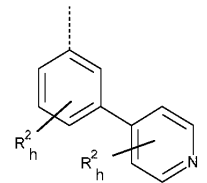
식 (R¹-63)



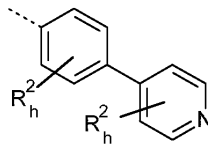
식 (R¹-64)



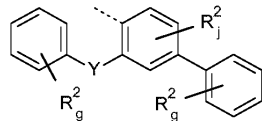
식 (R¹-65)



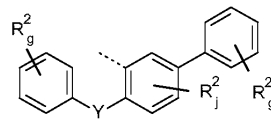
식 (R¹-66)



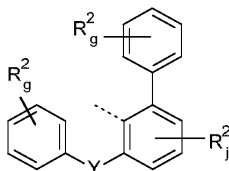
식 (R¹-67)



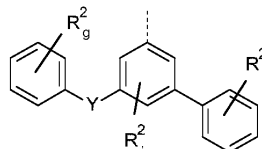
식 (R¹-68)



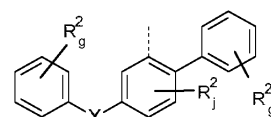
식 (R¹-69)



식 (R¹-70)

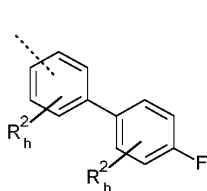


식 (R¹-71)

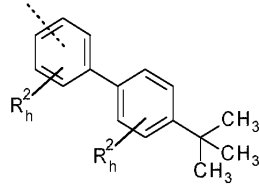


식 (R¹-72)

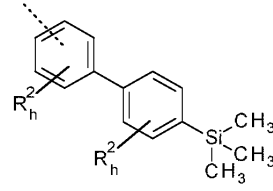
[0162]



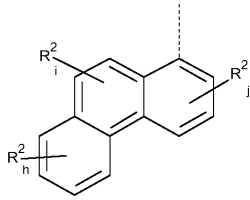
식 (R¹-73)



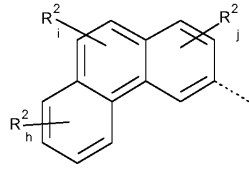
식 (R¹-74)



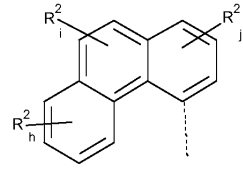
식 (R¹-75)



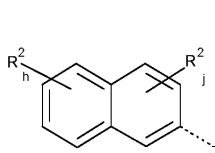
식 (R¹-76)



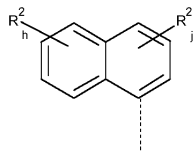
식 (R¹-77)



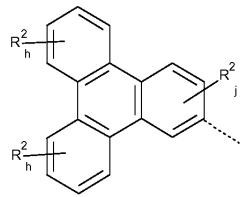
식 (R¹-78)



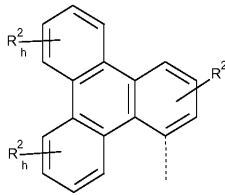
식 (R¹-79)



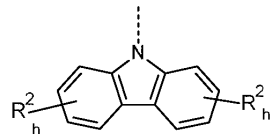
식 (R¹-80)



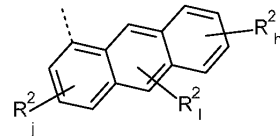
식 (R¹-81)



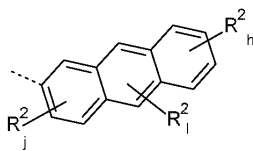
식 (R¹-82)



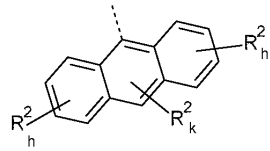
식 (R¹-83)



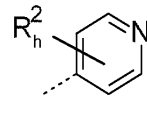
식 (R¹-84)



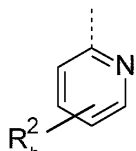
식 (R¹-85)



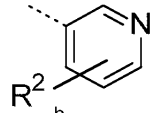
식 (R¹-86)



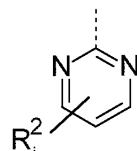
식 (R¹-87)



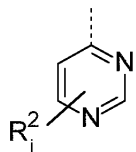
식 (R¹-88)



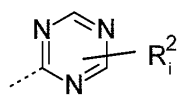
식 (R¹-89)



식 (R¹-90)



식 (R¹-91)



식 (R¹-92)

[0163]

[0164]

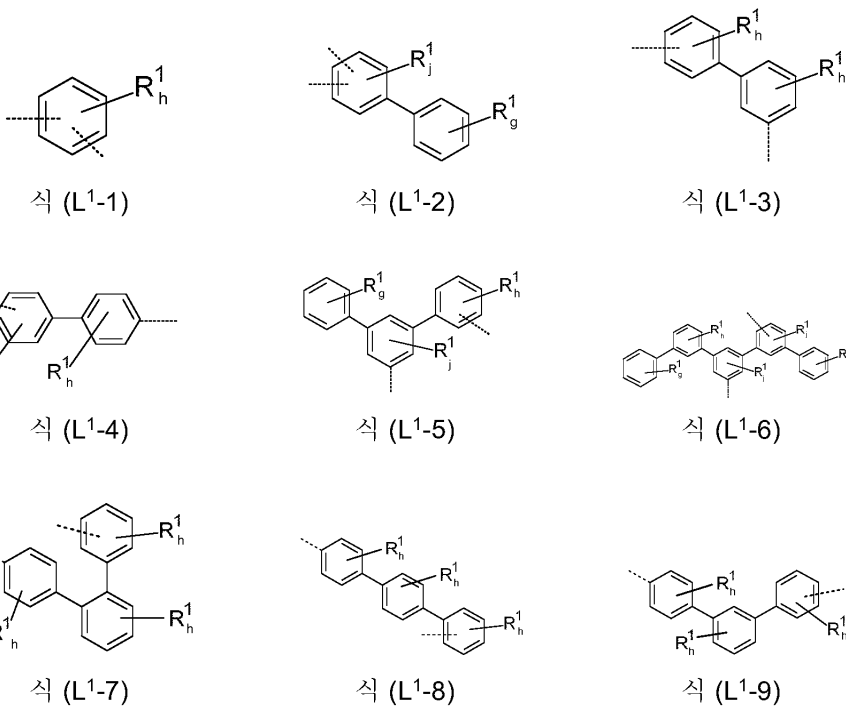
[0165]

[0166]

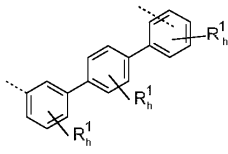
식중에서 사용된 기호들은 다음과 같다:

Y 는 O, S 또는 NR², 바람직하게는 O 또는 S 이고;

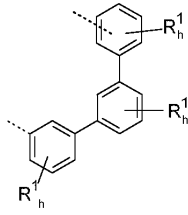
- [0167] k 는 각각의 경우 독립적으로 0 또는 1 이고;
- [0168] i 는 각각의 경우 독립적으로 0, 1 또는 2 이고;
- [0169] j는 각각의 경우 독립적으로 0, 1, 2 또는 3이고;
- [0170] h는 각각의 경우 독립적으로 0, 1, 2, 3 또는 4이고;
- [0171] g는 각각의 경우 독립적으로 0, 1, 2, 3, 4 또는 5이고;
- [0172] R^2 는, 특히 식 (I) 에 대해, 위에 주어진 정의를 가질 수도 있다;
- [0173] 점선의 결합은 부착 부위를 표시한다.
- [0174] 여기에서 식 R^{1-1} 내지 R^{1-56} 의 기가 바람직하고, R^{1-1} , R^{1-3} , R^{1-5} , R^{1-6} , R^{1-15} , R^{1-29} , R^{1-30} , R^{1-31} , R^{1-32} , R^{1-33} , R^{1-38} , R^{1-39} , R^{1-40} , R^{1-41} , R^{1-42} , R^{1-43} , R^{1-44} 및/또는 R^{1-45} 기가 특히 바람직하다.
- [0175] 바람직하게는, 식 (R^{1-1}) 내지 (R^{1-92}) 의 구조들에서 인덱스 k, i, j, h 및 g 의 총합은 각각의 경우 3 이하, 바람직하게는 2 이하, 그리고 보다 바람직하게는 1 이하인 경우가 있을 수도 있다.
- [0176] 바람직하게는, 식 (R^{1-1}) 내지 (R^{1-92}) 에서의 R^2 라디칼은, R^2 라디칼이 결합되는 아릴 기 또는 헤테로아릴 기의 고리 원자와, 융합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성하지 않으며, 바람직하게는 임의의 융합된 고리 시스템을 형성하지 않는다. 이것은 R^2 라디칼에 결합될 수도 있는 가능한 R^3 치환기와의 융합된 고리 시스템의 형성을 포함한다.
- [0177] 식 (R^{1-1}) 내지 (R^{1-92}) 의 위에 상술된 라디칼은, 식 (I) 의 바람직한 Ar 라디칼 또는 식 (H-1) 내지 (H-3) 또는 이들 식의 바람직한 실시형태의 Ar^3 , Ar^4 라디칼이고, 여기서 이 경우에, 식 (R^{1-1}) 내지 (R^{1-92}) 에 나타낸 R^2 기들은 R^1 라디칼에 의해 대체될 수 있다. 식 (R^{1-1}) 내지 (R^{1-92}) 과 관련하여 위에 상술된 번호들이 대응하여 적용가능하다.
- [0178] Ar^2 기가 식 (L^{1-1}) 내지 (L^{1-108}) 로부터 선택되는 기인 식 (H-1) 내지 (H-26) 의 적어도 하나의 구조를 포함하는 화합물 및/또는 L^1 기가 결합되거나 또는 식 (L^{1-1}) 내지 (L^{1-108}) 로부터 선택된 기인 식 (QL) 의 구조들을 포함하는 화합물이 바람직하다



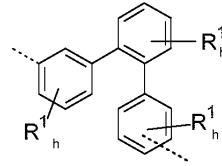
[0179]



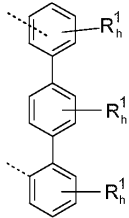
식 (L¹-10)



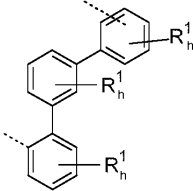
식 (L¹-11)



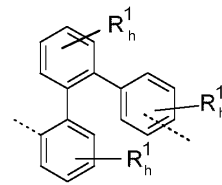
식 (L¹-12)



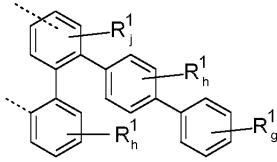
식 (L¹-13)



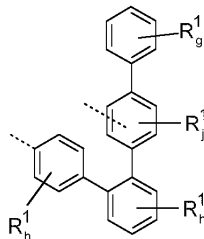
식 (L¹-14)



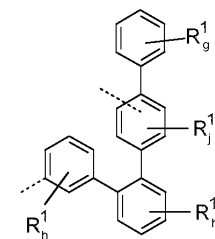
식 (L¹-15)



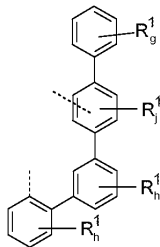
식 (L¹-16)



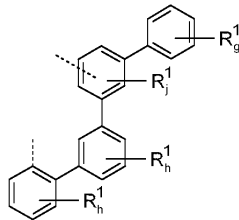
식 (L¹-17)



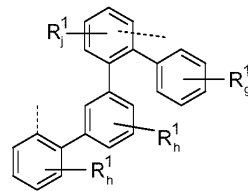
식 (L¹-18)



식 (L¹-19)

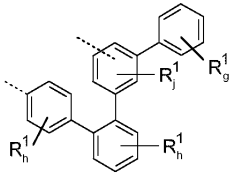


식 (L¹-20)

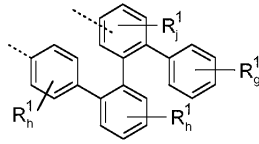


식 (L¹-21)

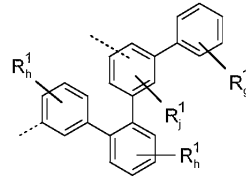
[0180]



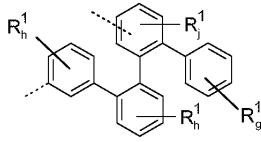
식 (L¹-22)



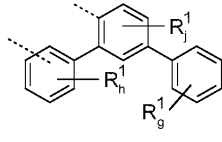
식 (L¹-23)



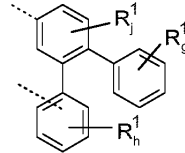
식 (L¹-24)



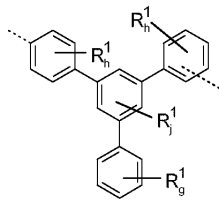
식 (L¹-25)



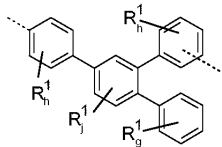
식 (L¹-26)



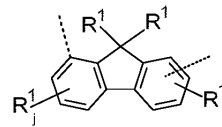
식 (L¹-27)



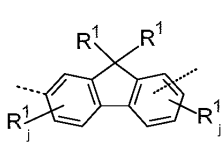
식 (L¹-28)



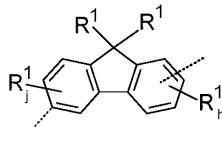
식 (L¹-29)



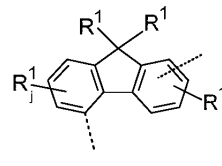
식 (L¹-30)



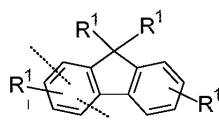
식 (L¹-31)



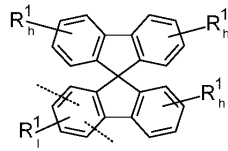
식 (L¹-32)



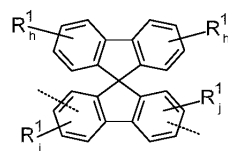
식 (L¹-33)



식 (L¹-34)

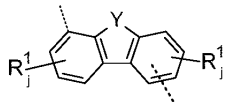


식 (L¹-35)

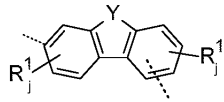


식 (L¹-36)

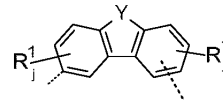
[0181]



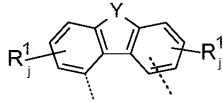
식 (L¹-37)



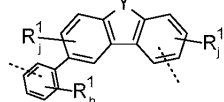
식 (L¹-38)



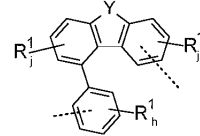
식 (L¹-39)



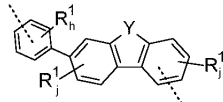
식 (L¹-40)



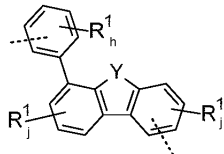
식 (L¹-41)



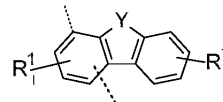
식 (L¹-42)



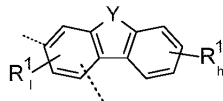
식 (L¹-43)



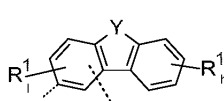
식 (L¹-44)



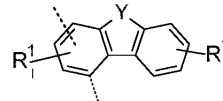
식 (L¹-45)



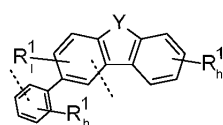
식 (L¹-46)



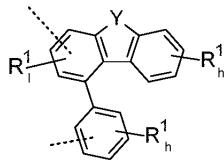
식 (L¹-47)



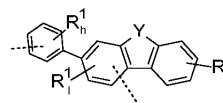
식 (L¹-48)



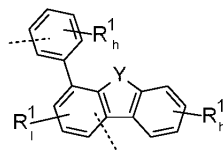
식 (L¹-49)



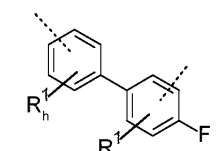
식 (L¹-50)



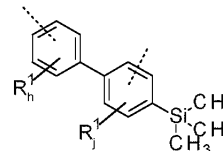
식 (L¹-51)



식 (L¹-52)

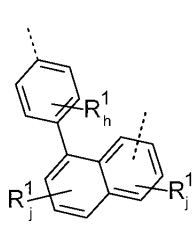


식 (L¹-53)

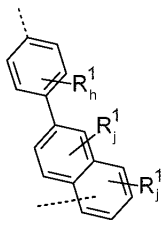


식 (L¹-54)

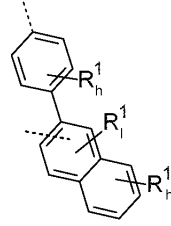
[0182]



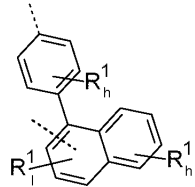
식 (L¹-55)



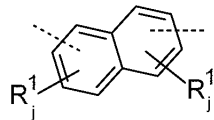
식 (L¹-56)



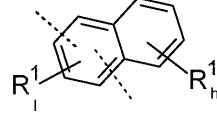
식 (L¹-57)



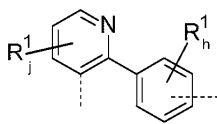
식 (L¹-58)



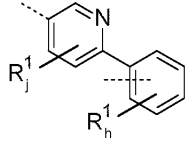
식 (L¹-59)



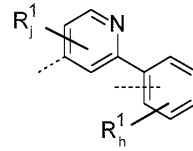
식 (L¹-60)



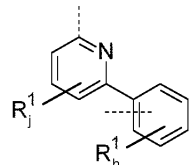
식 (L¹-61)



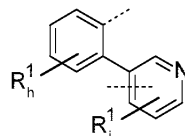
식 (L¹-62)



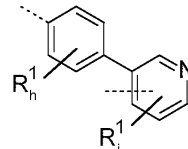
식 (L¹-63)



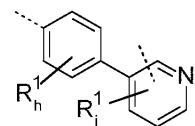
식 (L¹-64)



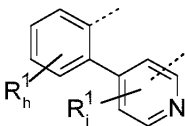
식 (L¹-65)



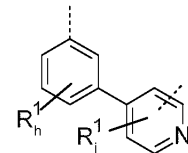
식 (L¹-66)



식 (L¹-67)

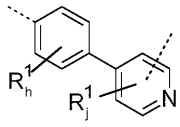


식 (L¹-68)

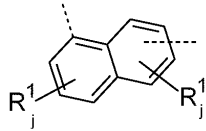


식 (L¹-69)

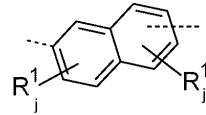
[0183]



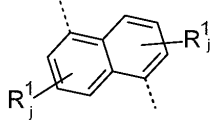
식 (L¹-70)



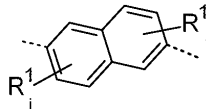
식 (L¹-71)



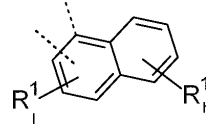
식 (L¹-72)



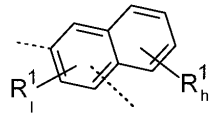
식 (L¹-73)



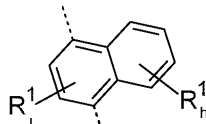
식 (L¹-74)



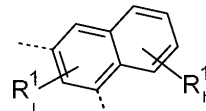
식 (L¹-75)



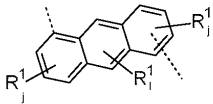
식 (L¹-76)



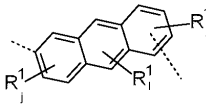
식 (L¹-77)



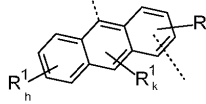
식 (L¹-78)



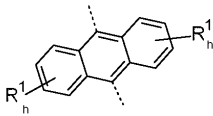
식 (L¹-79)



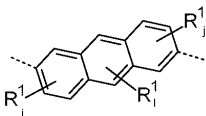
식 (L¹-80)



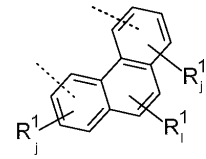
식 (L¹-81)



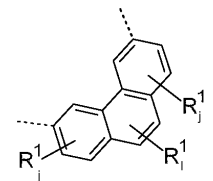
식 (L¹-82)



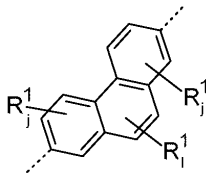
식 (L¹-83)



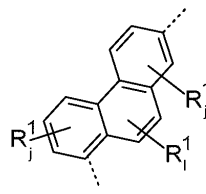
식 (L¹-84)



식 (L¹-85)

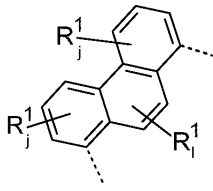


식 (L¹-86)

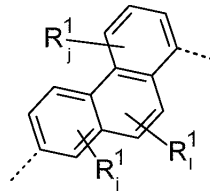


식 (L¹-87)

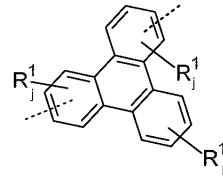
[0184]



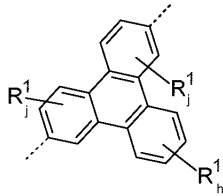
식 (L1-88)



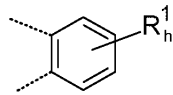
식 (L1-89)



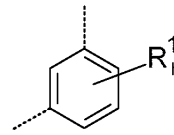
식 (L1-90)



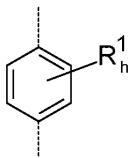
식 (L1-91)



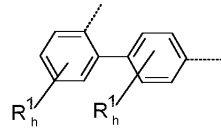
식 (L1-92)



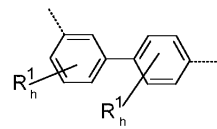
식 (L1-93)



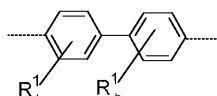
식 (L1-94)



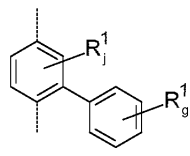
식 (L1-95)



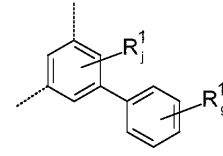
식 (L1-96)



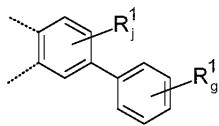
식 (L1-97)



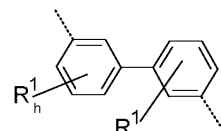
식 (L1-98)



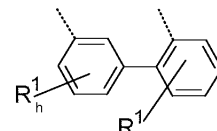
식 (L1-99)



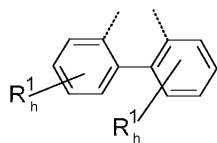
식 (L1-100)



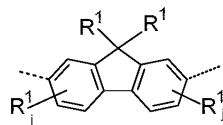
식 (L1-101)



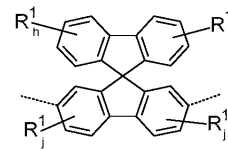
식 (L1-102)



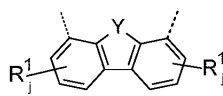
식 (L1-103)



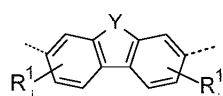
식 (L1-104)



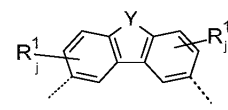
식 (L1-105)



식 (L1-106)



식 (L1-107)



식 (L1-108)

[0185]

[0186]

[0187]

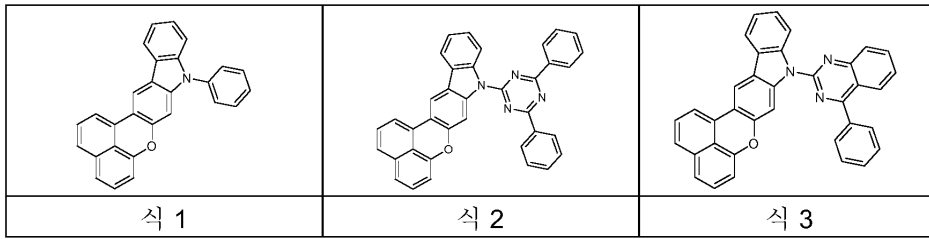
식 중, 각각의 경우에 점선의 결합은 부착 위치를 표시하고, 인덱스 k는 0 또는 1이고, 인덱스 l은 0, 1 또는 2 이고, 각 경우의 인덱스 j는 독립적으로 0, 1, 2 또는 3이고; 각 경우의 인덱스 h는 독립적으로 0, 1, 2, 3 또는 4이고, 인덱스 g는 0, 1, 2, 3, 4 또는 5이고; 기호 Y는 0, S 또는 NR¹, 바람직하게는 0 또는 S이고; 그리고

기호 R^1 은 특허 식 (I) 에 대해 위에 주어진 정의를 갖는다.

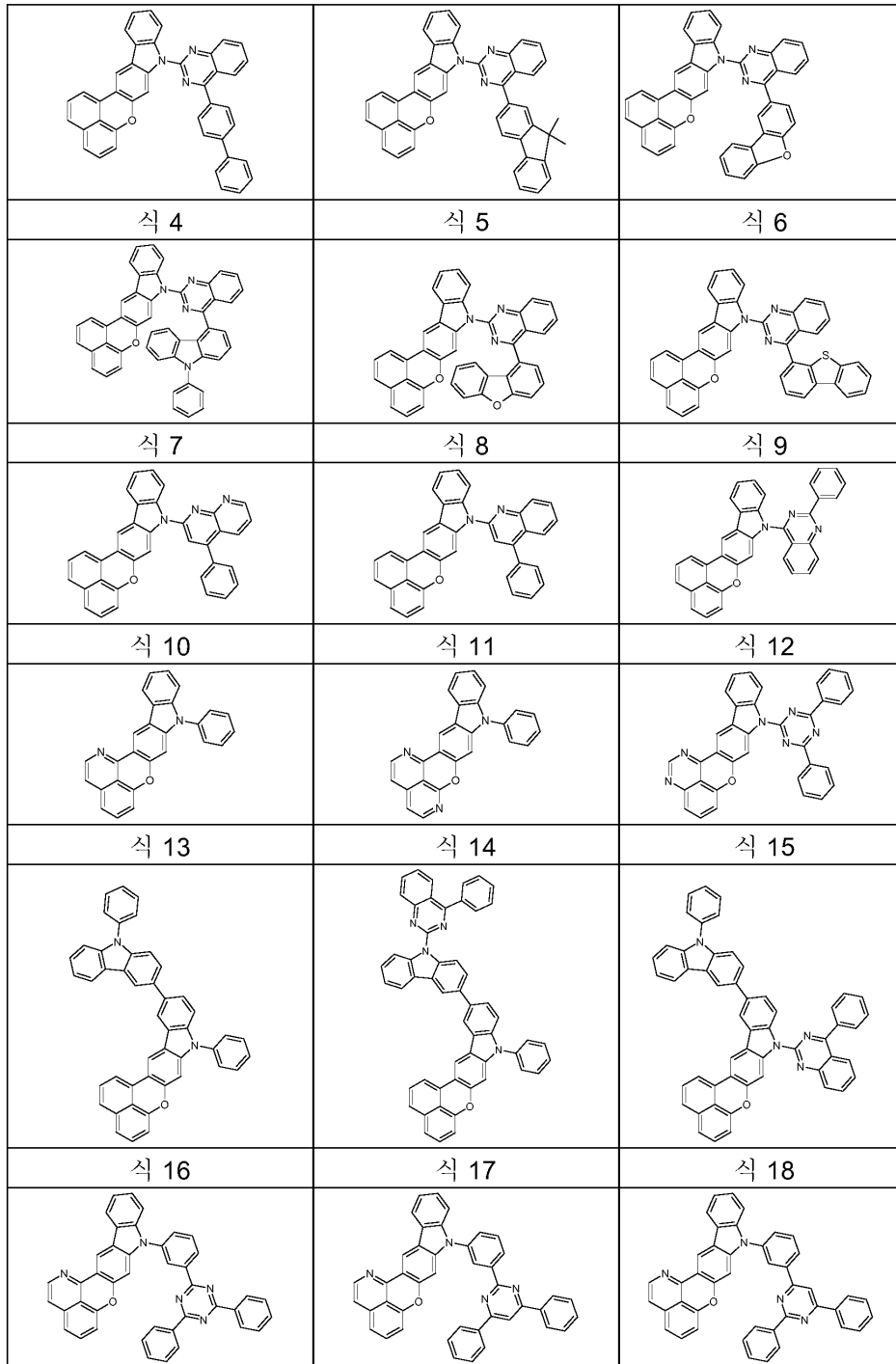
- [0188] 바람직하게는 식 (L¹-1) 내지 (L¹-108) 의 구조에서 인덱스 k, l, g, h 및 j 의 총합은 각각의 경우에 최대 3, 바람직하게는 최대 2, 그리고 보다 바람직하게는 최대 1 인 경우가 있을 수도 있다.
- [0189] 식 (H-1) 내지 (H-26) 의 기를 갖는 본 발명의 바람직한 화합물은, 식 (L¹-1) 내지 (L¹-78) 및/또는 (L¹-92) 내지 (L¹-108) 중, 바람직하게는 식 (L¹-1) 내지 (L¹-54) 및/또는 (L¹-92) 내지 (L¹-108) 중, 특히 바람직하게는 식 (L¹-1) 내지 (L¹-29) 및/또는 (L¹-92) 내지 (L¹-103) 중 하나로부터 선택된 Ar² 기를 포함한다. 유리하게는, 식 (L¹-1) 내지 (L¹-78) 및/또는 (L¹-92) 내지 (L¹-108) 의, 바람직하게는 식 (L¹-1) 내지 (L¹-54) 및/또는 (L¹-92) 내지 (L¹-108) 의, 특히 바람직하게는 식 (L¹-1) 내지 (L¹-29) 및/또는 (L¹-92) 내지 (L¹-103) 의 구조에서 인덱스 k, l, g, h 및 j 의 총합은 각각의 경우에 3 이하, 바람직하게는 2 이하, 그리고 보다 바람직하게는 1 이하일 수도 있다.
- [0190] 식 (QL) 의 기를 갖는 본 발명의 바람직한 화합물은, 결합을 나타내거나 또는 식 (L¹-1) 내지 (L¹-78) 및/또는 (L¹-92) 내지 (L¹-108) 중, 바람직하게는 식 (L¹-1) 내지 (L¹-54) 및/또는 (L¹-92) 내지 (L¹-108) 중, 특히 바람직하게는 식 (L¹-1) 내지 (L¹-29) 및/또는 (L¹-92) 내지 (L¹-103) 중 하나로부터 선택된 L¹ 기를 포함한다. 유리하게는, 식 (L¹-1) 내지 (L¹-78) 및/또는 (L¹-92) 내지 (L¹-108) 의, 바람직하게는 식 (L¹-1) 내지 (L¹-54) 및/또는 (L¹-92) 내지 (L¹-108) 의, 특히 바람직하게는 식 (L¹-1) 내지 (L¹-29) 및/또는 (L¹-92) 내지 (L¹-103) 의 구조에서 인덱스 k, l, g, h 및 j 의 총합은 각각의 경우에 3 이하, 바람직하게는 2 이하, 그리고 보다 바람직하게는 1 이하일 수도 있다.
- [0191] 바람직하게는, 식 (L¹-1) 내지 (L¹-108) 에서의 R² 라디칼은, R² 라디칼이 결합되는 아릴 기 또는 헤테로아릴 기의 고리 원자와, 융합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성하지 않으며, 바람직하게는 임의의 융합된 고리 시스템을 형성하지 않는다. 이것은 R² 라디칼에 결합될 수도 있는 가능한 R³ 치환기와의 융합된 고리 시스템의 형성을 포함한다.
- [0192] 본 발명의 화합물이 방향족 또는 헤테로방향족 R¹ 또는 R² 기로 치환될 때, 이들이 서로 직접 융합된 2 개 초과 의 방향족 6-원 고리를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴 기를 갖지 않는 경우가 바람직하다. 더욱 바람직하게는, 치환기들은 서로 직접 융합된 6원 고리를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴 기를 전혀 갖지 않는다. 이것이 바람직한 이유는, 그러한 구조의 낮은 삼중항 에너지 때문이다. 서로 직접 융합된 2 개보다 많은 방향족 6원 고리를 갖지만 그럼에도 불구하고 또한 본 발명에 따라 적합한 융합된 아릴 기들은 페난트렌 및 트리페닐렌인데, 이들은 또한 높은 삼중항 준위를 갖기 때문이다.
- [0193] 본 발명의 또 다른 바람직한 실시 형태에서, 예를 들어, 식 (I) 의 구조 및 이 구조 또는 이들 식들이 언급되는 구조들의 바람직한 실시형태에서의 R² 는 각 경우 동일 또는 상이하며, H, D, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 1, 2, 3, 또는 4개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드록시카르빌 라디칼, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자, 바람직하게는 5 내지 24개의 방향족 고리 원자들, 보다 바람직하게는 5 내지 13개의 방향족 고리 원자들을 갖고, 1 내지 4 개의 탄소 원자를 각각 갖는 하나 이상의 알킬 기로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않는, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어지는 군으로부터 선택된다.
- [0194] 바람직하게는, R² 라디칼은, R² 라디칼이 결합되는 아릴 기 또는 헤테로아릴 기의 고리 원자와, 융합된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성하지 않으며, 바람직하게는 임의의 융합된 고리 시스템을 형성하지 않는다. 이것은 R² 라디칼에 결합될 수도 있는 가능한 R³ 치환기와의 융합된 고리 시스템의 형성을 포함한다.
- [0195] 본 발명의 추가의 바람직한 실시 형태에서, 예를 들어, 식 (I) 의 구조 및 이 구조 또는 이들 식들이 언급되는 구조들의 바람직한 실시형태에서의 R³ 는 각 경우 동일 또는 상이하며, H, D, F, CN, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는, 바람직하게는 1, 2, 3, 또는 4개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드록시카르빌 라디칼, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자, 바람직하게는 5 내지 24개의 방향족 고리 원자들, 보다 바람직하게는 5 내지 13개의 방향족 고리 원자들을 갖고, 1 내지 4 개의 탄소 원자를 각각 갖는 하나 이상의 알킬 기로 치환될 수도 있지만, 바

람직하게는 치환되지 않는, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어지는 군으로부터 선택된다.

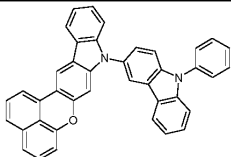
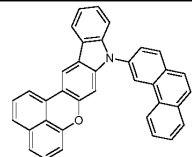
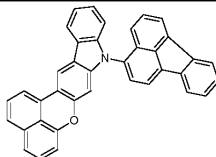
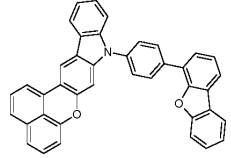
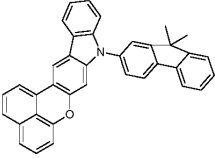
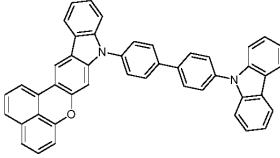
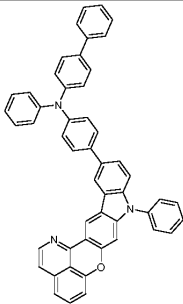
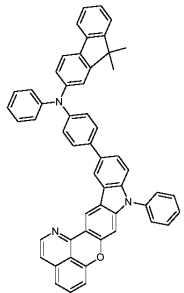
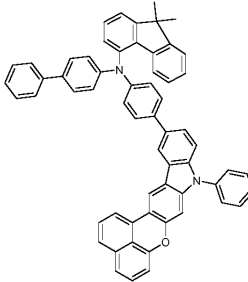
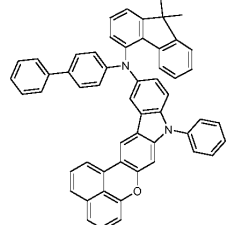
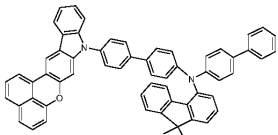
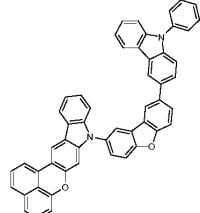
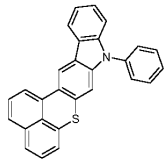
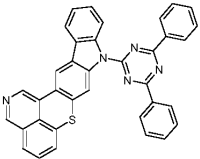
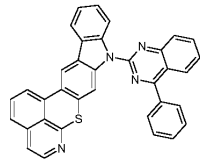
[0196] 본 발명의 적합한 화합물의 예는 아래에 나타낸 하기 식 1 내지 153 의 구조들이다:



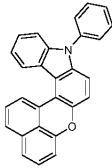
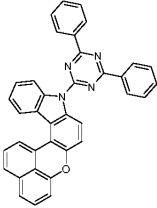
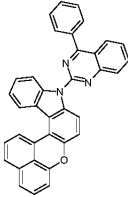
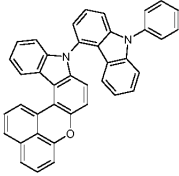
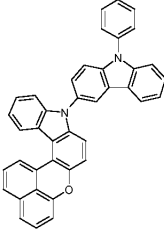
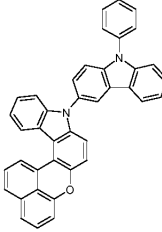
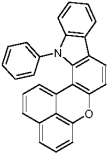
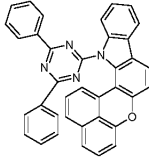
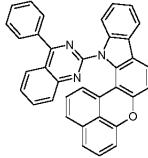
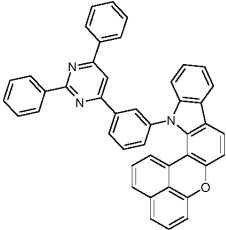
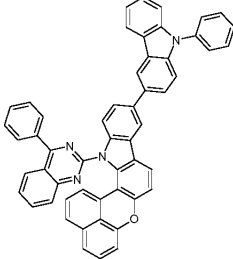
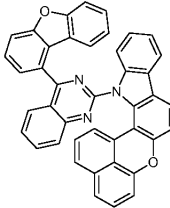
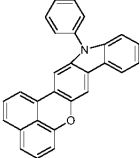
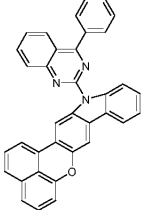
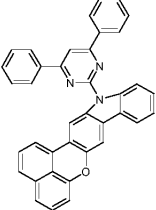
[0197]



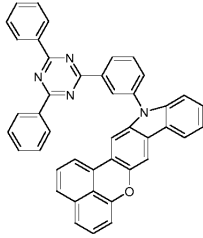
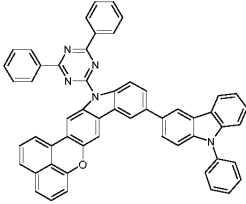
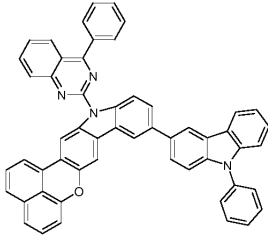
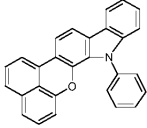
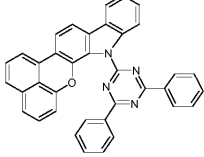
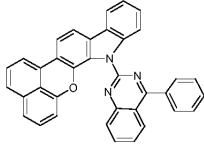
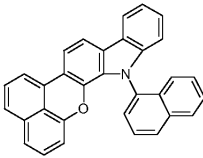
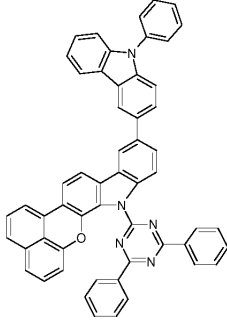
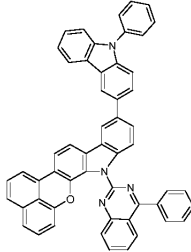
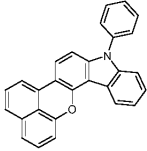
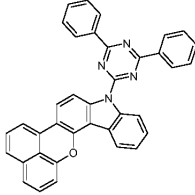
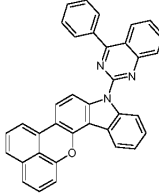
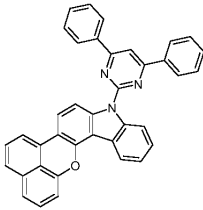
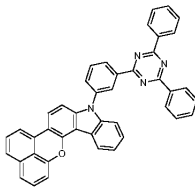
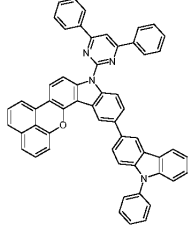
[0198]

식 19	식 20	식 21
		
식 22	식 23	식 24
		
식 25	식 26	식 27
		
식 28	식 29	식 30
		
식 31	식 32	식 33
		
식 34	식 35	식 36

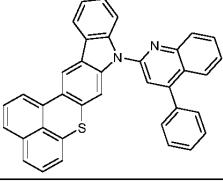
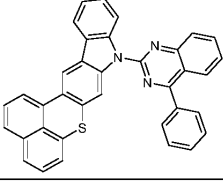
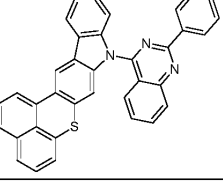
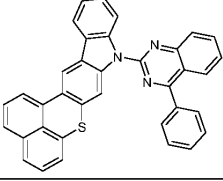
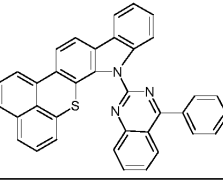
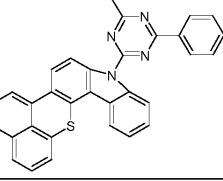
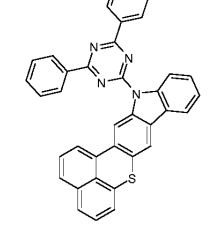
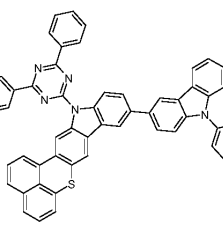
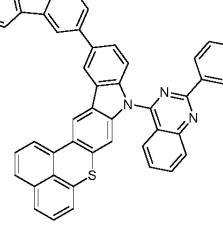
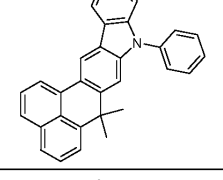
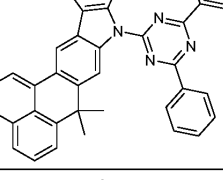
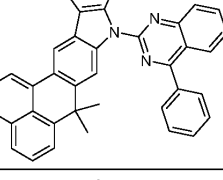
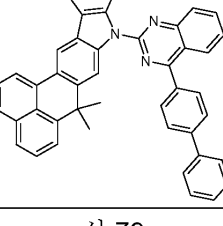
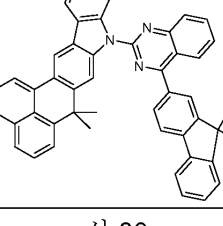
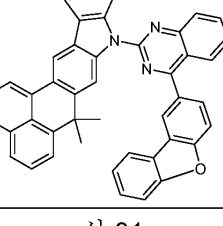
[0199]

		
식 37	식 38	식 39
		
식 40	식 41	식 42
		
식 43	식 44	식 45
		
식 46	식 47	식 48
		
식 49	식 50	식 51

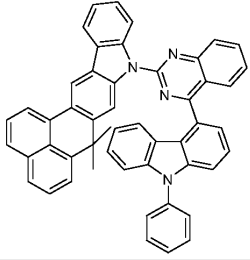
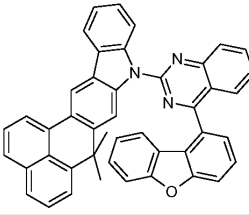
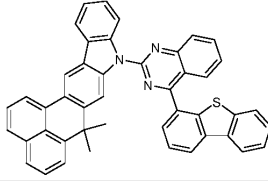
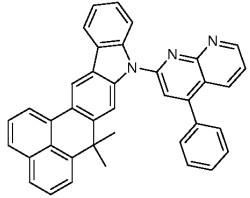
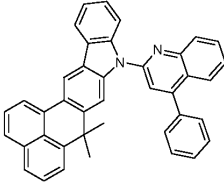
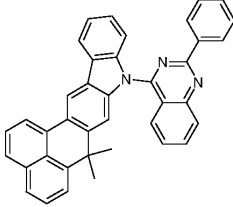
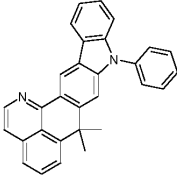
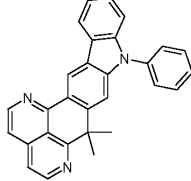
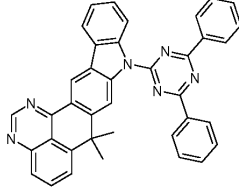
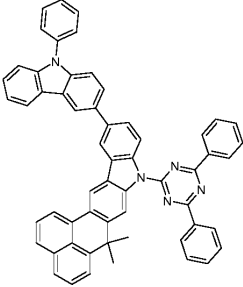
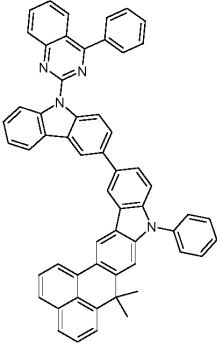
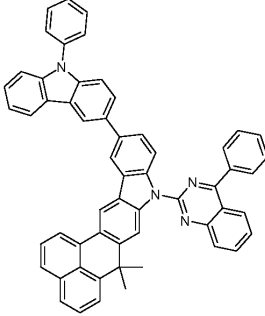
[0200]

		
식 52	식 53	식 54
		
식 55	식 56	식 57
		
식 58	식 59	식 60
		
식 61	식 62	식 63
		
식 64	식 65	식 66

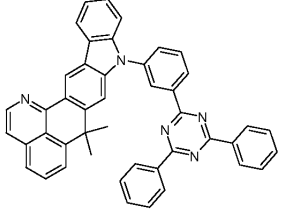
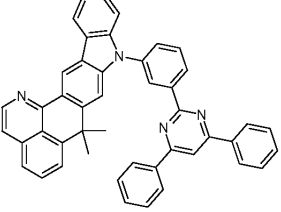
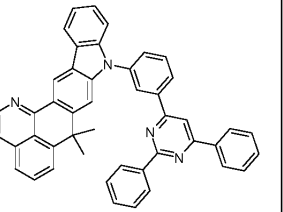
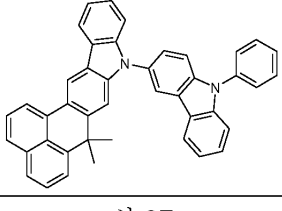
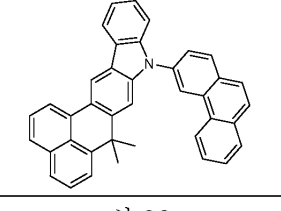
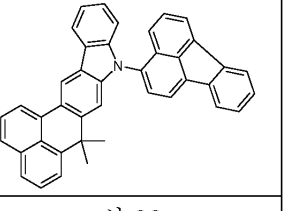
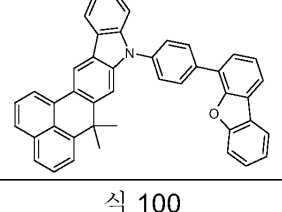
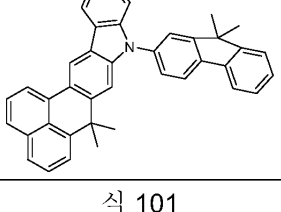
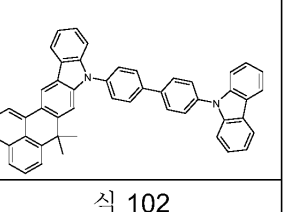
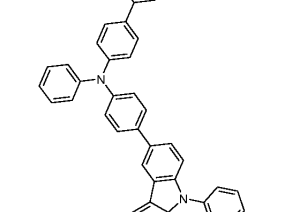
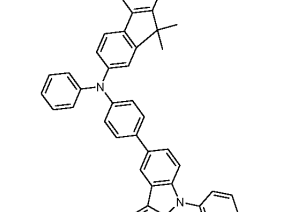
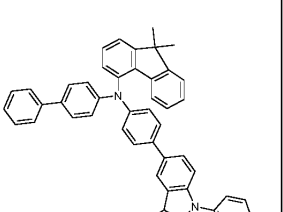
[0201]

		
식 67	식 68	식 69
		
식 70	식 71	식 72
		
식 73	식 74	식 75
		
식 76	식 77	식 78
		
식 79	식 80	식 81

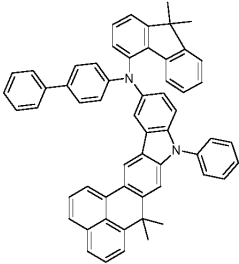
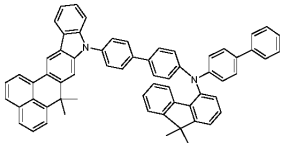
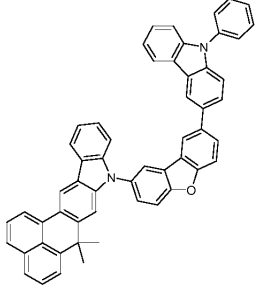
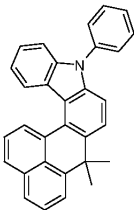
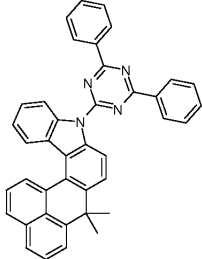
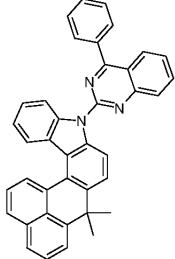
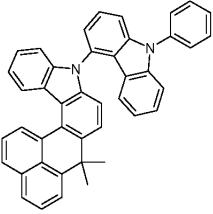
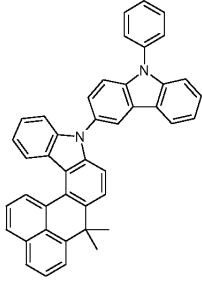
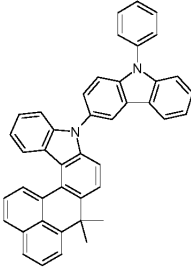
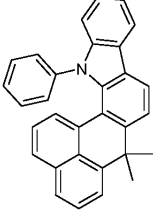
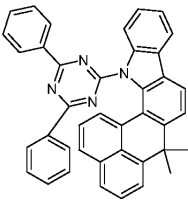
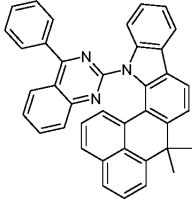
[0202]

		
식 82	식 83	식 84
		
식 85	식 86	식 87
		
식 88	식 89	식 90
		
식 91	식 92	식 93

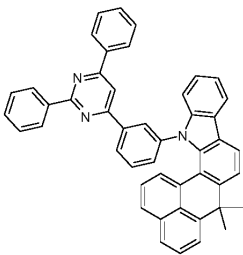
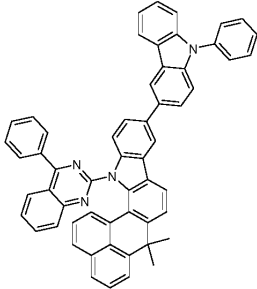
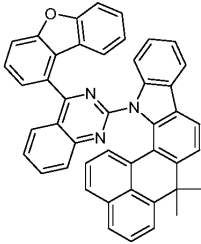
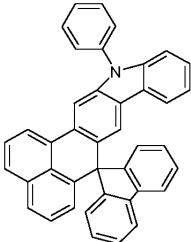
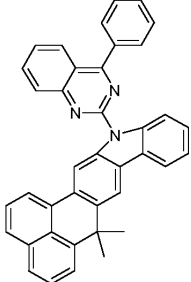
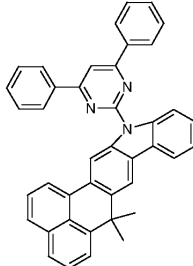
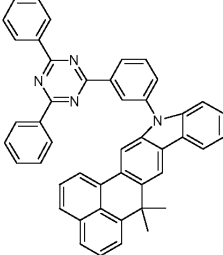
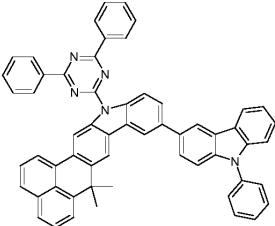
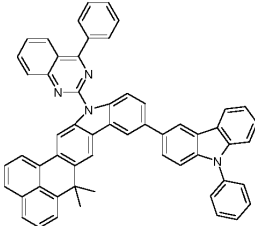
[0203]

		
식 94	식 95	식 96
		
식 97	식 98	식 99
		
식 100	식 101	식 102
		
식 103	식 104	식 105

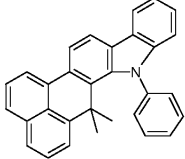
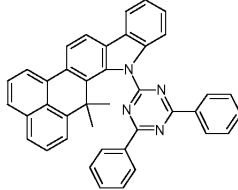
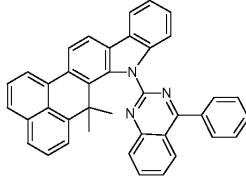
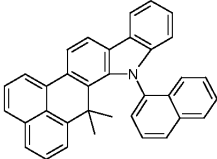
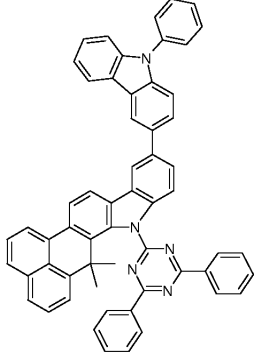
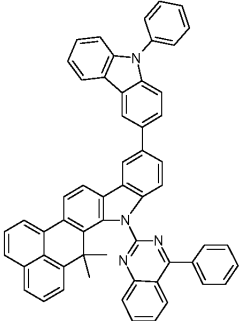
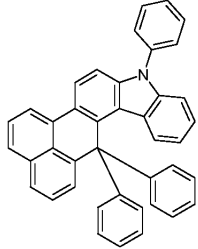
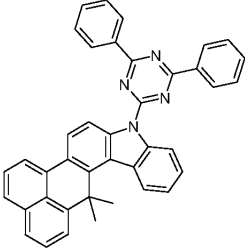
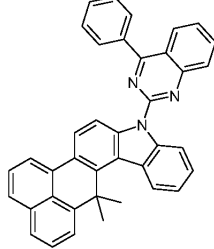
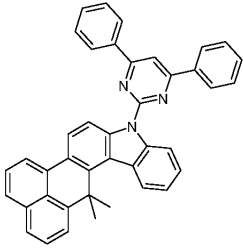
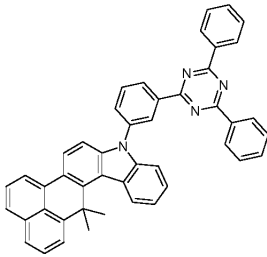
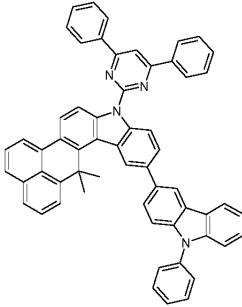
[0204]

		
<p>식 106</p>	<p>식 107</p>	<p>식 108</p>
		
<p>식 109</p>	<p>식 110</p>	<p>식 111</p>
		
<p>식 112</p>	<p>식 113</p>	<p>식 114</p>
		
<p>식 115</p>	<p>식 116</p>	<p>식 117</p>

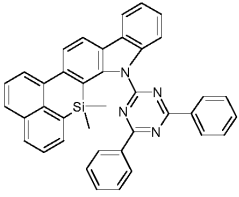
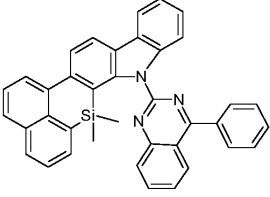
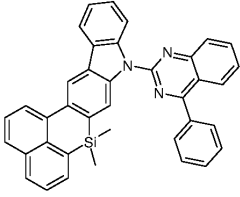
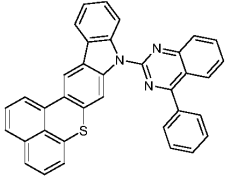
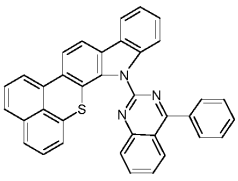
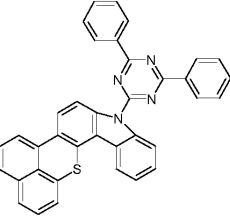
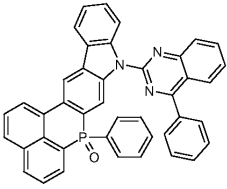
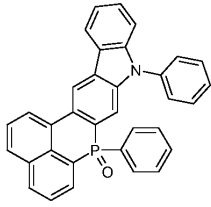
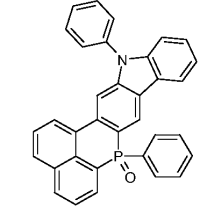
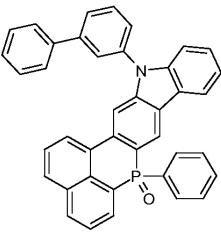
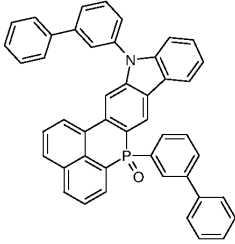
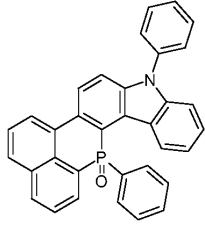
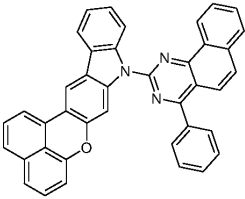
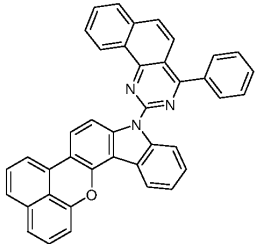
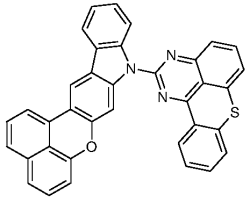
[0205]

		
<p>식 118</p>	<p>식 119</p>	<p>식 120</p>
		
<p>식 121</p>	<p>식 122</p>	<p>식 123</p>
		
<p>식 124</p>	<p>식 125</p>	<p>식 126</p>

[0206]

		
식 127	식 128	식 129
		
식 130	식 131	식 132
		
식 133	식 134	식 135
		
식 136	식 137	식 138

[0207]

		
식 139	식 140	식 141
		
식 142	식 143	식 144
		
식 145	식 146	식 147
		
식 148	식 149	식 150
		
식 151	식 152	식 153

- [0208] 본 발명의 화합물의 바람직한 실시형태는 실시예들에서 구체적으로 언급되어 있으며, 이들 화합물은 본 발명의 모든 목적을 위해 추가 화합물과 조합하여 또는 단독으로 사용될 수 있다.
- [0209] 청구항 1에 규정된 조건이 충족된다면, 위에서 언급된 바람직한 실시형태들은 원하는 대로 서로 조합될 수 있다. 본 발명의 특히 바람직한 실시 형태에서, 위에서 언급된 바람직한 실시형태들은 동시에 적용된다.
- [0210] 본 발명의 화합물은 원칙적으로 다양한 공정에 의해 제조할 수 있다. 그러나, 후술하는 프로세스들이 특히 적합하다는 것을 알아냈다.
- [0211] 따라서, 본 발명은 또한, 커플링 반응에서, 적어도 하나의 질소 함유 복소환기 기를 포함하는 화합물이 적어도 하나의 방향족 또는 헤테로방향족 기를 포함하는 기에 연결되는 식 (1)의 구조들을 포함하는 화합물을 제조하는 프로세스를 제공한다.
- [0212] 카르바졸 기를 갖는 적합한 화합물은 많은 경우 상업적으로 입수 가능하며, 실시예에 상세히 나타낸 출발 화합물은 공지된 프로세스들에 의해 수득될 수 있으므로, 이를 참조한다.

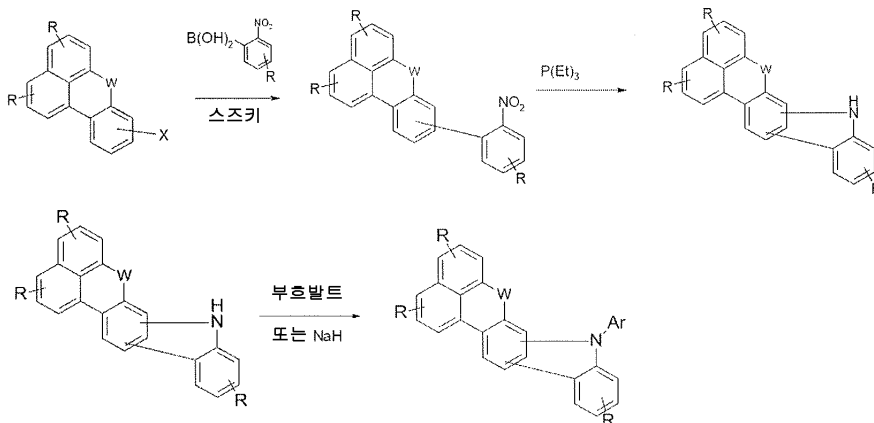
[0213] 이들 화합물은 공지된 커플링 반응에 의해 추가 아릴 화합물과 반응될 수 있고, 이 목적을 위한 필요한 조건은 당업자에게 알려져 있으며, 실시예에서의 상세한 명세는 이들 반응을 수행함에 있어서 당업자에게 뒷받침을 제공한다.

[0214] 모두 C-C 결합 형성 및/또는 C-N 결합 형성에 이르는 특히 적합하고 바람직한 커플링 반응은 BUCHWALD, SUZUKI, YAMAMOTO, STILLE, HECK, NEGISHI, SONOGASHIRA 및 HIYAMA 에 따른 것들이다. 이들 반응은 널리 알려져 있으며, 실시예들은 당업자에게 추가 조연들을 제공할 것이다.

[0215] 이하의 모든 합성 스킴에서, 화합물은 구조를 단순화하기 위해 소수의 치환기들로 도시되어 있다. 이것은 프로세스들에서 임의의 원하는 추가의 치환기의 존재를 배제하지 않는다.

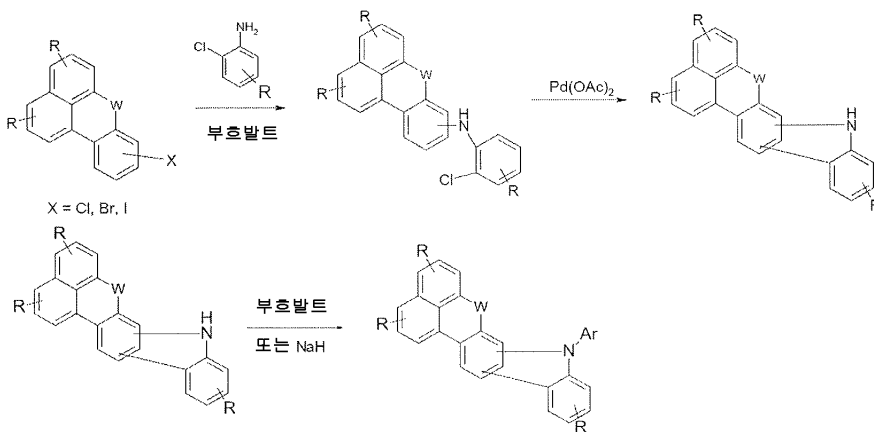
[0216] 예시적인 구현은 이들이 제한을 부과해야 한다는 어떠한 의도도 없이, 이하의 스킴들에 의해 주어진다. 개별 스킴들의 컴포넌트 단계는 원하는 대로 서로 조합될 수도 있다.

[0217] 스킴 1



[0218]

[0219] 스킴 2



[0220]

[0221] 스킴 1 및 2 에 사용된 기호의 정의는, 명확성을 이유로 넘버링을 생략하는, 식 (I) 에 대해 정의된 것들에 본질적으로 대응한다.

[0222] 본 발명의 화합물의 합성을 위해 보여진 프로세스들은 예로써 이해되어야 한다. 당업자는 당해 분야의 그의 통상 지식 범위 내에서 대안적인 합성 경로를 개발할 수 있을 것이다.

[0223] 위에서 자세히 나타낸 제조 프로세스들의 원리는 원칙적으로 유사한 화합물에 대한 문헌으로부터 알려져 있으며, 당업자에 의해 본 발명의 화합물의 제조에 용이하게 적용될 수 있다. 추가 정보는 실시예들에서 찾아볼 수 있다.

[0224] 이들 프로세스들 다음에, 필요하다면, 정제, 예를 들어 재결정화 또는 승화에 의해, 식 (I) 의 구조를 포함하는 본 발명의 화합물을 고 순도로, 바람직하게는 99% 초과 순도로 (¹H-NMR 및/또는 HPLC 로 측정 시) 수득할 수

있다.

[0225] 본 발명의 화합물은 또한, 적절한 치환기, 예를 들어 비교적 긴 알킬 기 (약 4 내지 20 개의 탄소 원자), 특히 분지형 알킬 기, 또는 선택적으로 치환된 아릴 기, 예컨대 크실릴, 메시틸 또는 분지형 테르페닐 또는 쿼터페닐 기를 가질 수도 있고, 이들은 화합물들이 실온에서 톨루엔 또는 크실렌에, 예를 들어 용액으로부터 화합물을 처리할 수 있기에 충분한 농도로 용해 가능하도록 하는, 표준 유기 용매에서의 용해도를 초래한다. 이러한 가용성 화합물은 예를 들어 인쇄 방법에 의해 용액으로부터 처리하기에 특히 양호하게 적합하다. 또한, 식 (I) 의 적어도 하나의 구조를 포함하는 본 발명의 화합물은 이미 이들 용매에서 향상된 용해도를 갖는다는 것이 강조되어야 한다.

[0226] 본 발명의 화합물은 또한 폴리머와 혼합될 수도 있다. 마찬가지로, 이들 화합물을 공유결합에 의해 폴리머에 포함시킬 수 있다. 이것은 특히 브롬, 요오드, 염소, 보론 산 또는 보론 에스테르와 같은 반응성 이탈기에 의해 또는 올레핀 또는 옥세탄과 같은 반응성 중합 가능 기에 의해 치환된 화합물로 가능하다. 이들은 대응하는 올리고머, 덴드리머 또는 폴리머의 제조용 모노머로서의 용도를 찾을 수도 있다. 올리고머화 또는 폴리머화는 바람직하게는 할로젠 작용기 또는 보론 산 작용기를 통해 또는 중합 가능한 기를 통해 수행된다. 이러한 종류의 기들을 통해 폴리머를 가교시키는 것이 또한 가능하다. 본 발명의 화합물 및 폴리머는 가교 또는 비가교 층의 형태로 사용될 수도 있다.

[0227] 따라서, 본 발명은 또한 본 발명의 화합물 또는 식 (I) 의 위에서 상세히 나타낸 구조들 중 하나 이상을 함유하는 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머를 제공하고, 여기서 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머에 대한 식 (I) 의 구조들의 또는 본 발명의 화합물의 하나 이상의 결합들이 있다. 따라서, 식 (I) 의 구조들의 또는 화합물들의 링크에 따라, 이들은 그러므로 올리고머 또는 폴리머의 측쇄를 형성하거나 또는 주쇄 내에 결합된다. 폴리머, 올리고머 또는 덴드리머는 공액, 부분적으로 공액 또는 비공액된다. 올리고머 또는 폴리머는 선형, 분지형 또는 수지상 (dendritic) 일 수도 있다. 올리고머, 덴드리머 및 폴리머에서의 본 발명의 화합물의 반복 단위에 대해, 동일한 선호들이 위에서 설명된 바와 같이 적용된다.

[0228] 올리고머 또는 폴리머의 제조를 위해, 본 발명의 모노머는 다른 모노머와 동종 중합 (homopolymerize) 또는 공중합 (copolymerize) 된다. 식 (I) 또는 위에서 그리고 이하에서 언급되는 바람직한 실시형태들의 단위들은 0.01 내지 99.9 mol%, 바람직하게는 5 내지 90 mol%, 보다 바람직하게는 20 내지 80 mol% 의 정도로 존재하는 코폴리머가 바람직하다. 폴리머 베이스 골격을 형성하는 적합하고 바람직한 코모노머는 플루오렌 (예를 들어, EP 842208 또는 WO 2000/022026 에 따름), 스피로바이플루오렌 (예를 들어, EP 707020, EP 894107 또는 WO 2006/061181 에 따름), 파라페닐렌 (예를 들어, WO 92/18552 에 따름), 카르바졸 (예를 들어, WO 2004/070772 또는 WO 2004/113468 에 따름), 티오펜 (예를 들어, EP 1028136 에 따름), 디히드로페난트렌 (예를 들어, WO 2005/014689 에 따름), 시스- 및 트랜스-인테노플루오렌 (예를 들어 WO 2004/041901 또는 WO 2004/113412 에 따름), 케톤 (예를 들어, WO 2005/040302 에 따름), 페난트렌 (예를 들어, WO 2005/104264 또는 WO 2007/017066 에 따름) 또는 그렇지 않으면 복수의 이들 단위로부터 선택된다. 폴리머, 올리고머 및 덴드리머는 여전히 추가 단위, 예를 들어 정공 수송 단위, 특히 트리아릴아민에 기초한 것들 및/또는 전자 수송 단위를 함유할 수도 있다.

[0229] 또한 높은 유리 전이 온도를 특징으로 하는 본 발명의 화합물이 특히 흥미롭다. 이와 관련하여, 유리 전이 온도가, DIN 51005 (2005-08 버전) 에 따라 결정되는, 적어도 70 °C, 더욱 바람직하게는 적어도 110 °C, 더욱 더 바람직하게는 적어도 125°C 이고 특히 바람직하게는 적어도 150°C 인 위에서 그리고 이하에서 언급되는, 일반식 (I) 또는 바람직한 실시형태들의 구조를 포함하는 본 발명의 화합물이 특히 바람직하다.

[0230] 예를 들어 스핀 코팅에 의해 또는 인쇄 방법에 의해, 액상으로부터 본 발명의 화합물을 처리하기 위해서는, 본 발명의 화합물의 제형 (formulation) 이 필요하다. 이들 제형은 예를 들어, 용액, 분산액 또는 현탁액일 수도 있다. 이러한 목적을 위해, 둘 이상의 용매의 혼합물을 이용하는 것이 바람직할 수도 있다. 적합하고 바람직한 용매는 예를 들어 톨루엔, 아니솔, o-, m- 또는 p-크실렌, 메틸 벤조에이트, 메시틸렌, 테트라린, 베라트롤, THF, 메틸-THF, THP, 클로로벤젠, 디옥산, 페녹시톨루엔, 특히 3- 페녹시톨루엔, (-)-벤존, 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, 아세토펜, α-테르피네올, 벤조티아졸, 부틸 벤조에이트, 큐멘, 시클로헥사놀, 시클로헥사논, 시클로헥실벤젠, 데칼린, 도데실벤젠, 에틸 벤조에이트, 인단, NMP, p-시멘, 페넨톨, 1,4-디이소프로필벤젠, 디벤질 에테르, 디에틸렌 글리콜 부틸 메틸 에테르, 트리에틸렌 글리콜 부틸 메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디부틸 에테르, 트리에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 디에틸렌

글리콜 모노부틸 에테르, 트리프로필렌 글리콜 디메틸 에테르, 테트라에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 2-이소프로필나프탈렌, 펜틸벤젠, 헥실벤젠, 헵틸벤젠, 옥틸벤젠, 1,1-비스(3,4-디메틸페닐)에탄, 헥사메틸인단, 2-메틸바이페닐, 3-메틸바이페닐, 1-메틸나프탈렌, 1-에틸나프탈렌, 에틸 옥타노에이트, 디에틸 세바케이트, 옥틸 옥타노에이트, 헵틸벤젠, 멘틸 이소발레레이트, 시클로헥실 헥사노에이트 또는 이들 용매의 혼합물이다.

[0231] 따라서 본 발명은 또한, 본 발명의 화합물 및 적어도 하나의 추가 화합물을 포함하는 제형을 제공한다. 추가 화합물은 예를 들어, 용매, 특히 위에 언급된 용매 중 하나 또는 이들 용매의 혼합물일 수도 있다. 추가 화합물은 다르게는, 전자 디바이스에서 마찬가지로 사용되는 적어도 하나의 추가 유기 또는 무기 화합물, 예를 들어, 방출 화합물, 예를 들어 형광 도펀트, 인광 도펀트 또는 TADF (thermally activated delayed fluorescence) 를 나타내는 화합물, 특히 인광 도펀트 및/또는 추가 매트릭스 재료일 수도 있다. 이 추가 화합물은 또한 중합성일 수도 있다.

[0232] 따라서 본 발명은 여전히 또한, 본 발명의 화합물 및 적어도 하나의 추가 유기 작용 재료를 포함하는 조성물을 제공한다. 작용 재료는 일반적으로 애노드와 캐소드 사이에 도입되는 유기 또는 무기 재료이다. 바람직하게는, 유기 작용 재료는 형광 방출체, 인광 방출체, TADF (thermally activated delayed fluorescence) 를 나타내는 방출체, 호스트 재료, 전자 수송 재료, 전자 주입 재료, 정공 도체 재료, 정공 주입 재료, 전자 차단 재료, 정공 차단 재료, 와이드 밴드 갭 재료, 및 n-도펀트로 이루어지는 군으로부터 선택된다.

[0233] 따라서, 본 발명은 또한 식 (I) 또는 위에서 그리고 이하에서 언급된 바람직한 실시형태들의 구조를 포함하는 적어도 하나의 화합물 및 적어도 하나의 추가 매트릭스 재료를 포함하는 조성물에 관한 것이다. 본 발명의 특정 양태에 따르면, 추가 매트릭스 재료는 정공 수송 특성을 갖는다.

[0234] 본 발명은 또한 식 (I), 또는 위에 그리고 이하에 기재된 바람직한 실시형태들의 적어도 하나의 구조를 포함하는 적어도 하나의 화합물, 및 적어도 하나의 와이드 밴드갭 재료를 포함하는 조성물을 제공하며, 여기서 와이드 밴드갭 재료는 US 7,294,849 의 개시의 의미에서의 재료를 의미하는 것으로 이해된다. 이들 시스템들은 전계발광 디바이스들에서 특출한 유리한 성능 데이터를 나타낸다.

[0235] 바람직하게는, 추가 화합물은 2.5eV 이상, 바람직하게는 3.0eV 이상, 매우 바람직하게는 3.5eV 이상의 밴드 갭을 가질 수도 있다. 밴드 갭을 계산하는 한 가지 방법은 최고 점유 분자 궤도 (HOMO) 와 최저 비점유 분자 궤도 (LUMO) 의 에너지 준위를 통한다.

[0236] 분자 궤도, 특히 또한 재료의 최고 점유 분자 궤도 (HOMO) 및 최저 비점유 분자 궤도 (LUMO), 이의 에너지 준위, 및 최저 삼중항 상태 T_1 및 최저 여기 단일항 상태 S_1 의 에너지는, 양자 화학적 계산을 통해 결정된다.

금속이 없는 유기 물질의 계산을 위하여, 먼저, "바닥 상태/준 경험식/디폴트 스핀/AM1/전하 0/스핀 단일항" 방법에 의해 지오메트리 (geometry) 의 최적화가 수행된다. 이어서, 최적화된 지오메트리에 기초하여 에너지 계산이 수행된다. 이것은 "6-31G(d)" 베이스 세트 (전하 0, 스핀 단일항) 와 함께 "TD-SCF/DFT/디폴트 스핀/B3PW91" 방법을 이용하여 행해진다. 금속 함유 화합물들의 경우, 지오메트리는 "바닥 상태/하트리-포크/디폴트 스핀//LanL2MB/전하 0/스핀 단일항" 방법을 통해 최적화된다. 에너지 계산은, "LanL2DZ" 베이스 세트가 금속 원자를 위해 사용되고 "6-31G(d)" 베이스 세트가 리간드들을 위해 사용되는 것을 제외하고는, 상술된 유기 물질을 위한 방법과 유사하게 수행된다. HOMO 에너지 준위 HEh 또는 LUMO 에너지 준위 LEh 는 Hartree 단위에서의 에너지 계산으로부터 얻어진다. 이것은 다음과 같이 순환 전압 전류 측정 (cyclic voltammetry measurement) 에 의해 교정된 전자 볼트 단위의 HOMO 및 LUMO 에너지 준위를 결정하는데 사용된다:

[0237]
$$HOMO(eV) = ((HEh * 27.212) - 0.9899) / 1.1206$$

[0238]
$$LUMO(eV) = ((LEh * 27.212) - 2.0041) / 1.385$$

[0239] 이 값들은 본원의 맥락에서 재료의 HOMO 및 LUMO 에너지 준위로 간주될 것이다.

[0240] 최저 삼중항 상태 T_1 은, 설명된 양자 화학적 계산으로부터 분명한, 최저 에너지를 갖는 삼중항 상태의 에너지로서 정의된다.

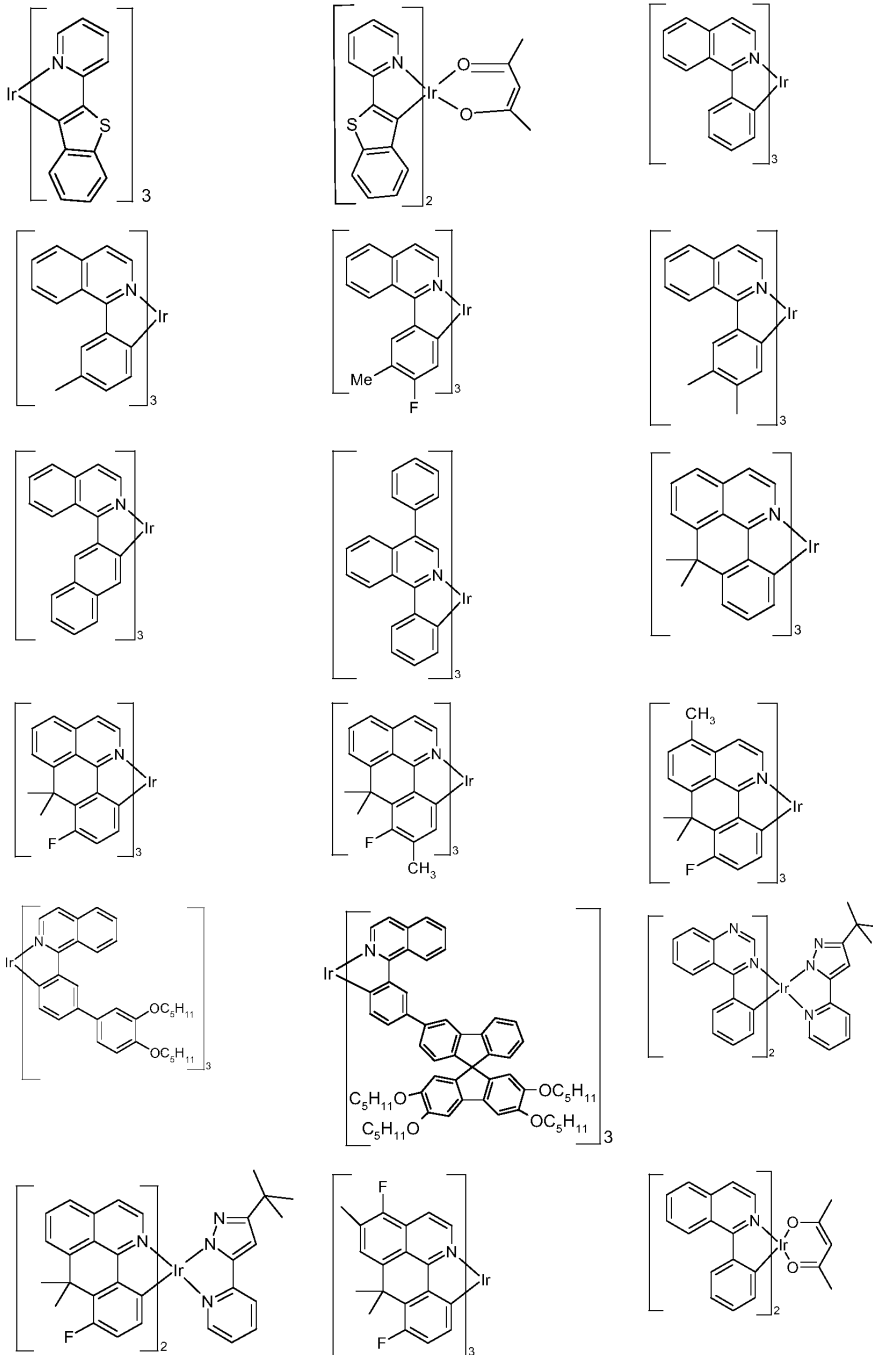
[0241] 최저 여기 단일항 상태 S_1 은, 설명된 양자 화학적 계산으로부터 분명한, 최저 에너지를 갖는 여기 단일항 상태의 에너지로서 정의된다.

[0242] 여기서 설명된 방법은 사용된 소프트웨어 패키지와는 무관하며 항상 동일한 결과를 제공한다. 이러한 목적

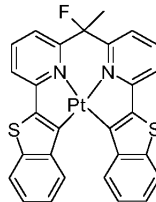
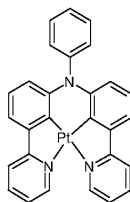
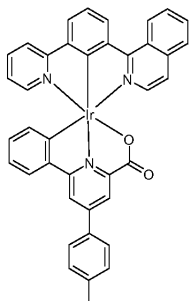
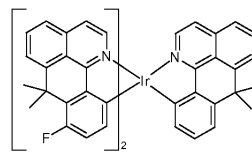
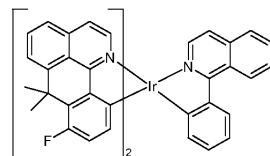
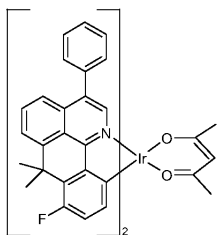
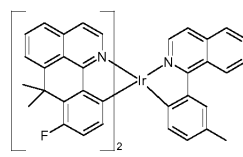
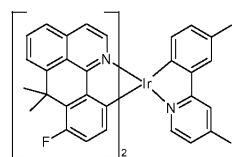
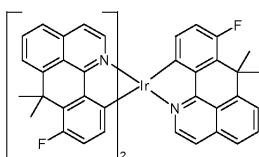
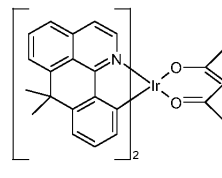
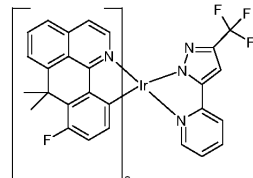
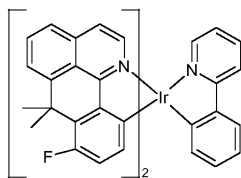
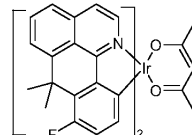
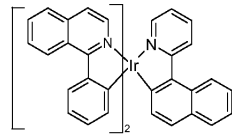
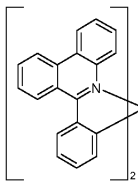
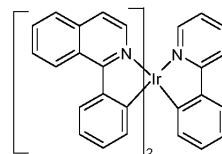
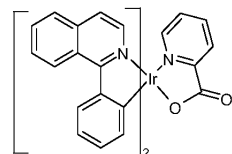
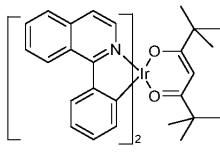
으로 자주 사용되는 프로그램의 예는 "Gaussian09W"(Gaussian Inc.) 및 Q-Chem 4.1 (Q-Chem, Inc.) 이다.

- [0243] 본 발명은 또한 식 (I) 또는 위에서 그리고 아래에서 언급된 바람직한 실시형태들의 구조를 포함하는 적어도 하나의 화합물 및 적어도 하나의 인광 방출체를 포함하는 조성물에 관한 것이며, "인광 방출체"라는 용어는 또한 인광 도펀트를 의미하는 것으로 이해된다.
- [0244] 매트릭스 재료 및 도펀트를 포함하는 시스템에서 도펀트는 혼합물에서의 비율이 더 작은 성분을 의미하는 것으로 이해된다. 대응하여, 매트릭스 재료 및 도펀트를 포함하는 시스템에서 매트릭스 재료는 혼합물에서의 비율이 더 큰 성분을 의미하는 것으로 이해된다.
- [0245] 매트릭스 시스템, 바람직하게는 혼합 매트릭스 시스템에 사용하기에 바람직한 인광 도펀트는 이하에 명시된 바람직한 인광 도펀트이다.
- [0246] "인광 도펀트" 라는 용어는 통상적으로, 스핀 금지 천이, 예를 들어, 여기된 삼중항 상태 또는 더 높은 스핀 양자 수를 갖는 상태, 예를 들어 오중항 (quintet) 상태로부터의 천이를 통해 광의 방출이 이루어지는 화합물들을 포함한다.
- [0247] 적합한 인광 화합물들 (= 삼중항 방출체들) 은 특히, 적합하게 여기서, 바람직하게 가시 영역에서 발광하고, 그리고 또한 원자 번호가 20 초과이고, 바람직하게 38 초과 84 미만이고, 보다 바람직하게 56 초과 80 미만인 적어도 하나의 원자, 특히 이 원자 번호를 갖는 금속을 포함하는 화합물들이다. 사용되는 바람직한 인광 방출체들은 구리, 몰리브덴, 텅스텐, 레늄, 루테튬, 오스뮴, 로듐, 이리듐, 팔라듐, 백금, 은, 금 또는 유로퓸을 함유하는 화합물들, 특히 이리듐 또는 백금을 함유하는 화합물들이다. 본 발명의 맥락에서, 위에 언급된 금속들을 함유하는 모든 발광성 화합물들은 인광 화합물로 간주된다.
- [0248] 위에 기재된 방출체들의 예들은 출원 WO 00/70655, WO 2001/41512, WO 2002/02714, WO 2002/15645, EP 1191613, EP 1191612, EP 1191614, WO 05/033244, WO 05/019373, US 2005/0258742, WO 2009/146770, WO 2010/015307, WO 2010/031485, WO 2010/054731, WO 2010/054728, WO 2010/086089, WO 2010/099852, WO 2010/102709, WO 2011/032626, WO 2011/066898, WO 2011/157339, WO 2012/007086, WO 2014/008982, WO 2014/023377, WO 2014/094961, WO 2014/094960, WO 2015/036074, WO 2015/104045, WO 2015/117718, WO 2016/015815, WO 2016/124304, WO 2017/032439 및 아직 공개되지 않았던 출원 EP16179378.1 및 EP16186313.9 에서 찾아볼 수 있다. 일반적으로, 종래 기술에 따라 인광 OLED 들에 사용된 바와 같은 그리고 유기 전계발광의 분야의 당업자에게 알려진 바와 같은 모든 인광 착물들이 적합하고, 당업자는 진보적 기술을 발휘하지 않고, 추가의 인광 착물들을 사용가능할 것이다.

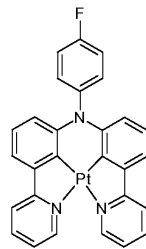
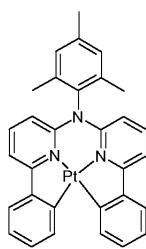
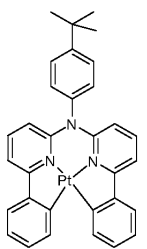
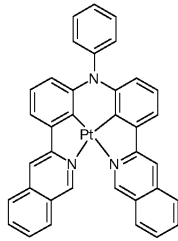
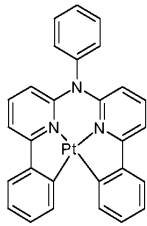
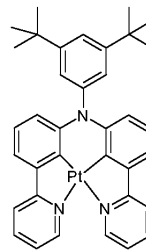
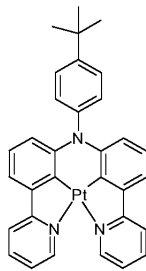
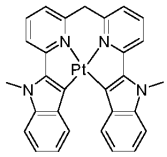
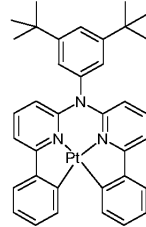
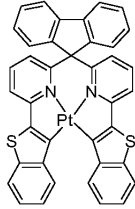
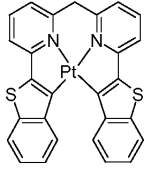
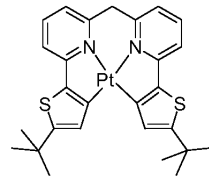
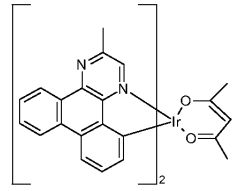
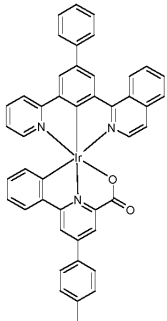
[0249] 인광 도펀트의 명시적 예들은 다음 표에 제시되어 있다:



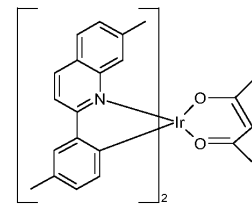
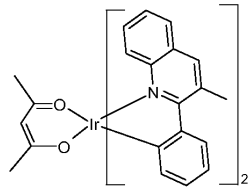
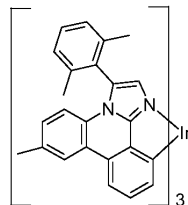
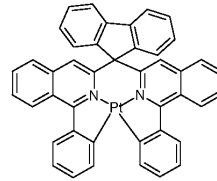
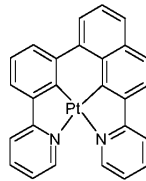
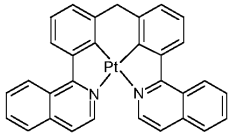
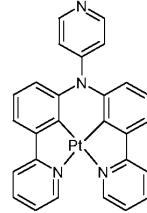
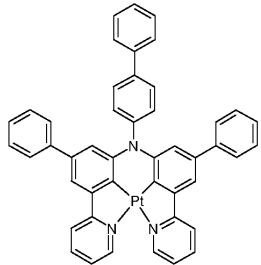
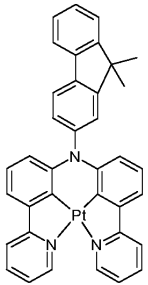
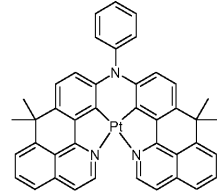
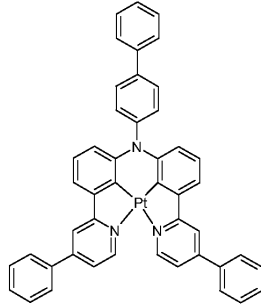
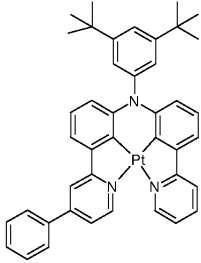
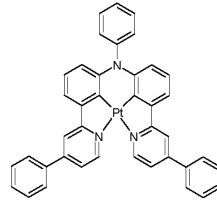
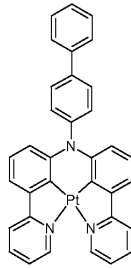
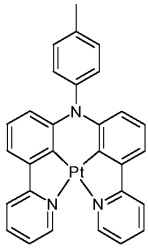
[0250]



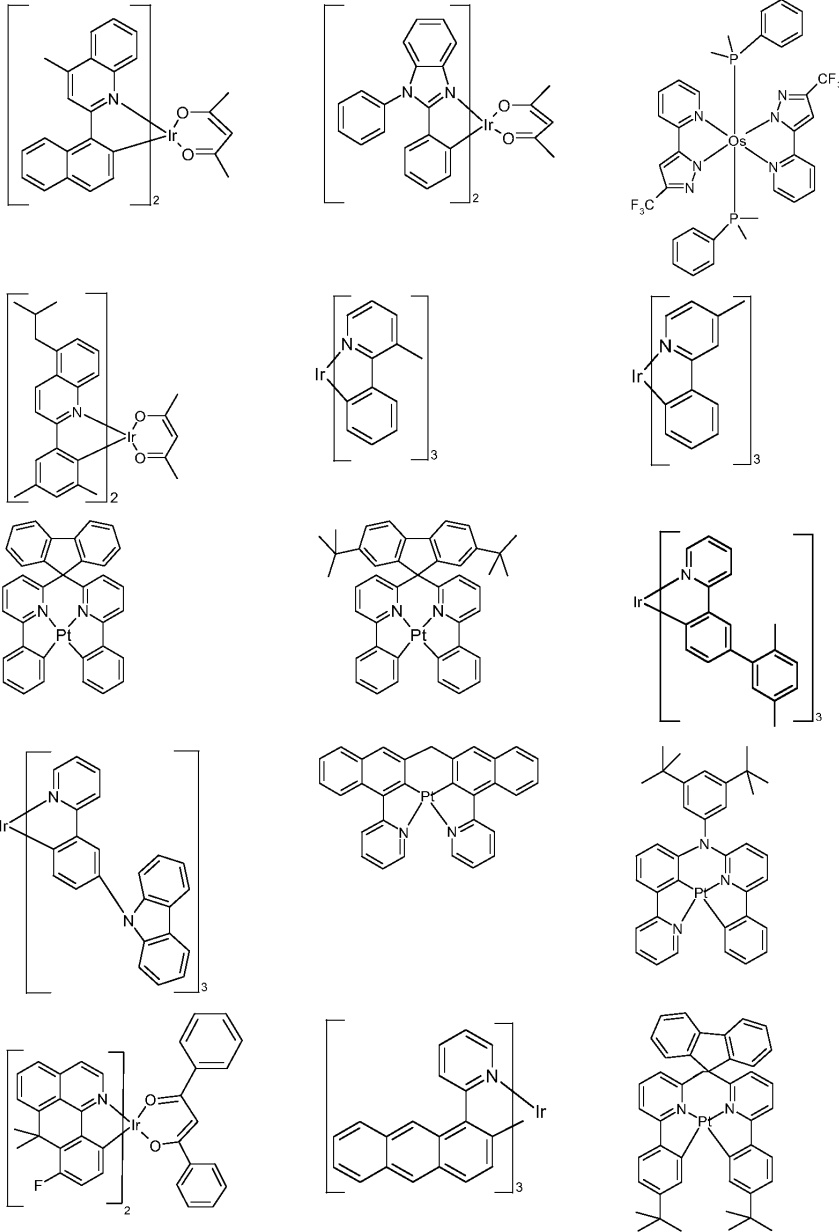
[0251]



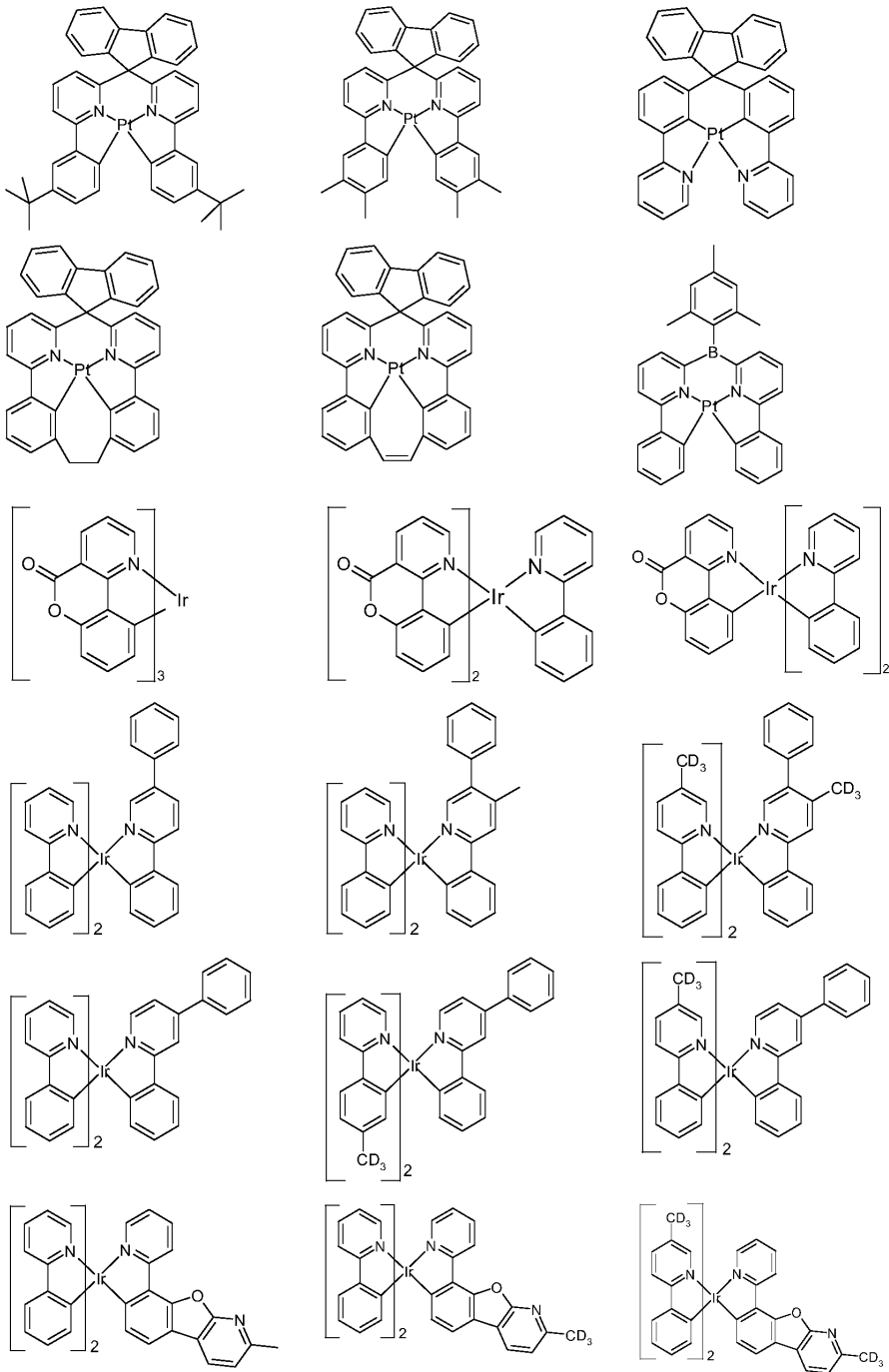
[0252]



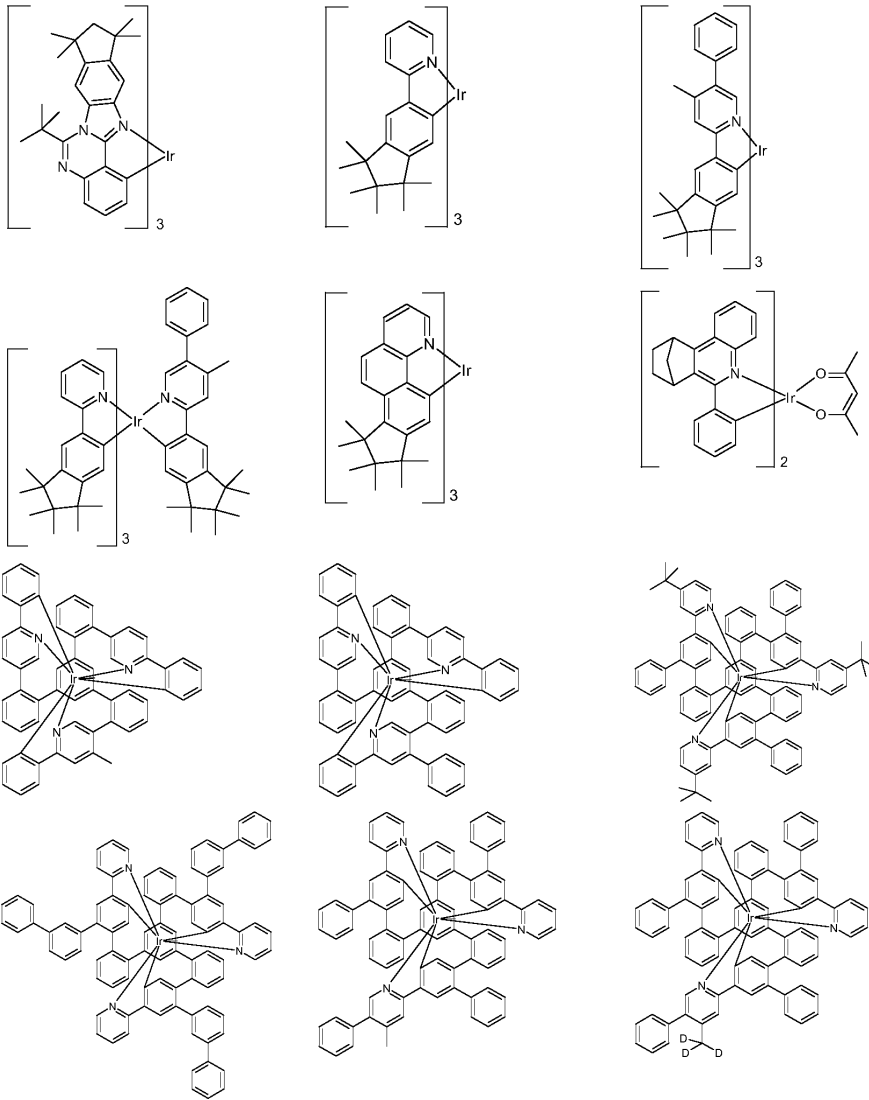
[0253]



[0254]



[0255]



[0256]

[0257]

식 (I) 또는 위에서 상세히 나타낸 바람직한 실시 형태들의 구조를 포함하는 위에 기재된 화합물은 바람직하게는 전자 디바이스에서 활성 성분으로서 사용될 수 있다. 전자 디바이스는 애노드, 캐소드 및 애노드와 캐소드 사이의 적어도 하나의 층을 포함하는 임의의 디바이스를 의미하는 것으로 이해되며, 상기 층은 적어도 하나의 유기 또는 유기금속 화합물을 포함한다. 따라서, 본 발명의 전자 디바이스는 애노드, 캐소드, 및 식 (I)의 구조를 포함하는 적어도 하나의 화합물을 함유하는 적어도 하나의 개재 층을 포함한다. 여기서 바람직한 전자 디바이스는, 적어도 하나의 층에 식 (I)의 구조들을 포함하는 적어도 하나의 화합물을 함유하는, 유기 전계발광 디바이스 (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 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 필드 케치 디바이스 (O-FQD), 유기 전기 센서, 발광 전기 화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 유기 플라즈몬 방출 디바이스 (D. M. Koller 등의, *Nature Photonics* 2008, 1-4), 바람직하게는 유기 전계발광 디바이스 (OLED, PLED), 특히 인광 OLED로 이루어지는 균으로부터 선택된다. 유기 전계발광 디바이스가 특히 바람직하다. 활성 성분은 일반적으로 애노드와 캐소드 사이에 도입되는 유기 또는 무기 재료, 예를 들어 전하 주입, 전하 수송 또는 전하 차단 재료이지만, 특히 방출 재료 및 매트릭스 재료이다.

[0258]

본 발명의 바람직한 실시형태는 유기 전계발광 디바이스이다. 유기 전계발광 디바이스는 캐소드, 애노드 및 적어도 하나의 방출 층을 포함한다. 이들 층 이외에, 그것은 여전히 추가 층, 예를 들어 각각의 경우에 하나 이상의 정공 주입 층, 정공 수송층, 정공 차단 층, 전자 수송 층, 전자 주입 층, 엑시톤 차단 층, 전자 차단 층, 전하 생성 층 및/또는 유기 또는 무기 p/n 접합을 포함할 수도 있다. 동시에, 하나 이상의 정공 수송층이, 예를 들어 금속 옥사이드, 예컨대 MoO₃ 또는 WO₃로 또는 (피)플루오르화 전자-결핍 방향족 시스템으로 p-도핑되거나 및/또는 하나 이상의 전자 수송 층이 n-도핑되는 것이 가능하다. 마찬가지로, 중간층

(interlayer) 이 2 개의 방출 층 사이에 도입될 수 있는데, 이들은 예를 들어 엑시톤 차단 기능을 갖거나 및/또는 전계발광 디바이스에서 전하 밸런스를 조절한다. 그러나, 이러한 층들의 모든 것이 반드시 존재할 필요는 없다는 것이 지적되어야 한다.

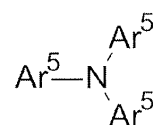
[0259] 이 경우, 유기 전계발광 디바이스는 방출 층을 포함하거나, 또는 복수의 방출 층들을 포함할 수 있다. 복수의 방출 층들이 존재하는 경우, 이들은, 전체 결과가 백색 방출이 되도록 전체적으로 380 nm와 750 nm 사이의 여러 방출 최대치들을 갖는 것이 바람직하며; 환언하면, 형광 또는 인광을 일으킬 수도 있는 다양한 방출 화합물들이 방출 층들에 사용된다. 3 개의 층들이 청색, 녹색 및 오렌지색 또는 적색 방출 (기본 구성에 대해서는, 예를 들어, WO 2005/011013 참조) 을 나타내는 3-층 시스템, 또는 3개 보다 많은 방출 층들을 갖는 시스템들이 특히 바람직하다. 또한 탠덤 OLED 가 역시 바람직하다. 시스템은 또한, 하나 이상의 층들이 형광을 일으키고 하나 이상의 다른 층들이 인광을 일으키는 혼성 시스템일 수도 있다.

[0260] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, 유기 전계발광 디바이스는, 하나 이상의 방출 층들에서, 바람직하게는 추가 매트릭스 재료, 바람직하게는 정공 전도 매트릭스 재료와 조합하여, 매트릭스 재료로서, 바람직하게 전자 전도 매트릭스 재료로서, 식 (I) 또는 위에서 상세히 나타낸 바람직한 실시형태들의 구조들을 포함하는 본 발명의 화합물을 함유한다. 본 발명의 추가의 바람직한 실시형태에서, 추가의 매트릭스 재료는 층 내의 정공 및 전자 수송 화합물이다. 또 다른 추가의 바람직한 실시 형태에서, 추가의 매트릭스 재료는 층 내의 정공 및 전자 수송에서, 있다하더라도, 현저한 정도로 관여하지 않는 큰 밴드 갭을 갖는 화합물이다. 방출 층은 적어도 하나의 방출 화합물을 포함한다.

[0261] 식 (I) 의 화합물들과 조합하여 또는 바람직한 실시형태들에 따라 사용될 수 있는 적합한 매트릭스 재료들은, 방향족 케톤, 방향족 포스핀 산화물 또는 방향족 설폭사이드 또는 설폰 (예를 들어, WO 2004/013080, WO 2004/093207, WO 2006/005627 또는 WO 2010/006680 에 따름), 트리아릴아민, 특히 모노아민 (예를 들어, WO 2014/015935 에 따름), 카르바졸 유도체, 예를 들어 CBP (N,N-비스카르바졸릴바이페닐) 또는 카르바졸 유도체 (WO 2005/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527, 또는 WO 2008/086851 에 개시된 것), 인돌로카르바졸 유도체 (예를 들어 WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따름), 인데노카르바졸 유도체 (예를 들어 WO 2010/136109 및 WO 2011/000455 에 따름), 아자카르바졸 유도체 (예를 들어 EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160 에 따름), 양극성 매트릭스 재료 (예를 들어 WO 2007/137725 에 따름), 실란 (예를 들어 WO 2005/111172 에 따름), 아자보롤 또는 보론 에스테르 (예를 들어 WO 2006/117052 에 따름), 트리아진 유도체 (예를 들어 WO 2010/015306, WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따름), 아연 착물 (예를 들어 EP 652273 또는 WO 2009/062578 에 따름), 디아자실롤 또는 테트라아자실롤 유도체 (예를 들어 WO 2010/054729 에 따름), 디아자포스폴 유도체 (예를 들어 WO 2010/054730 에 따름), 브릿지된 카르바졸 유도체 (예를 들어 US 2009/0136779, WO 2010/050778, WO 2011/042107, WO 2011/088877 또는 WO 2012/ 143080 에 따름), 트리페닐 유도체 (예를 들어, WO 2012/048781에 따름), 락탐 (예를 들어, WO 2011/116865, WO 2011/137951 또는 WO 2013/064206 에 따름), 4-스피로카르바졸 유도체 (예를 들어, WO 2014/094963 또는 WO 2015/192939 에 따름), 또는 디벤조푸란 유도체 (예를 들어, WO 2015/169412, WO 2016/015810, WO 2016/023608, WO 2017/148564 또는 WO 2017/148565 에 따름) 이다. 마찬가지로, 실제 방출체보다 더 짧은 파장에서 방출하는 추가 인광 방출체가 혼합물에서 코-호스트 (co-host) 로서 존재하는 것이 가능하다.

[0262] 바람직한 코-호스트 재료는 트리아릴아민 유도체, 특히 모노아민, 인데노카르바졸 유도체, 4-스피로카르바졸 유도체, 락탐 및 카르바졸 유도체이다.

[0263] 본 발명의 화합물과 함께 코-호스트 재료로서 사용되는 바람직한 트리아릴아민 유도체는 하기 식 (TA-1) 의 화합물로부터 선택된다:



식 (TA-1)

[0264] 식 중 Ar² 은 각각의 경우 동일 또는 상이하며 6 내지 40 개의 탄소 원자를 갖고 각각의 경우에 하나 이상의 R² 라디칼들로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이며, 2개 이상의 인접한 R² 치환기들은 선

택적으로, 하나 이상의 R^3 라디칼로 치환될 수도 있는 단환 또는 다환 지방족 고리 시스템을 형성할 수도 있고, 여기서 기호 R^2 는, 특히 식 (I) 에 대해, 위에 정의된 바와 같다. 바람직하게는, Ar^5 는 각각의 경우 동일 또는 상이하며 5 내지 24 개, 바람직하게는 5 내지 12 개의 방향족 고리 원자를 가지며 각각의 경우 하나 이상의 R^2 라디칼로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않는, 아릴 또는 헤테로아릴 기이다.

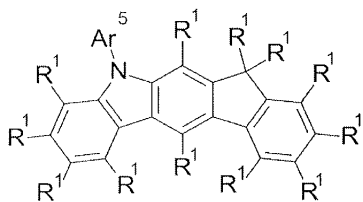
[0266] 적합한 Ar^5 기의 예는 페닐, 오르토-, 메타- 또는 파라-바이페닐, 테르페닐, 특히 분지형 테르페닐, 쿼터페닐, 특히 분지형 쿼터페닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-플루오레닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-스피로바이플루오레닐, 피리딜, 피리미디닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-디벤조푸라닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-디벤조티에닐 및 1-, 2-, 3- 또는 4-카르바졸릴 (이들의 각각은 하나 이상의 R^2 라디칼로 치환될 수 있지만 바람직하게는 치환되어 않음) 로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0267] 바람직하게는, Ar^5 기는 각각의 경우 동일 또는 상이하고, 상기 언급된 R^1-1 내지 R^1-92 기, 보다 바람직하게는 R^1-1 내지 R^1-54 로부터 선택된다.

[0268] 식 (TA-1) 의 화합물의 바람직한 실시형태에서, 적어도 하나의 Ar^5 기는 오르토-, 메타- 또는 파라-바이페닐 기 일 수도 있는 바이페닐 기로부터 선택된다. 식 (TA-1) 의 화합물의 추가의 바람직한 실시형태에서, 적어도 하나의 Ar^5 기는 플루오렌 기 또는 스피로바이플루오렌 기로부터 선택되고, 여기서 이러한 기는 각각 1, 2, 3 또는 4 위치에서 질소 원자에 결합될 수도 있다. 식 (TA-1) 의 화합물의 다른 추가 바람직한 실시형태에서, 적어도 하나의 Ar^5 기는 페닐렌 또는 바이페닐 기로부터 선택되고, 여기서 그 기는 오르토-, 메타- 또는 파라-결합 기이며, 디벤조푸란 기, 디벤조티오펜 기 또는 카르바졸 기, 특히 디벤조푸란 기로 치환되고, 여기서 디벤조푸란 또는 디벤조티오펜 기는 1, 2, 3 또는 4 위치를 통해 페닐렌 또는 바이페닐 기에 결합되고, 여기서 카르바졸 기는 1, 2, 3 또는 4 위치 또는 질소 원자를 통해 페닐렌 또는 바이페닐 기에 결합된다.

[0269] 식 (TA-1) 의 화합물의 특히 바람직한 실시형태에서, 하나의 Ar^5 기는 플루오렌 또는 스피로바이플루오렌 기, 특히 4-플루오렌 또는 4-스피로바이플루오렌 기로부터 선택되고, 하나의 Ar^5 기는 바이페닐 기, 특히 파라-바이페닐 기, 또는 플루오렌 기, 특히 2-플루오렌 기로부터 선택되고, 제 3 Ar^5 기는 파라-페닐렌 기 또는 파라-바이페닐 기로부터 선택되며, 디벤조푸란 기, 특히 4-디벤조푸란 기, 또는 카르바졸 기, 특히 N-카르바졸 기 또는 3-카르바졸 기로 치환된다.

[0270] 본 발명의 화합물과 함께 코-호스트 재료로서 사용되는 바람직한 인데노카르바졸 유도체는 하기 식 (TA-2) 의 화합물로부터 선택된다:

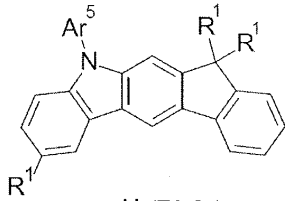


식 (TA-2)

[0271]

[0272] 식 중, Ar^5 및 R^1 은 특히 식 (I) 및/또는 (TA-1) 에 대해 위에 열거된 정의를 갖는다. Ar^5 기의 바람직한 실시형태는 위에 열거된 구조 R^1-1 내지 R^1-92 , 보다 바람직하게는 R^1-1 내지 R^1-54 이다.

[0273] 식 (TA-2) 의 화합물들의 바람직한 실시형태는 하기 식 (TA-2a) 의 화합물이다:

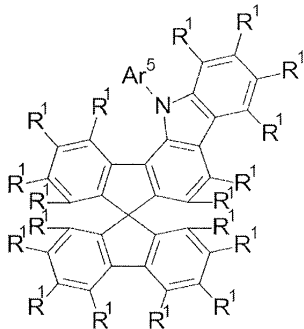


식 (TA-2a)

[0274]

[0275] 식 중, Ar⁵ 및 R¹ 은 특히 식 (I) 및/또는 (TA-1) 에 대해 위에 열거된 정의를 갖는다. 본원에서, 인데노 탄소 원자에 결합된 2 개의 R¹ 기는 바람직하게는 동일 또는 상이하고, 1 내지 4 개의 탄소 원자들을 갖는 알킬 기, 특히 메틸 기, 또는 6 내지 12 개의 탄소 원자들을 갖는 방향족 고리 시스템, 특히 페닐 기이다. 보다 바람직하게는, 인데노 탄소 원자에 결합된 2 개의 R¹ 기는 메틸 기이다. 추가로 바람직하게는, 식 (TA-2a) 의 인데노카르바졸 베이스 골격에 결합된 R¹ 치환기는 H 또는 1, 2, 3 또는 4 위치를 통해 또는 질소 원자를 통해, 특히 3 위치를 통해 인데노카르바졸 베이스 골격에 결합될 수도 있는 카르바졸 기이다.

[0276] 본 발명의 화합물과 함께 코-호스트 재료로서 사용되는 바람직한 4-스피로카르바졸 유도체는 하기 식 (TA-3) 의 화합물로부터 선택된다:

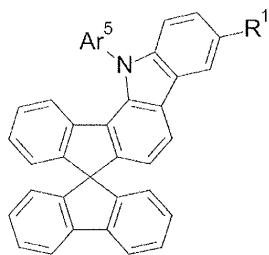


식 (TA-3)

[0277]

[0278] 식 중, Ar⁵ 및 R¹ 은 특히 식 (I) 및/또는 (TA-1) 에 대해 위에 열거된 정의를 갖는다. Ar⁵ 기의 바람직한 실시형태는 위에 열거된 구조 R¹-1 내지 R¹-92, 보다 바람직하게는 R¹-1 내지 R¹-54 이다.

[0279] 식 (TA-3) 의 화합물들의 바람직한 실시형태는 하기 식 (TA-3a) 의 화합물이다:

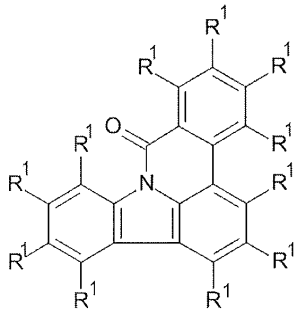


식 (TA-3a)

[0280]

[0281] 식 중, Ar⁵ 및 R¹ 은 특히 식 (I) 및/또는 (TA-1) 에 대해 위에 열거된 정의를 갖는다. Ar⁵ 기의 바람직한 실시형태는 위에 열거된 구조 R¹-1 내지 R¹-92, 보다 바람직하게는 R¹-1 내지 R¹-54 이다.

[0282] 본 발명의 화합물과 함께 코-호스트 재료로서 사용되는 바람직한 락탐은 하기 식 (LAC-1) 의 화합물로부터 선택 된다:



식 (LAC-1)

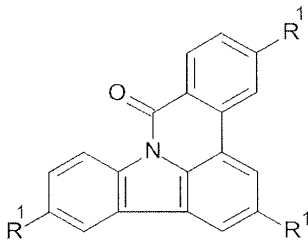
[0283]

[0284]

[0285]

식 중 R¹ 은 특히 식 (I) 에 대해 위에 열거된 정의를 갖는다.

식 (LAC-1) 의 화합물들의 바람직한 실시형태는 하기 식 (LAC-1a) 의 화합물이다:



식 (LAC-1a)

[0286]

[0287]

식 중 R¹ 은 특히 식 (I) 에 대해 위에 주어진 정의를 갖는다. 식 중 R¹ 은 바람직하게는 각각의 경우 동일 또는 상이하고, H 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R² 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 여기서 R² 는 특히 식 (I) 에 대해 위에 주어진 정의를 가질 수도 있다. 가장 바람직하게는, R¹ 치환기들은 H, 및 6 내지 18 개 방향족 고리 원자, 바람직하게는 6 내지 13 개의 방향족 고리 원자를 가지며 각각의 경우 하나 이상의 비방향족 R² 라디칼로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않는, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어지는 군으로부터 선택된다. 적합한 R¹ 치환기의 예는 페닐, 오르토-, 메타- 또는 파라-바이페닐, 테르페닐, 특히 분지형 테르페닐, 쿼터페닐, 특히 분지형 쿼터페닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-플루오레닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-스피로바이플루오레닐, 피리디닐, 피리미디닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-디벤조푸라닐, 1-, 2-, 3- 또는 4-디벤조티에닐 및 1-, 2-, 3- 또는 4-카르바졸릴 (이들 각각은 하나 이상의 R² 라디칼로 치환될 수도 있지만, 바람직하게는 치환되지 않음) 로 이루어진 군으로부터 선택된다. 여기서 적합한 R¹ 구조는 R-1 내지 R-79, 보다 바람직하게는 R¹-1 내지 R¹-51 에 대해 위에 도시된 것과 동일한 구조이다.

[0288]

[0289]

[0290]

복수의 상이한 매트릭스 재료를 혼합물로서, 특히 적어도 하나의 전자 전도 매트릭스 재료 및 적어도 하나의 정공 전도 매트릭스 재료를 사용하는 것이 또한 바람직할 수도 있다. 마찬가지로, 예를 들어 WO 2010/108579 에 기재된 바와 같이, 있다손치더라도, 전하 수송에 유의하게 관여하지 않는 전기적으로 비활성인 매트릭스 재료 및 전하 수송 매트릭스 재료의 혼합물을 사용하는 것이 바람직하다.

매트릭스와 함께 2개 이상의 삼중항 방출체들의 혼합물을 사용하는 것이 더욱 바람직하다. 이 경우, 보다 단파 방출 스펙트럼을 갖는 삼중항 방출체는 보다 장파 방출 스펙트럼을 갖는 삼중항 방출체에 대한 코-매트릭스 (co-matrix) 의 역할을 한다.

보다 바람직하게는, 바람직한 실시형태에서, 유기 전자 디바이스, 특히 유기 전계발광 디바이스에서, 예를 들어, OLED 또는 OLEC 에서의 방출 층에서 매트릭스 재료로서, 식 (I) 의 구조를 포함하는 본 발명의 화합물을 사용하는 것이 가능하다. 이 경우, 식 (I) 또는 위에서 그리고 이하에서 언급되는 바람직한 실시형태들의 구조를 포함하는 매트릭스 재료 함유 화합물은 하나 이상의 도펀트, 바람직하게는 인광 도펀트와 조합하여 전자

디바이스에 존재한다.

- [0291] 이 경우 방출층에서의 매트릭스 재료의 비율은 형광 방출층들에 대해서는 50.0 부피% 내지 99.9 부피%, 바람직하게 80.0 부피% 내지 99.5 부피% 이고, 보다 바람직하게 92.0 부피% 내지 99.5 부피% 이고, 인광 방출층들에 대해서는 85.0 부피% 내지 97.0 부피% 이다.
- [0292] 대응하여, 도펀트의 비율은 형광 방출 층들에 대해서는 0.1부피% 내지 50.0부피%, 바람직하게는 0.5부피% 내지 20.0부피% 그리고 보다 바람직하게는 0.5부피% 내지 8.0부피% 이고, 인광 방출 층들에 대해서는 3.0부피% 내지 15.0부피% 이다.
- [0293] 유기 전계발광 디바이스의 방출 층은 또한, 복수의 매트릭스 재료들 (혼합 매트릭스 시스템들) 및/또는 복수의 도펀트들을 포함하는 시스템들을 포함할 수도 있다. 이 경우에도, 도펀트는 일반적으로 시스템에서 보다 작은 비율을 갖는 그러한 재료이고, 매트릭스 재료는 시스템에서 보다 큰 비율을 갖는 그러한 재료이다. 하지만, 개개의 경우들에서, 시스템에서의 단일 매트릭스 재료의 비율은 단일 도펀트의 비율보다 더 적을 수도 있다.
- [0294] 본 발명의 추가 바람직한 실시형태에서, 식 (I) 또는 위에서 그리고 이하에서 언급되는 바람직한 실시형태들의 구조들을 포함하는 화합물은 혼합 매트릭스 시스템들의 성분으로서 사용된다. 혼합 매트릭스 시스템들은 바람직하게 2개 또는 3개의 상이한 매트릭스 재료들, 보다 바람직하게 2개의 상이한 매트릭스 재료들을 포함한다. 이 경우, 2 개의 재료들 중 하나는 정공 수송 특성을 갖는 재료이고, 다른 재료는 전자 수송 특성을 갖는 재료인 것이 바람직하다. 하지만, 혼합된 매트릭스 성분들의 원하는 전자 수송 및 정공 수송 특성들은 또한 단일 혼합 매트릭스 성분들에서 주로 또는 완전히 조합될 수도 있고, 그 경우에 추가 혼합 매트릭스 성분(들)은 다른 기능들을 이행한다. 2개의 상이한 매트릭스 재료들은 1:50 내지 1:1, 바람직하게는 1:20 내지 1:1, 보다 바람직하게는 1:10 내지 1:1 그리고 가장 바람직하게는 1:4 내지 1:1 의 비로 존재할 수도 있다. 인광 유기 전계발광 디바이스에서 혼합 매트릭스 시스템들을 사용하는 것이 바람직하다. 혼합 매트릭스 시스템에 관한 보다 상세한 정보의 한가지 소스는 출원 WO 2010/108579 이다.
- [0295] 본 발명은 또한, 전자 전도성 화합물로서, 하나 이상의 전자 전도 층에서 본 발명의 하나 이상의 화합물 및/또는 본 발명의 적어도 하나의 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머를 포함하는 전자 디바이스, 바람직하게는 유기 전계발광 디바이스를 제공한다.
- [0296] 바람직한 캐소드는 일 함수가 낮은 금속들, 금속 합금들 또는 다층 구조들로서, 다양한 금속들, 예를 들어, 알칼리 토금속들, 알칼리 금속들, 주족 금속들 또는 란타노이드들 (예를 들어, Ca, Ba, Mg, Al, In, Mg, Yb, Sm 등) 으로 구성되는 것이다. 또한, 알칼리 금속 또는 알칼리 토 금속 및 은으로 구성된 합금, 예를 들어, 마그네슘 및 은으로 구성된 합금이 적합하다. 다층 구조의 경우에, 언급된 금속 이외에, 상대적으로 높은 일 함수의 추가 금속, 예를 들어 Ag를 사용할 수도 있는데, 이 경우에 예를 들어, Mg/Ag, Ca/Ag 또는 Ba/Ag 와 같은 금속들의 조합이 일반적으로 사용된다. 또한 금속성 캐소드와 유기 반도체 사이에 높은 유전 상수를 갖는 재료의 얇은 중간층을 도입하는 것이 바람직할 수 있다. 이러한 목적을 위해 유용한 재료의 예는 알칼리 금속 또는 알칼리 토금속 플루오라이드 뿐만 아니라, 또한 대응하는 옥사이드 또는 카보네이트 (예를 들어, LiF, Li₂O, BaF₂, MgO, NaF, CsF, Cs₂CO₃ 등) 이다. 유기 알칼리 금속 착물, 예를 들어 Liq (리튬 퀴놀리네이트) 가 이러한 목적에 마찬가지로 유용하다. 이 층의 층 두께는 바람직하게는 0.5 과 5 nm 사이이다.
- [0297] 바람직한 애노드는 높은 일함수를 갖는 재료들이다. 바람직하게는, 애노드는 진공에 대해 4.5 eV 보다 더 큰 일 함수를 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 응용들에 대해, 유기 재료 (OSC) 의 조사 (irradiation) 또는 광의 방출 (OLED/PLED, O-레이저) 중 어느 일방을 가능하게 하기 위하여 전극들 중 적어도 하나는 투명하거나 또는 부분적으로 투명해야 한다. 바람직한 애노드 재료들은 여기서 전도성 혼합 금속 산화물이다. ITO (indium tin oxide) 또는 IZO (indium zinc oxide) 가 특히 바람직하다. 또한, 전도성 도핑된 유기 재료, 특히 전도성 도핑된 폴리머, 예를 들어 PEDOT, PANI 또는 이들 폴리머들의 유도체가 바람직하다. p-도핑된 정공 수송 재료가 정공 주입층으로서 애노드에 적용되는 경우가 또한 바람직하는데, 이러한 경우 적합한 p-도펀트는 금속 산화물, 예를 들어 MoO₃ 또는 WO₃, 또는 (퍼)플루오르화 전자-결핍 방향족 시스템이다. 추가로 적합한 p-도펀트는 HAT-CN (헥사시아노헥사아자트리페닐렌) 또는 화합물 NPD9 (Novaled사제) 이다. 이러한 층은 낮은 HOMO (즉, 규모 면에서 큰 HOMO) 를 갖는 재료 내로의 정공 주입을 간단하게 한다.

- [0298] 추가 층들에서, 일반적으로 그 층들에 대해 종래 기술에 따라 사용되는 임의의 재료를 사용할 수 있으며, 당업자는 진보성 기술을 발휘하지 않고서, 전자 디바이스에서 이들 재료 중 임의의 재료를 본 발명의 재료들과 조합할 수 있다.
- [0299] 이에 대응하여 디바이스는 (응용에 따라) 구조화되고, 접촉 연결되고 마지막으로 기밀식으로 밀봉되는데, 이러한 디바이스들의 수명은 물 및/또는 공기의 존재하에서 심각하게 단축되기 때문이다.
- [0300] 또한, 하나 이상의 층들이 승화법에 의해 코팅되는 것을 특징으로 하는 전자 디바이스, 특히 유기 전계발광 디바이스가 바람직하다. 이러한 경우, 재료는 진공 승화 시스템에서 전형적으로는 10^{-5} mbar 미만, 바람직하게는 10^{-6} mbar 미만의 초기 압력에서 증착에 의해 적용된다. 또한, 초기 압력이 훨씬 더 낮거나 또는 훨씬 더 높을 수 있는데, 예를 들어 10^{-7} mbar 미만일 수 있다.
- [0301] 마찬가지로, 하나 이상의 층들이 OVPD (유기 기상 증착) 방법에 의해 또는 캐리어 가스 승화의 도움으로 코팅되는 것을 특징으로 하는 전자 디바이스, 특히 유기 전계발광 디바이스가 바람직하다. 이러한 경우, 재료들은 10^{-5} mbar 내지 1 bar 사이의 압력에서 적용된다. 상기 방법의 특정 경우는 OVJP (유기 증기 제트 인쇄) 방법이고, 이때 재료는 노즐에 의해 직접 적용되고 따라서 구조화된다 (예를 들어, M. S. Arnold 등의, *Appl. Phys. Lett.* **2008**, *92*, 053301).
- [0302] 추가로, 하나 이상의 층들이 용액으로부터, 예를 들어 스핀-코팅에 의해, 또는 임의의 인쇄법, 예를 들어 스크린 인쇄, 플렉소그래픽 인쇄, 오프셋 인쇄 또는 노즐 인쇄, 그러나 더욱 바람직하게는 LITI (광 유도 열 화상, 열 전자 인쇄) 또는 잉크젯 인쇄에 의해 제조되는 것을 특징으로 하는 전자 디바이스, 특히 유기 전계발광 디바이스가 바람직하다. 이 목적을 위해, 예를 들어 적합한 치환을 통해 얻어지는 가용성 화합물이 필요하다.
- [0303] 전자 디바이스, 특히 유기 전계발광 디바이스는 또한 용액으로부터 하나 이상의 층을 도포하고 증착에 의해 하나 이상의 다른 층을 적용함으로써 혼성 시스템으로서 제조될 수 있다. 예를 들어, 식 (I) 의 구조를 포함하는 본 발명의 화합물 및 매트릭스 재료를 포함하는 방출 층을 용액으로부터 도포하고, 거기에 정공 차단 층 및/또는 전자 수송 층을 감압하에서 증착에 의해 적용하는 것이 가능하다.
- [0304] 이들 방법은 일반적으로 당업자에게 공지되어 있으며, 식 (I) 또는 위에서 상세히 나타낸 바람직한 실시형태들의 구조들을 포함하는 본 발명의 화합물을 함유하는 전자 디바이스, 특히 유기 전계발광 디바이스에 어려움 없이 적용될 수 있다.
- [0305] 본 발명의 전자 디바이스들, 특히 유기 전계발광 디바이스는 종래 기술에 비해 다음과 같은 놀라운 이점들 중 하나 이상에 대해 주목할 만하다:
- [0306] 1. 식 (I) 또는 위에 그리고 이하에 기재된 바람직한 실시형태들의 구조를 갖는 화합물, 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머를, 특히 전자 전도 재료 및/또는 정공 전도 재료로서 또는 매트릭스 재료로서 포함하는, 전자 디바이스, 특히 유기 전계발광 디바이스는, 매우 양호한 수명을 갖는다.
- [0307] 2. 식 (I) 또는 위에서 그리고 이하에서 언급되는 바람직한 실시형태들의 구조를 갖는 화합물, 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머를 특히 전자 수송 재료, 정공 도체 재료 및/또는 호스트 재료로서, 포함하는 전자 디바이스, 특히 유기 전계발광 디바이스는 탁월한 효율을 갖는다. 더욱 구체적으로, 효율은 식 (I) 의 구조 단위를 함유하지 않는 유사 화합물과 비교하여 훨씬 더 높다. 이러한 맥락에서, 식 (I) 또는 위에서 그리고 이하에서 언급되는 바람직한 실시형태들의 구조를 갖는 본 발명의 화합물, 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머는 전자 디바이스에 사용될 때 낮은 작동 전압을 가져온다. 이러한 맥락에서, 이들 화합물은 특히 낮은 롤 오프 (roll-off), 즉 높은 루미넌스에서 디바이스의 전력 효율의 작은 저하를 가져온다.
- [0308] 3. 식 (I) 또는 위에서 그리고 이하에서 기재되는 바람직한 실시형태들의 구조를 갖는 화합물, 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머를 전자 수송 재료, 정공 도체 재료 및/또는 호스트 재료로서, 포함하는 전자 디바이스, 특히 유기 전계발광 디바이스는 탁월한 컬러 순도를 갖는다.
- [0309] 4. 식 (I) 또는 위에서 그리고 이하에서 기재되는 바람직한 실시형태들의 구조를 갖는 본 발명의 화합물, 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머는 매우 높은 열적 및 광화학적 안정성을 나타내며, 매우 긴 수명을 갖는 화합물에 이른다.
- [0310] 5. 식 (I) 또는 위에서 그리고 이하에서 언급되는 바람직한 실시형태들의 구조를 갖는 화합물, 올리고머, 폴리

며 또는 덴드리머로, 전자 디바이스, 특히 유기 전계발광 디바이스에서 광 손실 채널의 형성을 피할 수 있다.
 결과적으로, 이들 디바이스들은 높은 PL 효율 및 이에 따른 높은 EL 효율의 방출체들 및 매트릭스에서 도펀트로의 우수한 에너지 전달을 특징으로 한다.

- [0311] 6. 식 (I) 또는 위에서 그리고 이하에서 언급되는 바람직한 실시형태들의 구조를 갖는 화합물, 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머는 탁월한 유리 막 형성을 갖는다.
- [0312] 7. 식 (I) 또는 위에서 그리고 이하에서 언급되는 바람직한 실시형태들의 구조를 갖는 화합물, 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머는 용액으로부터 매우 양호한 막들을 형성한다.
- [0313] 이들 위에서 언급된 이점들은 추가 전자 특성의 열화를 수반하지 않는다.
- [0314] 본 발명의 화합물 및 혼합물은 전자 디바이스에서의 사용에 적합하다. 전자 디바이스는 적어도 하나의 유기 화합물을 함유하는 적어도 하나의 층을 함유하는 디바이스를 의미하는 것으로 이해된다. 그 성분은 또한 무기 재료 또는 그렇지 않으면 무기 재료로부터 완전히 형성된 층들을 포함할 수도 있다.
- [0315] 따라서, 본 발명은 또한 전자 디바이스, 특히 유기 전계발광 디바이스에서의 본 발명의 화합물 또는 혼합물의 용도를 제공한다.
- [0316] 본 발명은 여전히 또한 본 발명의 화합물 및/또는 본 발명의 올리고머, 폴리머 또는 덴드리머의 전자 디바이스에서의 호스트 재료, 정공 도체 재료, 전자 주입 재료, 및/또는 전자 수송 재료, 바람직하게는 호스트 재료 및/또는 전자 수송 재료로서의 용도를 제공한다.
- [0317] 본 발명은 여전히 또한 본 발명의 위에 상술된 화합물 또는 혼합물 중 적어도 하나를 포함하는 전자 디바이스를 제공한다. 이 경우, 그 화합물에 대해 위에 상술된 선호들이 전자 디바이스에도 적용된다. 보다 바람직하게는, 전자 디바이스는, 유기 전계발광 디바이스 (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 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 필드 켈치 디바이스 (O-FQD), 유기 전기 센서, 발광 전기 화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 유기 플라즈몬 방출 디바이스, 바람직하게는 유기 전계발광 디바이스 (OLED, PLED), 특히 인광 OLED 로 이루어지는 군으로부터 선택된다.
- [0318] 본 발명의 추가 실시 형태에서, 본 발명의 유기 전계발광 디바이스는 별도의 정공 주입 층 및/또는 정공 수송 층 및/또는 정공 차단 층 및/또는 전자 수송 층을 전혀 함유하지 않으며, 이것은, WO2005/053051에 기재된 바와 같이, 방출 층이 정공 주입 층 또는 애노드에 바로 인접하거나 및/또는 방출 층이 전자 수송 층 또는 전자 주입 층 또는 캐소드에 바로 인접하다는 것을 의미한다. 추가적으로, 예를 들어 WO 2009/030981 에 기재된 바와 같이, 방출 층에 금속 착물과 동일하거나 유사한 금속 착물을 방출 층에 바로 인접하는 정공 수송 또는 정공 주입 재료로서 사용할 수 있다.
- [0319] 본 발명의 유기 전계발광 디바이스의 추가 층에서, 종래 기술에 따라 통상적으로 사용되는 임의의 재료를 사용할 수 있다. 따라서, 당업자는, 진보적 능력을 발휘하지 않고서, 본 발명의 식 (I) 의 또는 바람직한 실시 형태들에 따른 화합물과 조합하여 유기 전계발광 디바이스들에 대해 알려진 임의의 재료를 사용할 수 있다.
- [0320] 본 발명의 화합물은 일반적으로 유기 전계발광 디바이스에서의 사용시 매우 양호한 성질을 갖는다. 특히, 유기 전계발광 디바이스에서 본 발명의 화합물을 사용하는 경우, 수명은 종래 기술에 따른 유사한 화합물에 비해 현저히 더 양호하다. 동시에, 유기 전계발광 디바이스의 추가 특성, 특히 효율 및 전압이 마찬가지로 더 양호하거나 또는 적어도 비슷하다.
- [0321] 본 발명에 설명된 실시형태들의 변형들은 본 발명의 범위에 의해 커버된다는 것이 지적되어야 한다. 본 발명에서 개시된 임의의 특징은, 이것이 명시적으로 배제되지 않는 한, 동일한 목적 또는 동등하거나 유사한 목적을 제공하는 대안의 특징으로 교환될 수도 있다. 따라서, 본 발명에 개시된 임의의 특징은, 달리 언급되지 않으면, 일반 계열 (generic series) 의 일 예로서, 또는 동등 또는 유사 특징으로서 고려되어야 한다.
- [0322] 본 발명의 모든 특징들은, 특정 특징들 및/또는 단계들이 상호 배타적이지 않으면, 임의의 방식으로 서로 조합될 수도 있다. 이것은 특히 본 발명의 바람직한 특징들에 적용된다. 동일하게, 비본질적인 조합들의 특징들은 (조합이 아니라) 따로 사용될 수도 있다.
- [0323] 또한, 본 발명의 많은 특징들 그리고 특히 바람직한 실시형태들의 특징들은, 그것들 자체로 진보성이 있는 것으로 간주되어야 하며 단순히 본 발명의 실시형태들의 일부로서 간주되어서는 안된다는 것이 지적되어야 한다.

이들 특징들에 대해, 임의의 현재 청구되는 발명에 추가적으로 또는 대안적으로 독립적인 보호가 추구될 수도 있다.

[0324] 본 발명에 개시된 기술적 교시는 추출될 수도 있고 다른 예들과 조합될 수도 있다.

[0325] 본 발명은 하기의 실시예들에 의해 상세히 예시되며, 이에 의해 본 발명을 제한하고자 하는 것은 아니다. 당업자는 본 발명의 추가의 전자 디바이스들을 제조하고 따라서 청구된 전체 범위에 걸쳐 본 발명을 실시하기 위해, 진보적 능력을 발휘하지 않고서, 주어진 상세들을 사용할 수 있을 것이다.

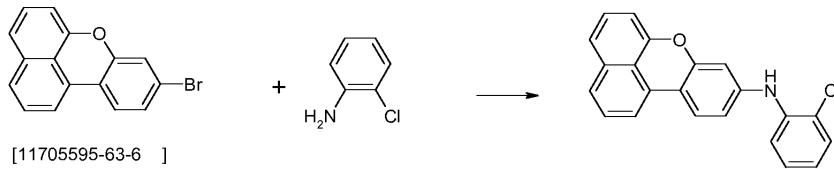
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0326] **실시예**

[0327] 달리 언급되지 않는 한, 이하의 합성들은 건조된 용매 중에서 보호 가스 분위기 하에서 수행된다. 반응물은 ALDRICH 로부터 공급될 수 있다. 문헌으로부터 알려진 반응물의 수들은 그들의 일부가 대괄호 안에 언급되며, 대응하는 CAS 번호이다.

[0328] **합성예**

[0329] **a) 벤조[k1]크산텐-9-일-(2-클로로페닐)아민**

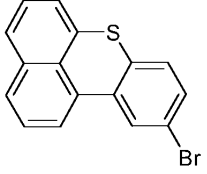
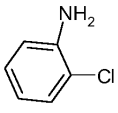
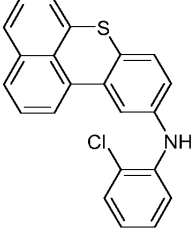
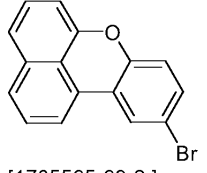
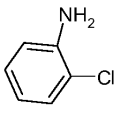
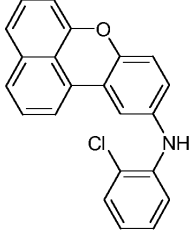
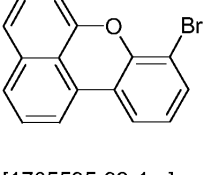
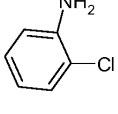
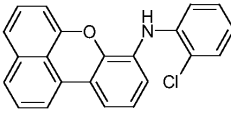
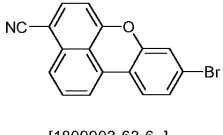
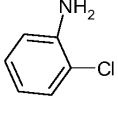
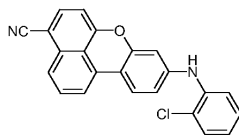
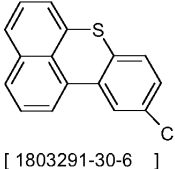
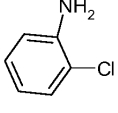
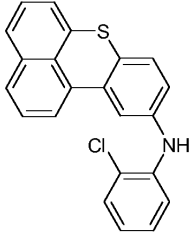
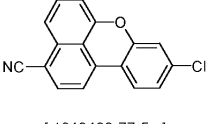
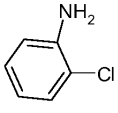
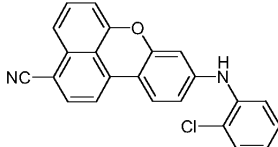


[0330] [0331] 40 g (137 mmol) 의 9-브로모벤조[k1]크산텐, 17.9 g (140 mmol) 의 2-클로로아닐린, 68.2 g (710 mmol) 의 나트륨 tert-부톡시드, 613 mg (3 mmol) 의 팔라듐(II) 아세테이트 및 3.03 g (5 mmol) 의 dppf 를 1.3 l 의 톨루엔에 용해시키고, 5 시간 동안 환류 하에 교반한다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 톨루엔으로 양을 늘리고 Celite 를 통해 여과하였다. 여과액을 감압하에 농축시키고, 잔류물을 톨루엔/헥산으로부터 결정화시킨다. 생성물을 무색의 고체로서 단리하였다. 수율: 39 g (109 mmol), 이론치의 83%.

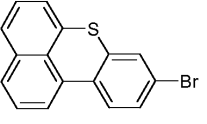
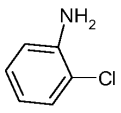
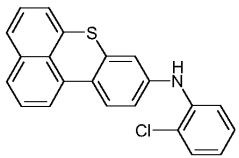
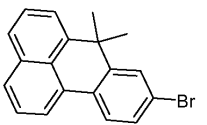
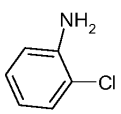
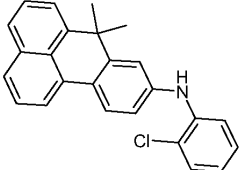
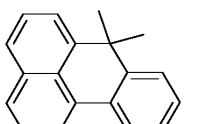
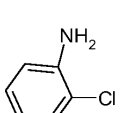
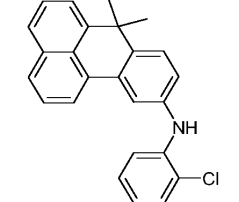
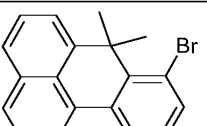
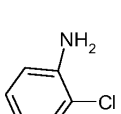
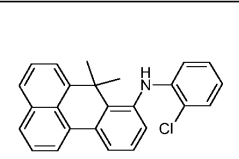
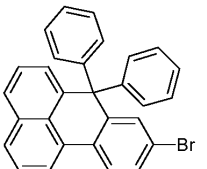
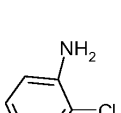
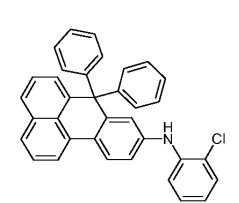
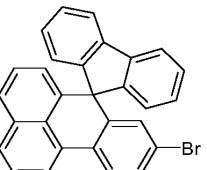
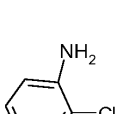
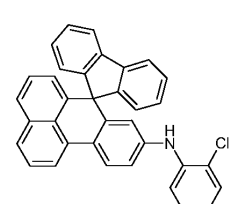
[0332] 이하의 화합물들이 유사한 방식으로 제조될 수 있다:

	반응물 1	반응물 2	생성물	수율
1a	 [1705595-60-3]	 7285-66-7		81%
2a	 [1705595-57-8]			75%

[0333]

3a	 [11705595-56-7]			76%
4a	 [1705595-93-2]			72%
5a	 [1705595-92-1]			79%
6a	 [1809903-63-6]			71%
7a	 [1803291-30-6]			73%
8a	 [1643433-77-5]			77%

[0334]

9a	 [1705595-60-3]			70%
10a	 [1198396-54-1]			70%
11a	 [1705595-69-2]			71%
12a	 [1705595-68-1]			76%
13a	 [1705595-95-4]			70%
14a	 [1705595-96-5]			69%

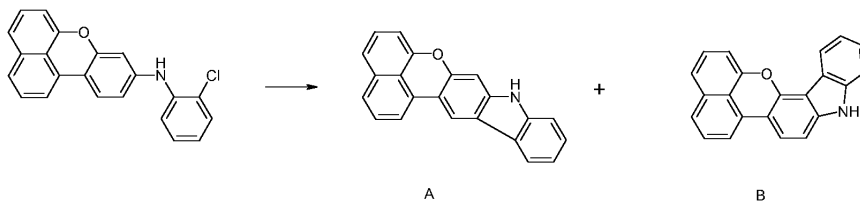
[0335]

15a	 [1705595-94-3]			71%
16a	 [1705595-71-6]			67%
17a	 [1612224-62-0]			71%

[0336]

[0337]

b) 고리화

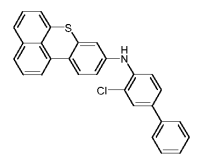
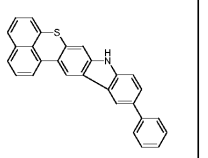
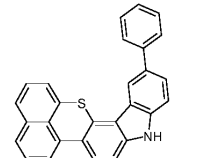
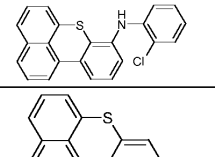
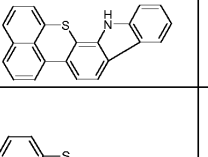
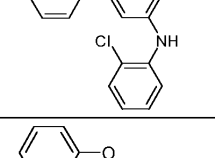
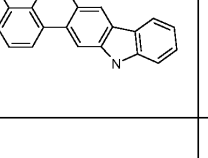
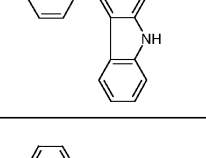
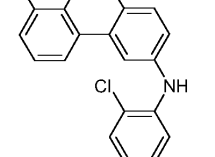
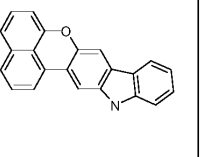
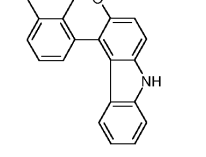
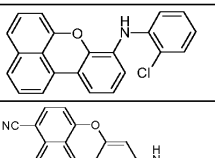
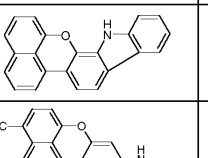
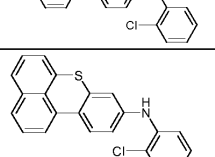
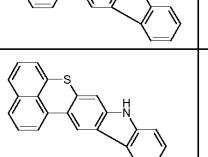
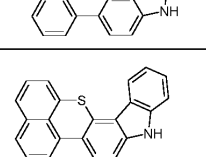
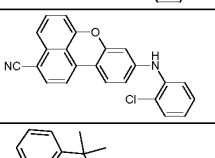
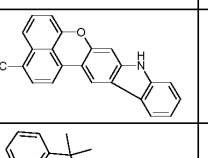
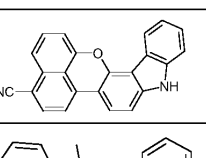
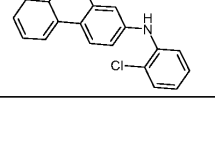
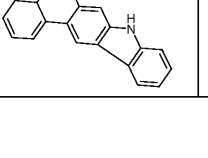
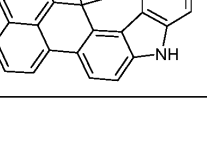





[0338]

[0339]

35 g (102 mmol) 의 벤조[k1]크산텐-9-일-(2-클로로페닐)아민, 56 g (409 mmol) 의 칼륨 카보네이트, 4.5 g (12 mmol) 의 트리시클로헥실포스핀 테트라플루오로보레이트 및 1.38 g (6 mmol) 의 팔라듐(II) 아세테이트를 500 ml 의 디메틸아세트아미드 에 현탁시키고 환류하 6시간 동안 교반하였다. 냉각 후, 반응 혼합물을 300 ml의 물 및 400 ml의 에틸 아세테이트와 혼합한다. 혼합물을 추가로 30 분 동안 교반하고, 유기 상을 분리하고, 짧은 Celite 층을 통해 여과한 후, 용매를 감압 하에 제거한다. 조 생성물을 톨루엔으로 고온 추출 (hot extraction) 하고 톨루엔으로부터 재결정화하였다. 수율 : 28g (229mmol) 의 A + B 혼합물; 이론치의 90 %; 순도 : HPLC 에 의한 98.0%. 에틸 아세테이트/톨루엔 (1 : 2) 으로부터 재결정화한 후, 62 % A 및 23 % B 가 수득된다.

[0340] 이하의 화합물들이 유사한 방식으로 제조될 수 있다:

	반응물 1	생성물	생성물	수율
1b				60% / 19%
2b				72%
3b				54% / 22%
4b				59% / 18%
5b				67%
6b				56% / 20%
7b				53% / 19%
8b				50% / 21%
9b				59% / 11%

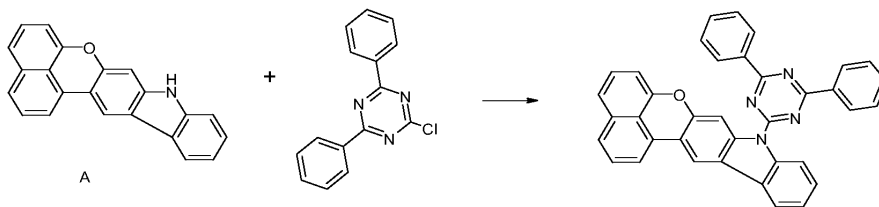
[0341]

10b				50% / 20%
11b				77%
12b				61% / 15%
13b				59% / 16%
14b				72%
15b				55% / 22%
16b				41% / 24%

[0342]

[0343]

c) 부호발트



[0344]

[0345]

미네랄 오일 중 60%, NaH (107 mmol) 4.3 g 를 보호성 분위기 하에 300 ml 의 디메틸포름아미드에 용해시킨다. 32 g (107 mmol) 의 카르바졸 유도체 (A) 를 250 ml 의 DMF 에 용해시키고, 반응 혼합물에 적가한다. 실온에서 1 시간 후, 200 ml 의 THF 중 2-클로로-4,6-디페닐[1,3,5]트리아진 (34.5 g, 0.122 mol) 의 용액을 적가한다. 반응 혼합물을 실온에서 12 시간 동안 교반하고, 그 후 얼음 상에 부었다. 실온으로 가운시킨 후에, 침전된 고체를 여과하고, 에탄올 및 헵탄으로 세척한다. 잔류물을 톨루엔으로 고온 추출하고, 톨루엔/n-헵탄으로부터 재결정화하고, 마지막으로 높은 진공 하에 승화시킨다. 순도는 99.9% 이다. 수율은 38 g (70 mmol); 이론치의 66% 이다.

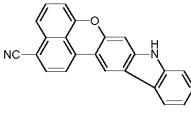
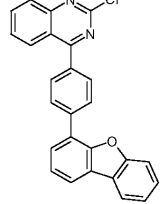
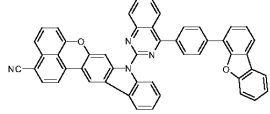
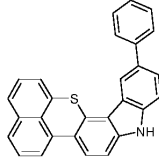
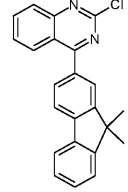
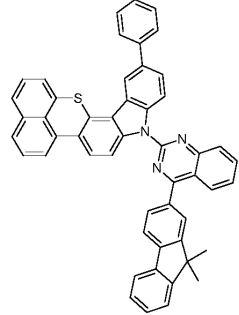
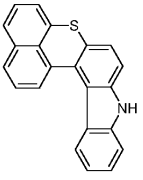
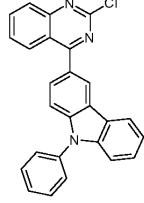
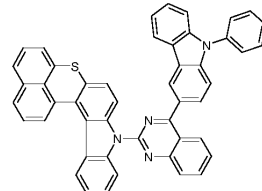
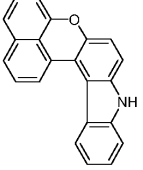
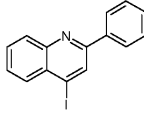
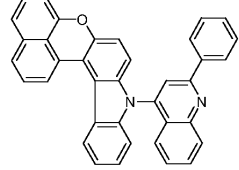
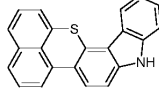
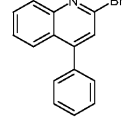
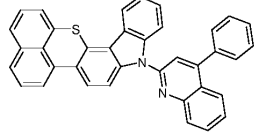
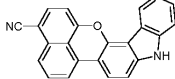
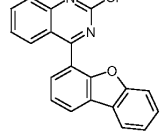
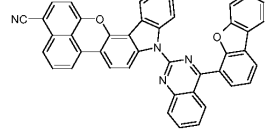
[0346] 이하의 화합물들이 유사한 방식으로 제조될 수 있다:

	반응물 1	반응물 2	생성물	수율
1c		 [29874-83-7]		66%
2c		 3842-55-5		62%

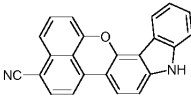
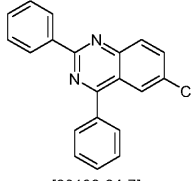
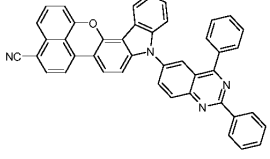
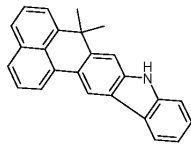
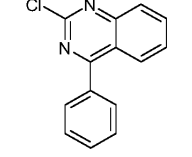
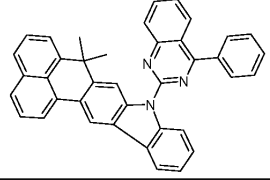
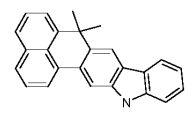
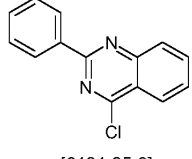
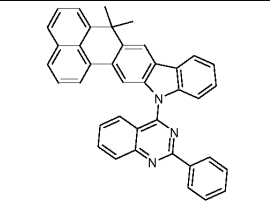
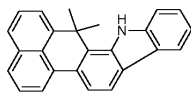
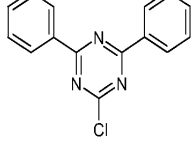
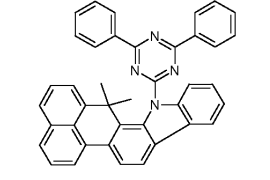
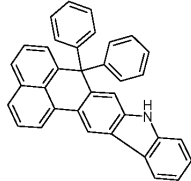
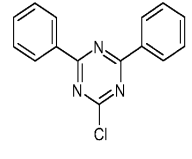
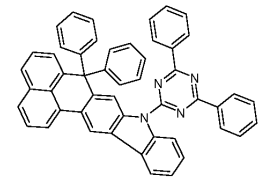
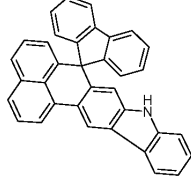
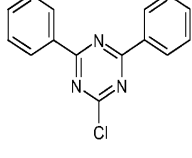
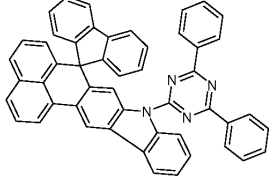
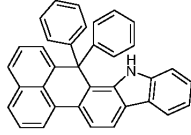
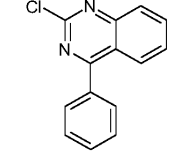
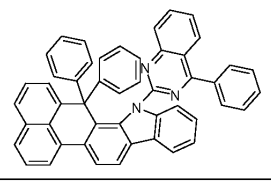
[0347]

3c		 1384480-21-0		64%
4c		 92853-85-5		57%
5c		 1260393-65-4		61%
6c		 2915-16-4		63%
7c		 133785-60-1		60%
8c		 [1616499-38-7]		68%

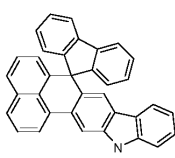
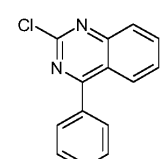
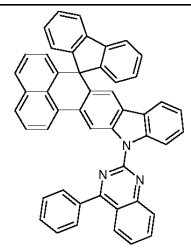
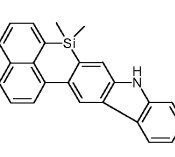
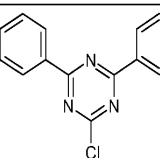
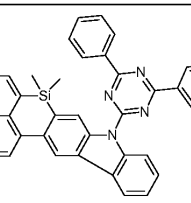
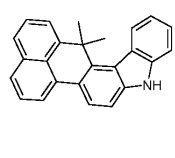
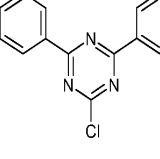
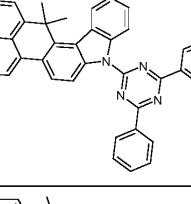
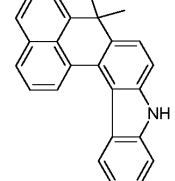
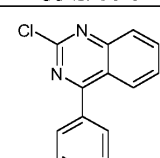
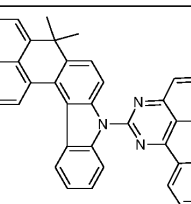
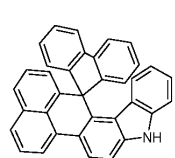
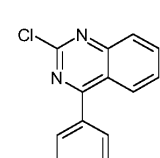
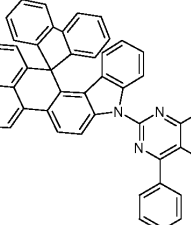
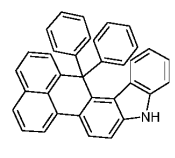
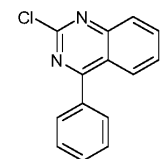
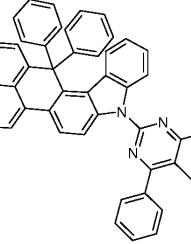
[0348]

9c		 [1403252-58-3]		65%
10c		 [1373265-66-7]		69%
11c		 [1373317-91-9]		67%
12c		 [643017-61-2]		64%
13c		 [857206-12-3]		63%
14c		 [14003252-55-0]		68%

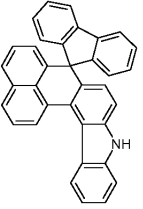
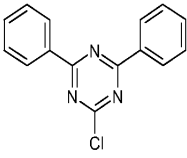
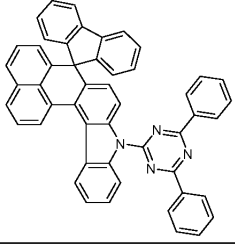
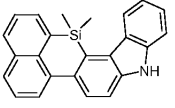
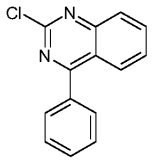
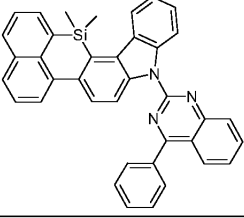
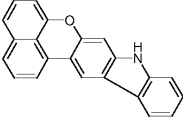
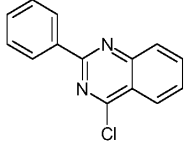
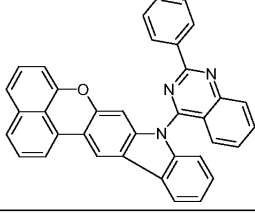
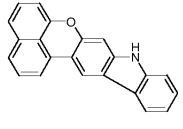
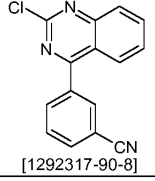
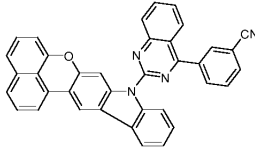
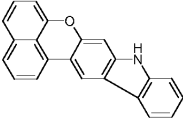
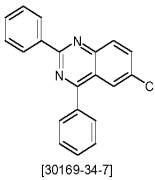
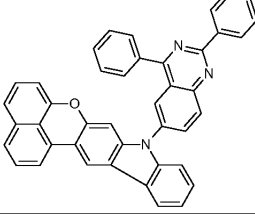
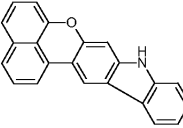
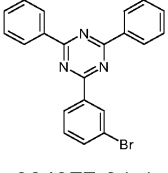
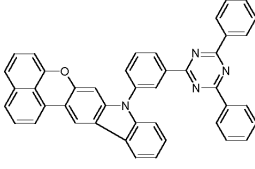
[0349]

15c		 [30169-34-7]		65%
16c		 [29874-83-7]		62%
17c		 [6484-25-9]		65%
18c		 3842-55-5		71%
19c		 3842-55-5		69%
20c		 3842-55-5		73%
21c		 [29874-83-7]		70%

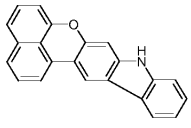
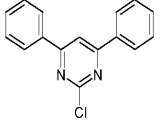
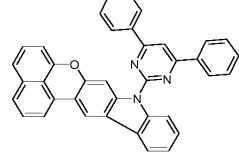
[0350]

22c		 [29874-83-7]		63%
23c		 3842-55-5		60%
24c		 3842-55-5		71%
25c		 [29874-83-7]		7%
26c		 [29874-83-7]		69%
27v		 [29874-83-7]		63%

[0351]

28c		 3842-55-5		64%
29c		 [29874-83-7]		70%
30c		 [6484-25-9]		76%
31c		 [1292317-90-8]		65%
32c		 [30169-34-7]		69%
33c		 864377-31-1		72%

[0352]

34c		 2915-16-4		74%
-----	---	--	---	-----

[0353]

[0354] OLED의 제조

[0355] 이하의 예 I1 내지 I19에서, 다양한 OLED의 데이터가 제시된다.

[0356] 예 I1-I19를 위한 전처리 : 두께 50nm의 구조화된 ITO (인듐 주석 산화물)로 코팅된 유리 플라크를 산소 플라즈마로 코팅하기 전에 처리한 후, 아르곤 플라즈마로 처리된다. 이들 플라즈마 처리된 유리 플라크는, OLED가 적용되는 기판을 형성한다.

[0357] OLED는 기본적으로 다음의 층 구조를 갖는다: 기판/정공 주입 층 (HIL)/정공 수송 층 (HTL) / 전자 차단 층 (EBL) / 방출 층 (EML) / 선택적인 정공 차단 층 (HBL) / 전자 수송 층 (ETL) / 선택적인 전자 주입 층 (EIL)

및 최종적으로 캐소드. 캐소드는 두께 100 nm 의 알루미늄 층에 의해 형성된다. OLED 의 정확한 구조는 표 1 에서 발견될 수 있다. OLED 의 제조에 필요한 재료를 표 2 에 나타낸다.

[0358] 모든 재료는 진공 챔버에서 열 기상 증착에 의해 적용된다. 이 경우, 방출 층은 항상, 적어도 하나의 매트릭스 재료 (호스트 재료) 및 공증발에 의해 특정 체적 비율로 매트릭스 재료(들)에 첨가되는 방출 도펀트 (방출체) 로 이루어진다. IC5:IC3:TEG2 (55%:35%:10%) 와 같은 형태에서 주어지는 세부사항은, 여기서 재료 IC5 가 55% 의 부피 비율로, IC3 이 35% 의 부피 비율로, 그리고 TEG2 가 10% 의 부피 비율로 층에 존재한다는 것을 의미한다. 유사하게, 전자 수송 층은 또한 두 재료의 혼합물로 이루어질 수도 있다.

[0359] OLED 는 표준 방식으로 특성화된다. 이 목적을 위해, Lambertian 방출 특성을 가정한 전류-전압-루미넌스 특성 (IUL 특성) 으로부터 산출되는, 루미넌스의 함수로서, 전계발광 스펙트럼, 전류 효율 (cd/A 단위로 측정), 전력 효율 (lm/W 단위로 측정) 및 외부 양자 효율 (EQE, 퍼센트 단위로 측정), 그리고 또한 수명이 결정된다. 전계발광 스펙트럼은 1000 cd/m² 의 루미넌스에서 측정되고, CIE 1931 x 및 y 컬러 좌표가 그로부터 계산된다.

[0360] **인광 OLED 의 방출 층에서의 본 발명의 혼합물의 용도**

[0361] 본 발명의 재료들은 인광 적색 OLED 의 방출 층에서 사용될 수 있다. 본 발명의 재료 EG1 은 예 I1에서 인광성 방출체 TEG5 와 조합하여 매트릭스 재료로서 사용된다. 1000 cd/m² 의 루미넌스에서, OLED 는 CIE_x = 0.67 및 CIE_y = 0.33 의 컬러 좌표를 갖는다. 예 I2 내지 I13 에서도, OLED 는 CIE = 0.67 및 CIE_y = 0.33 의 컬러 좌표를 갖는 광을 방출한다. 이것은 본 발명의 화합물 EG1-EG13 이 OLED 에서의 매트릭스 재료로서 사용하기에 적합하다는 것을 보여준다.

[0362] **인광 OLED 의 전자 수송 층에서의 본 발명의 혼합물의 용도**

[0363] 본 발명의 재료는 또한 OLED 에서의 전자 수송 층에 사용될 수 있다. 예 I14 내지 I19 에서, 본 발명의 재료 EG14 내지 EG19 는 전자 수송 층에 사용된다. 예 I14 내지 I19 에서, OLED 는 CIE = 0.67 및 CIE_y = 0.33 의 컬러 좌표를 갖는 광을 방출한다. 이것은 본 발명의 화합물 EG14 내지 EG19 이 OLED 에서의 전자 수송 재료로서 사용하기에 적합하다는 것을 보여준다.

[0364] 표 1: OLED 들의 구조

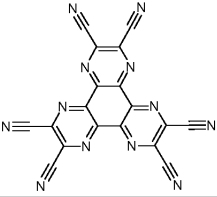
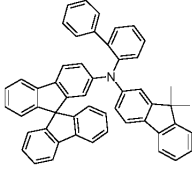
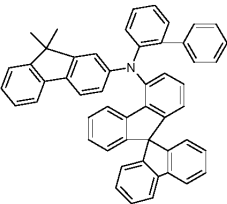
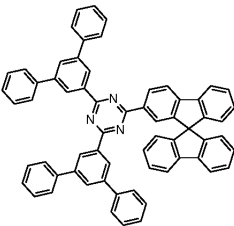
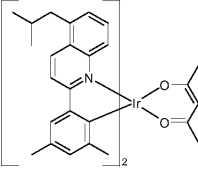
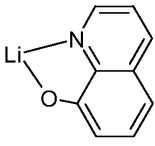
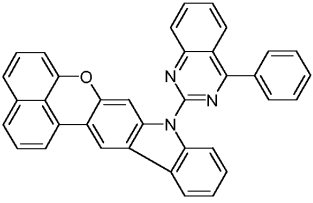
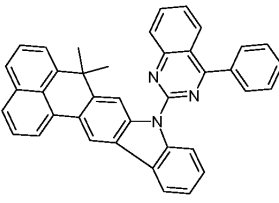
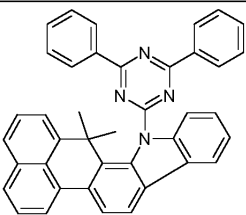
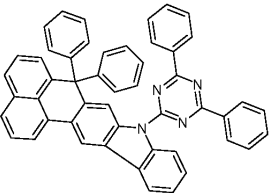
Ex.	HIL 두께	HTL 두께	EBL 두께	EML 두께	HBL 두께	ETL 두께	EIL 두께
I1	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG1:TER5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
I2	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG2:TER5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
I3	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG3:TER5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
I4	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG4:TER5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
I5	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG5:TER5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
I6	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG6:TER5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
I7	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG7:TER5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
I8	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG8:TER5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
I9	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG9:TER5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
I10	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG10:TER5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
I11	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG11:TER5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	

[0365]

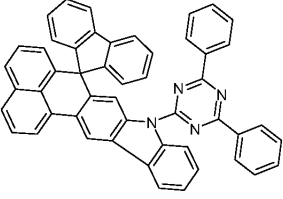
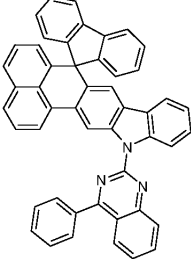
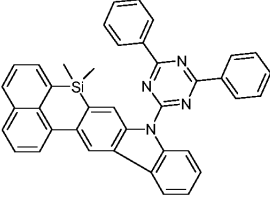
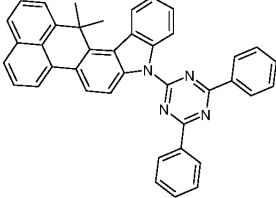
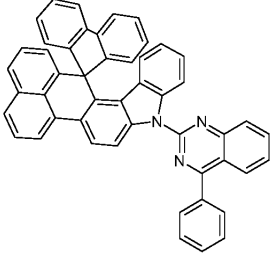
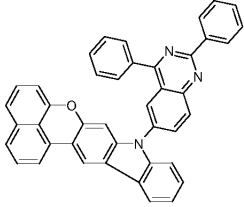
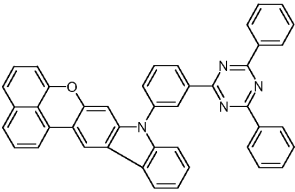
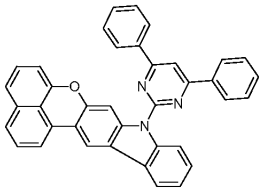
112	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG12:TER5 (95%:5%) 40nm		ST2:LiQ (50%:50%) 35nm	
113	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG1:TER5 (95%:5%) 40nm	ST2 5nm	ST2:EG13 (50%:50%) 30nm	LiQ 3nm
114	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG1:TER5 (95%:5%) 40nm	ST2 5nm	ST2:EG14 (50%:50%) 30nm	LiQ 3nm
115	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG1:TER5 (95%:5%) 40nm	ST2 5nm	ST2:EG15 (50%:50%) 30nm	LiQ 3nm
116	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG1:TER5 (95%:5%) 40nm	ST2 5nm	ST2:EG16 (50%:50%) 30nm	LiQ 3nm
117	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG1:TER5 (95%:5%) 40nm	ST2 5nm	ST2:EG17 (50%:50%) 30nm	LiQ 3nm
118	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG1:TER5 (95%:5%) 40nm	ST2 5nm	ST2:EG18 (50%:50%) 30nm	LiQ 3nm
119	HATCN 5nm	SpMA1 125nm	SpMA3 10nm	EG1:TER5 (95%:5%) 40nm	ST2 5nm	ST2:EG19 (50%:50%) 30nm	LiQ 3nm

[0366]

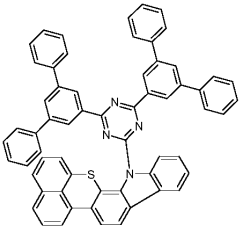
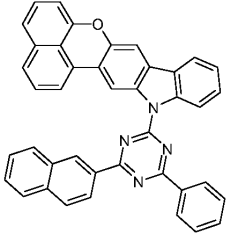
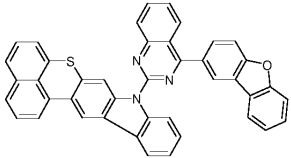
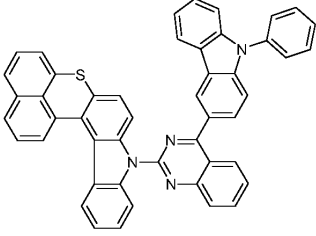
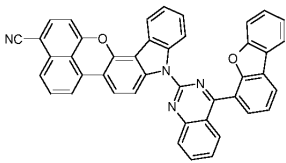
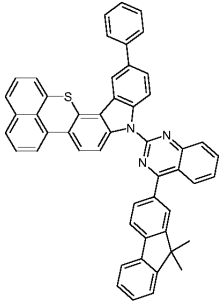
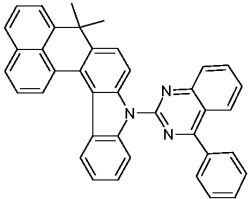
[0367] 표 2: OLED 용 재료의 구조식

	
HATCN	SpMA1
	
SpMA3	ST2
	
TER5	LiQ
	
EG1	EG2
	
EG3	EG4

[0368]

	
EG5	EG6
	
EG7	EG8
	
EG9	EG10
	
EG11	EG12

[0369]

	
<p>EG13</p>	<p>EG14</p>
	
<p>EG15</p>	<p>EG16</p>
	
<p>EG17</p>	<p>EG18</p>
	
<p>EG19</p>	

[0370]