

(19)대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(51) Int. Cl.⁸
C09K 11/06 (2006.01)
H05B 33/10 (2006.01)
(11) 공개번호 10-2006-0006812
 (43) 공개일자 2006년01월19일

(21) 출원번호	10-2005-7019619		
(22) 출원일자	2005년10월14일		
번역문 제출일자	2005년10월14일		
(86) 국제출원번호	PCT/US2003/032047	(87) 국제공개번호	WO 2004/096948
국제출원일자	2003년10월10일	국제공개일자	2004년11월11일

(30) 우선권주장 10/413,653 2003년04월15일 미국(US)

(71) 출원인 쓰리엠 이노베이티브 프로퍼티즈 컴파니
 미국 55133-3427 미네소타주 세인트 폴 피.오.박스 33427 쓰리엠 센터

(72) 발명자 벤트센, 제임스 지.
 미국 55133-3427 미네소타주 세인트 폴 포스트 오피스 박스 33427
 고펠렌, 니콜라스 피.
 미국 55133-3427 미네소타주 세인트 폴 포스트 오피스 박스 33427
 리, 잉보
 미국 55133-3427 미네소타주 세인트 폴 포스트 오피스 박스 33427
 로버츠, 랄프 알.
 미국 55133-3427 미네소타주 세인트 폴 포스트 오피스 박스 33427

(74) 대리인 장수길
 김영

심사청구 : 없음

(54) 유기 전자 장치용 전자 수송제

요약

본 발명은 유기 전계발광 장치와 같은 유기 전자 장치에서 전자 수송제로서 사용될 수 있는 화합물 및 조성물에 관한 것이다. 상기 화합물은 비-중합체성이며, 말단 캡핑기(end capping group)에 공액된 방향족 코어(core)를 갖는다. 상기 방향족 코어는 -C=N- 단위를 포함하는 측쇄 헤테로아릴 기를 갖는 페닐렌 기 아릴렌 또는 나프탈렌 기 아릴렌을 함유한다.

대표도

도 4A

색인어

유기 전계발광 장치, 전자 수송 물질, 정공 수송 물질, 방향족 코어, 말단 캡핑기, 발광 물질

명세서

기술분야

본 발명은 유기 전자 장치를 제조하기 위한 화합물, 조성물, 유기 전자 장치 및 방법에 관한 것이다. 더욱 특히, 본 발명은 유기 전계발광 장치와 같은 유기 전자 장치에서 전자 수송제로 사용될 수 있는 화합물 및 조성물에 관한 것이다.

배경기술

유기 발광 다이오드 (OLED)와 같은 유기 전계발광 (OEL) 장치는 얇은 프로파일(profile), 저중량, 광범위한 발광색을 얻을 수 있음, 및 낮은 구동 전압 때문에 전자 매체에 사용하기에 바람직하다. OLED는 그래픽의 배경 조명, 화소형 디스플레이, 및 큰 방출 그래픽과 같은 적용에 있어서 사용될 수 있다.

그러한 장치에 적절한 전계발광 물질, 전기활성 물질 및 전하 수송 물질, 및 장치 제조 방법에 대한 연구 및 개발이 계속되고 있다. 일부 경우에, 이들 장치 제조 방법 중 하나 이상을 촉진하는 물질이 선택되거나 개발될 수 있다. 공여자 시트(sheet)에서 수용자 기관으로의 물질의 패턴형 열 전달 (pattern-wise thermal transfer)은 EL 장치 형성의 한 방법으로서 제시되었다. 유기 전계발광 장치 형성을 위한 유기 발광기 (light emitter)의 선택적인 열 전달이 특히 유용한 것으로 나타났다.

분자 옥사디아졸 및 트리아졸 유도체가 OLED 장치에서의 전자 수송/정공 차단 물질로 사용되었다. 보통 사용되는 옥사디아졸 유도체는 2-(4-바이페닐)-5-(4-t-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸 (PBD)이다. 보통 사용되는 트리아졸 유도체는 3-(4-바이페닐일)-4-페닐-5-(4-3급-부틸페닐)1,2,4-트리아졸 (TAZ)이다. 그러나, PBD 또는 TAZ를 사용하는 OLED 장치는 종종 PBD 또는 TAZ에 의한 응집체 형성 또는 재결정화에 의하여 작동 수명이 짧아지는 것을 나타내며, 상 분리 및 방출을 억제하는 전하 캐리어 트랩(carrier trap)의 형성을 야기한다.

블렌딩된 중합체 시스템에서 이러한 문제점을 완화시키려는 노력으로, PBD와 같은 전자 수송 구조를 가요성 중합체 쇄에 결합시켜 비결정질 물질을 형성하는 몇몇 기가 보고되었다. 예를 들어, 옥사디아졸 측쇄를 갖는 폴리메틸메타크릴레이트가 보고되었다. 그러나, 이들 물질에 기초한 장치에 있어서 작동 수명은 PBD 응집으로 인하여 극단적으로 짧음이 발견되었다 (예를 들어, 문헌[Strukelj 등, *Science*, **267**, 1969, (1995)] 참조).

발명의 개요

본 발명은 유기 전자 장치를 제조하기 위한 화합물, 조성물, 유기 전자 장치, 및 방법에 관한 것이다. 더욱 특별하게는, 본 발명은 -C=N- 단위를 포함하는 측쇄 헤테로아릴 기를 갖는 아릴렌 기를 함유하는 화합물 및 조성물에 관한 것이다. 화합물은 유기 전계발광 장치와 같은 유기 전자 장치에서의 전자 수송제로서 사용될 수 있다.

본 발명의 한 양태는 방향족 코어(core) 및 이 방향족 코어에 공액된 2개의 말단 캡핑기들(end capping group)을 갖는 하기 화학식 I의 화합물을 제공한다.



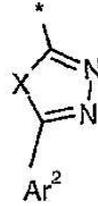
상기 식에서,

각각의 Ar¹은 독립적으로 비치환 또는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, 페닐렌 기 아릴렌 또는 나프탈렌 기 아릴렌이고;

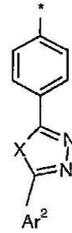
각각의 a는 독립적으로 1 또는 2이고;

각각의 E_y는 독립적으로 하기 화학식 II 또는 화학식 III의 구조이고:

화학식 II



화학식 III



[상기 식들에서,

각각의 X는 독립적으로 O, S 또는 NR¹이고, 이때 R¹은 알킬, 아릴, 헤테로아릴, 헤테로알킬 또는 이들의 조합이며;

각각의 Ar²는 독립적으로 비치환 또는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴, 알킬 옥사디아졸릴, 아릴 옥사디아졸릴, 알킬 트리아졸릴, 아릴 트리아졸릴, 디아릴아미노, 아릴디아릴아미노 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된 카르보시클릭 아릴 기이고;

각각의 별표(-*)는 화합물중의 또다른 기에 대한 결합 위치를 나타낸다];

n은 1 또는 2의 정수이고;

각각의 말단 캡핑기(EC)는 독립적으로 비치환 또는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, 카르보시클릭 아릴, 헤테로아릴 또는 3급 아미노 아릴 기이고, 이때 단지 1개의 EC만이 화학식 II 또는 화학식 III의 기이다.

본 발명의 또다른 양태는 화학식 I에 따른 화합물을, 전하 수송 물질, 전하 차단 물질, 발광 물질, 색상 전환 물질, 중합체성 결합제 또는 이들의 조합인 하나 이상의 다른 화합물과 조합하여 포함하는 조성물을 제공한다.

본 발명의 또다른 양태는 화학식 I에 따른 화합물을 포함하는 유기 전자 장치를 제공한다. 일부 실시태양에서, 유기 전자 장치는 유기 전계발광 장치이다.

추가로, 본 발명은 유기 전계발광 장치의 제조 방법을 제공한다. 상기 방법은 (1) 화학식 I에 따른 화합물을 함유하는 전달층을 포함하는 공여자 시트를 제조하는 단계; 및 (2) 상기 전달층을 수용자 기관의 표면에 전달하는 단계를 포함한다.

본 발명의 상기 개요는 본 발명의 각각의 개시된 실시태양 또는 모든 실시를 기재하려는 것이 아니다. 하기 도면 및 상세한 설명에서 이들 실시태양을 더욱 구체적으로 예시한다.

도면의 간단한 설명

본 발명은 첨부 도면과 함께 하기 본 발명의 각종 실시태양의 상세한 설명을 고려하여 보다 완전하게 이해될 수 있을 것이다.

도 1은 유기 전계발광 디스플레이 구성의 개략 측면도이다.

도 2는 물질을 전달하기 위한 공여자 시트의 개략 측면도이다.

도 3은 유기 전계발광 디스플레이의 개략 측면도이다.

도 4A는 유기 전계발광 장치의 제 1 실시태양의 개략 측면도이다.

도 4B는 유기 전계발광 장치의 제 2 실시태양의 개략 측면도이다.

도 4C는 유기 전계발광 장치의 제 3 실시태양의 개략 측면도이다.

도 4D는 유기 전계발광 장치의 제 4 실시태양의 개략 측면도이다.

본 발명은 각종 변형물 및 대체 형태로 수정될 수 있으나, 그 특정 내용은 예시 목적으로 도면에 도시하였으며, 상세하게 설명할 것이다. 그러나, 이는 본 발명을 기재된 특정 실시태양으로 한정하려는 의도가 아닌 것으로 이해되어야 한다. 반대로, 본 발명은 본 발명의 범주 및 요지 내에 속하는 모든 변형물, 균등물 및 대체물을 포함하고자 한다.

발명의 상세한 설명

정의

본원에서 사용된 용어 "a", "an" 및 "the"는 서로 혼용되어 사용되고, "하나 이상의(at least one)"는 기재된 요소들 중 하나 이상을 의미한다.

본원에서 사용된 용어 "활성"은 화합물을 지칭하기 위해 사용되는 경우, 정공을 수송하거나, 전자를 수송하거나, 전자/정공 재조합에 참여하거나, 발광하거나, 또는 이들의 조합인 화합물을 의미한다.

본원에서 사용된 용어 "비결정질"은 결정질이 아니고, 용매로부터 제거될 때 결정화되지 않는 화합물 또는 조성물을 지칭한다.

본원에서 사용된 용어 "알킬"은 치환되지 않거나 치환된 직쇄, 분지형 및 환형 알킬 기를 모두 포함한다. 알킬 기는 통상적으로 1 내지 약 30개의 탄소 원자를 가진다. 일부 실시태양에서, 알킬 기는 1 내지 약 20개, 또는 1 내지 약 10개의 탄소 원자를 함유한다. 알킬의 예는 메틸, 에틸, n-프로필, n-부틸, n-헥틸, 3급-부틸, 이소프로필, 이소부틸, n-옥틸, n-헵틸 및 에틸헥실을 포함하지만 이에 한정되지는 않는다.

본원에서 사용된 용어 "알케닐"은 하나 이상의 지방족 탄소-탄소 이중결합을 갖는 직쇄, 분지형 또는 환형 알켄의 1가 라디칼을 지칭하고, 치환되지 않은 알케닐 기 및 치환된 알케닐 기 둘다를 포함한다. 알케닐 기는 통상적으로 2 내지 약 30개의 탄소 원자를 포함한다. 일부 실시태양에서, 알케닐 기는 2 내지 약 20개 또는 2 내지 약 10개의 탄소 원자를 함유한다. 알케닐 기의 예는 n-옥트-3-에닐 및 n-헵트-6-에닐을 포함하지만 이에 한정되지는 않는다. 알케닐 기는 교차되는 이중 및 탄소-탄소 단일결합을 가질 수 있다. 예를 들어, 알케닐 기는 각각의 탄소-탄소 이중결합 사이에 단일 탄소-탄소 결합을 갖는 디엔 또는 트리엔일 수 있다.

본원에서 사용된 용어 "알킬렌"은 직쇄, 분지형 또는 환형의 2가 탄화수소 라디칼을 포함하고 치환되지 않은 알킬렌 기 또는 치환된 알킬렌 기 둘다를 포함한다. 알킬렌 기는 전형적으로 약 30개 이하의 탄소 원자를 포함한다. 일부 실시태양에서, 알킬렌 기는 약 20개 이하 또는 약 10개 이하의 탄소 원자를 함유한다. 본원에서 사용된 "알킬렌"의 예에는 메틸렌, 에틸렌, 프로필렌, 부틸렌 및 이소프로필렌 등이 포함되나, 이들로 한정되지 않는다.

본원에서 사용된 용어 "알콕시"는 알킬 기에 부착된 산소 원자를 갖는 기를 지칭한다. 알콕시 기는 통상적으로 1 내지 약 30개의 탄소 원자를 가진다. 일부 실시태양에서, 알콕시 기는 1 내지 약 20개 또는 1 내지 약 10개의 탄소 원자를 함유한다. 그 예는 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 부톡시 등을 포함한다. 알콕시는 헤테로알킬 기의 하위군이다. 알콕시 기는 치환되지 않거나 치환될 수 있다.

본원에서 사용된 용어 "방향족"은 카르보시클릭 방향족 화합물 또는 기 및 헤테로방향족 화합물 또는 기 둘다를 지칭한다. 카르보시클릭 방향족 화합물은 방향족 고리 구조에 탄소 원자만을 함유하는 화합물이다. 헤테로방향족 화합물은 방향족 고리 구조의 고리 내에 S, O, N 및 P에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 함유하는 화합물이다.

본원에서 사용된 용어 "아릴"은 1 내지 10개의 고리, 다중 융합 고리, 또는 이들의 조합을 갖는 1가 불포화 방향족 카르보시클릭 라디칼을 지칭한다. 즉, 아릴은 카르보시클릭 방향족 화합물의 1가 라디칼이다. 일부 실시태양에서, 아릴 기는 10개 이하의 고리, 8개 이하의 고리, 6개 이하의 고리, 4개 이하의 고리, 3개 이하의 고리, 2개 이하의 고리, 또는 1개의 방향족 고리를 가진다. 아릴 기는 예를 들어 약 60개 이하, 약 50개 이하, 약 40개 이하, 약 30개 이하, 또는 약 20개 이하의 탄소 원자를 함유할 수 있다. 아릴 기의 예는 페닐, 바이페닐, 터페닐, 안트릴, 나프틸, 아세나프틸, 페난트릴, 디히드로페난트레닐, 안트라세닐, 플루오레닐, 9-실라플루오레닐, 테트라히드로피레닐, 페틸레닐, 스피로비스플루오레닐, 플루오란테닐, 피레닐, 디히드로피레닐, 테트라히드로피레닐, 루브레닐, 크리세닐, 5,6,12,13-테트라히드로디벤조[a,h]안트라세닐, 6,12-디히드로인덴노[1,2-b]플루오레닐, 5,12-디히드로-6H-인덴노[1,2-b]페난트레닐, 디히드로페난트레닐 및 벤조[g,h,i]페틸레닐을 포함하지만 이에 한정되지는 않는다.

본원에서 사용된 용어 "아릴렌"은 1 내지 10개의 고리, 다중 융합 고리, 또는 이들의 조합을 갖는 2가 불포화 방향족 카르보시클릭 라디칼을 지칭한다. 즉, 아릴렌은 카르보시클릭 방향족 화합물의 2가 라디칼이다. 일부 실시태양에서, 아릴렌 기는 8개 이하의 고리, 6개 이하의 고리, 4개 이하의 고리, 3개 이하의 고리, 2개 이하의 고리, 또는 1개의 방향족 고리를 가진다. 일부 예에서, 아릴렌 기는 60개 이하의 탄소 원자, 50개 이하의 탄소 원자, 40개 이하의 탄소 원자, 30개 이하의 탄소 원자 또는 20개 이하의 탄소 원자를 함유한다. 아릴렌 기의 예는 벤젠, 나프탈렌, 아세나프텐, 페난트렌, 안트라센, 플루오렌, 9-실라플루오렌, 플루오란텐, 벤조피렌, 방향족 코렌, 디히드로페난트렌, 테트라히드로피렌, 페틸렌, 스피로비스플루오렌, 피렌, 루브렌 및 크리센의 2가 라디칼을 포함하지만 이에 한정되지는 않는다. 아릴렌 기의 특정 예는 벤젠-1,3-디일, 벤젠-1,4-디일, 나프탈렌-2,7-디일, 나프탈렌-2,6-디일, 나프탈렌-1,4-디일, 나프탈렌-1,5-디일, 아세나프텐-디일, 페난트렌-3,8-디일, 5,6-디히드로페난트렌-3,8-디일, 4,5,9,10-테트라히드로피렌-2,7-디일, 피렌-2,7-디일, 플루오렌-2,7-디일, 9-실라플루오렌-2,7-디일, 안트라센-9,10-디일, 페틸렌-3,9-디일, 페틸렌-3,10-디일, 스피로비스플루오렌-디일, 5,6,12,13-테트라히드로디벤조[a,h]안트라센-3,10-디일, 플루오란텐-디일, 루브렌-디일, 크리센-디일, 벤조[g,h,i]페틸렌-디일 등을 포함하지만 이에 한정되지는 않는다.

본원에서 사용된 용어 "아릴옥시"는 아릴기에 부착된 산소 원자를 갖는 기를 지칭한다. 그 예는 페녹시를 포함하지만 이에 한정되지는 않는다.

아래의 화학식들 중의 별표 (-*)는 분자의 다른 기에 대한 결합 위치를 표시한다.

본원에서 사용된 용어 "카르보시클릭"은 탄소 원자로 형성된 고리를 지칭한다. 고리 구조에는 헤테로원자가 없다.

본원에서 사용된 용어 "축합 폴리시클릭 아릴렌"은 아릴렌의 하위군으로서, 3 내지 약 10개의 융합 고리들을 갖는 2가 아릴렌 기를 지칭한다. 일부 실시태양에서, 축합 폴리시클릭 아릴렌은 약 8개 이하의 융합 고리, 약 6개 이하의 융합 고리, 약 4개 이하의 융합 고리 또는 3개의 융합 고리를 함유한다. 축합 폴리시클릭 아릴렌 기의 예에는 페난트렌, 안트라센, 플루오란텐, 피렌, 페틸렌, 벤조페틸렌, 루브렌, 크리센, 방향족 코렌 등이 포함되나, 이들로 한정되지 않는다.

본원에서 사용된 용어 "공액된"은 탄소-탄소 단일결합과 탄소-탄소 이중결합 또는 삼중결합이 교차하는, 2개 이상의 탄소-탄소 이중결합 또는 삼중결합을 갖는 불포화 화합물을 지칭한다. 마찬가지로, "비공액된"은 공액되지 않는 불포화 화합물을 지칭한다. 예를 들어, 비공액된 방향족 기는 탄소-탄소 단일결합과 탄소-탄소 이중결합 또는 삼중결합의 교차를 차단하는 2개 이상의 탄소-탄소 단일결합을 가질 수 있다.

본원에서 사용된 용어 "전기활성"은 정공을 수송하거나, 전자를 수송하거나, 또는 전자/정공 재조합에 참여하는 화합물을 지칭한다.

본원에서 사용된 용어 "전기화학적으로 안정한"은 산화 및(또는) 환원 반응이 가역적인 전기화학적 분해에 있어서 안정한 것을 의미한다.

본원에서 사용된 용어 "플루오로알킬"은 하나 이상의 수소 원자가 불소 원자로 대체된 알킬 기를 지칭한다.

본원에서 사용된 용어 "헤테로알킬"은 독립적으로 S, O, N, P 및 Si로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자가 탄소 원자를 대체한 직쇄, 분지형 및 환형 알킬 기를 포함한다. 헤테로알킬 기는 통상적으로 1 내지 약 30개의 탄소 원자를 함유하고, 10개 이하의 헤테로원자를 가질 수 있다. 일부 실시태양에서, 헤테로알킬 기는 1 내지 약 20개 또는 1 내지 약 10개의 탄소 원자를 함유한다. 알콕시기는 헤테로알킬 기의 하위군이다. 헤테로알킬 기의 예는 화학식 $-O(C_mH_{2m}O)_y-$ (여기서, m은 1 내지 6의 정수이고, y는 2 내지 20의 정수임)의 부분을 갖는 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 3,6-디옥사헥틸, 3-(트리메틸실릴)-프로필, 폴리(옥시알킬렌) 기, 및 화학식 $-[Si(C_wH_{2w+1})_2O]_y-$ (여기서, w는 1 내지 10의 정수이고, y는 2 내지 20의 정수임)의 부분을 갖는 폴리(디알킬실록산) 기를 포함하지만 이에 한정되지는 않는다. 헤테로알킬 기는 치환되지 않거나 치환될 수 있다.

본원에서 사용된 용어 "헤테로아릴"은 고리 내에 독립적으로 S, O, N 및 P에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 5 내지 7원 방향족 고리의 1가 라디칼을 지칭한다. 즉, 헤테로아릴은 헤테로방향족 화합물의 1가 라디칼이다. 상기 헤테로아릴 고리는 하나 이상의 고리에 융합될 수 있고, 다른 헤테로시클릭 고리(들), 헤테로아릴 고리(들), 아릴 고리(들), 시클로알케닐 고리(들), 시클로알킬 고리(들), 및 이들의 조합에서 선택되는 1 내지 10개의 다른 고리를 함유할 수 있다. 일부 실시태양에서, 헤테로아릴 고리는 8개 이하의 다른 고리, 6개 이하의 다른 고리, 4개 이하의 다른 고리, 3개 이하의 다른 고리, 2개 이하의 다른 고리, 또는 1개의 다른 고리를 가져야 한다. 헤테로아릴은 통상적으로 약 60개 이하의 탄소 원자를 함유한다. 일부 실시태양에서, 헤테로아릴은 약 50개 이하의 탄소 원자, 약 40개 이하의 탄소 원자, 약 30개 이하의 탄소 원자, 또는 약 20개 이하의 탄소 원자를 함유한다. 헤테로아릴 기의 예는 푸라닐, 티오펜, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 티아졸릴, 옥사졸릴, 이속사졸릴, 옥사디아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 피리디닐, 피리다지닐, 피라지닐, 피리미디닐, 퀴놀리닐, 이소퀴놀리닐, 벤조푸라닐, 벤조티오펜, 인돌릴, 카르바조일, 벤족사졸릴, 벤조티아졸릴, 벤즈이미다졸릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 프탈라지닐, 벤조티아디아졸릴, 벤조트리아지닐, 페나지닐, 페난트리디닐, 아크리디닐, 인다졸릴, 실론 등을 포함하지만 이에 한정되지는 않는다.

본원에서 사용된 "-C=N-" 단위를 갖는 헤테로아릴"은 헤테로아릴의 하위군이고, 하나 이상의 헤테로방향족 고리 중에 -C=N- 단위를 갖는 헤테로아릴을 지칭한다. 적절한 예는 옥사디아졸릴, N-치환된-트리아졸릴, N-치환된 이미다졸릴, N-치환된 피라졸릴, 옥사졸릴, 이속사졸릴, 티아졸릴, 이소티아졸릴, 피리디닐, 피리다지닐, 피리미디닐, 피라지닐, 트리아지닐, 테트라제닐, 벤족사졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀리닐, 이소퀴놀리닐, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 프탈라지닐, 벤조트리아지닐, 페나지닐, 페난트리디닐, 아크리디닐 등을 포함하지만 이에 한정되지는 않는다.

본원에서 사용된 "전자가 풍부한 헤테로아릴"은 헤테로아릴의 하위군이며, 헤테로원자로부터 파이 결합계(pi bonding system)로 전자 밀도를 공여할 수 있는 헤테로아릴을 지칭한다. 그 예는 디아릴실라놀릴, 티오펜, 바이티오펜, 푸라닐, N-알킬 카르바졸릴, N-아릴 카르바졸릴, N-알킬 피롤릴, N-아릴 피롤릴 등의 1가 라디칼을 포함하지만 이에 한정되지는 않는다.

본원에서 사용된 용어 "헤테로아릴렌"은 독립적으로 S, O, N 및 P에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 5 내지 7원 방향족 고리의 방향족 2가 라디칼을 지칭한다. 즉, 헤테로아릴렌은 헤테로방향족 화합물의 2가 라디칼이다. 그러한 헤테로방향족 고리는 하나 이상의 고리에 융합될 수 있고, 다른 헤테로시클릭 고리(들), 헤테로아릴 고리(들), 아릴 고리(들), 시클로알케닐 고리(들), 시클로알킬 고리(들), 및 이들의 조합에서 선택되는 1 내지 약 10개의 다른 고리를 함유할 수 있다. 일부 실시태양에서, 헤테로방향족 고리는 8개 이하의 다른 고리, 4개 이하의 다른 고리, 3개 이하의 다른 고리, 2개 이하의 다른 고리 또는 1개의 다른 고리에 융합된다. 헤테로아릴렌은 전형적으로 약 60개 이하의 탄소 원자를 함유한다. 일부 실시태양에서, 헤테로아릴렌은 약 50개 이하의 탄소 원자, 약 40개 이하의 탄소 원자, 약 30개 이하의 탄소 원자, 또는 약 20개 이하의 탄소 원자를 함유한다. 헤테로아릴렌 기의 예는 푸란, 티오펜, 피롤, 이미다졸, 피라졸, 트리아졸, 테트라졸, 티아졸, 옥사졸, 이속사졸, 옥사디아졸, 티아디아졸, 이소티아졸, 피리딘, 피리다진, 피라진, 피리미딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 벤조푸란, 벤조티오펜, 인돌, 카르바졸, 벤족사졸, 벤조티아졸, 벤즈이미디아졸, 신놀린, 퀴나졸린, 퀴녹살린, 프탈라진, 벤조티아디아졸, 벤조트리아진, 페나진, 페난트리딘, 아크리딘, 인다졸 및 실론의 2가 라디칼을 포함하지만 이에 한정되지는 않는다. 헤테로아릴렌의 특정 예는 푸란-2,5-디일, 티오펜-2,4-디일, 1,3,4-옥사디아졸-2,5-디일, 1,3,4-티

아디아졸-2,5-디일, 1,3-티아졸-2,4-디일, 벤조[1,2,5]티아디아졸-4,7-디일, 1,3-티아졸-2,5-디일, 피리딘-2,4-디일, 피리딘-2,3-디일, 피리딘-2,5-디일, 피리미딘-2,4-디일, 퀴놀린-2,3-디일, 1,1-디알킬-1H-실롤-2,5-디일 등을 포함하지만 이에 한정되지는 않는다.

본원에서 사용된 "-C=N-" 단위를 갖는 헤테로아릴렌"은 헤테로아릴렌의 하위군이며, 하나 이상의 헤테로방향족 고리 내에 -C=N- 단위를 갖는 헤테로아릴렌을 지칭한다. -C=N- 단위를 갖는 헤테로아릴렌의 예는 옥사디아졸, N-치환된-트리아졸, N-치환된 이미다졸, N-치환된 피라졸, 옥사졸, 이속사졸, 티아졸, 이소티아졸, 피리딘, 피리다진, 피리미딘, 피라진, 트리아진, 테트라젠, 벤족사졸, 벤조티아졸, 벤조티아디아졸, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 신놀린, 퀴나졸린, 퀴녹살린, 프탈라진, 벤조트리아진, 페나진, 페난트리딘, 아크리딘 등의 2가 라디칼을 포함하지만 이에 한정되지는 않는다.

본원에 사용된 "전자가 풍부한 헤테로아릴렌"은 헤테로아릴렌의 하위군이며, 헤테로원자로부터 파이 결합계로 전자 밀도를 공여할 수 있는 헤테로아릴렌을 지칭한다. 적절한 예는 디아릴실라놀, 티오펜, 바이티오펜, 푸란, N-알킬 카르바졸, N-아릴 카르바졸, N-알킬 피롤, N-아릴 피롤 등의 2가 라디칼을 포함한다.

본원에 사용된 용어 "비활성"은 화합물을 지칭하는데 사용되는 경우에, 전기활성이 아니거나, 전계발광이 아니거나, 또는 이들의 조합인 화합물을 의미한다.

본원에 사용된 용어 "나프탈렌 기 아릴"은 아릴 기의 하위군이며, 융합된 나프탈렌 고리 구조를 갖는 1가 불포화 방향족 카르보시클릭 라디칼을 지칭한다. 비치환 나프탈렌 기 아릴은 2개의 융합 방향족 고리를 갖는다. 나프탈렌 기의 예에는 나프탈렌-2-일, 나프탈렌-1-일, 나프탈렌-7-일, 나프탈렌-6-일, 나프탈렌-4-일, 나프탈렌-5-일, 아세나프탈레닐 등이 포함된다.

본원에 사용된 용어 "나프탈렌 기 아릴렌"은 아릴렌 기의 하위군이며, 융합된 나프탈렌 고리 구조를 갖는 2가 불포화 방향족 카르보시클릭 라디칼을 지칭한다. 비치환 나프탈렌 기 아릴렌은 2개의 카르보시클릭 방향족 고리를 갖는다. 나프탈렌 기의 예에는 나프탈렌-2,7-디일, 나프탈렌-2,6-디일, 나프탈렌-1,4-디일, 나프탈렌-1,5-디일, 아세나프텐-디일 등이 포함되지만, 이들로 한정되지 않는다.

본원에 사용된 용어 "퍼플루오로알킬"은 모든 수소 원자가 불소 원자로 대체된 알킬 기를 지칭한다. 퍼플루오로알킬은 플루오로알킬의 하위군이다.

본원에 사용된 용어 "페닐렌 기 아릴"은 아릴의 하위군으로, 임의로 알킬렌 또는 이치환된 실릴렌(-Si(R)₂-)의 2가 라디칼과 융합된, 1개, 2개 또는 3개의 공역된 페닐 또는 페닐렌 고리 (예를 들어, 페닐, 바이페닐 및 터페닐)를 갖는 1가 불포화 방향족 카르보시클릭 라디칼을 지칭하며, 이때 각각의 R은 독립적으로 C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, C₁₋₃₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴, 플루오로, C₁₋₃₀ 플루오로알킬, C₁₋₃₀ 퍼플루오로알킬 및 이들의 조합으로부터 선택된다. 비치환 페닐렌 기 아릴은 3개 이하의 카르보시클릭 방향족 고리를 갖는다. 적합한 페닐렌 기 아릴의 예에는 페닐, 바이페닐, 터페닐, 5,6-디히드로페난트레닐, 4,5,9,10-테트라히드로피레닐, 플루오레닐, 9-실라플루오레닐, 스피로비스플루오레닐, 6,12-디히드로인데노[1,2-b]플루오레닐, 5,12-디히드로-6H-인데노[1,2-b]페난트레닐, 5,6,12,13-테트라히드로디벤조[a,h]안트라세닐 등이 포함되나, 이들로 한정되지 않는다.

본원에 사용된 용어 "페닐렌 기 아릴렌"은 아릴렌의 하위군으로, 임의로 알킬렌 또는 이치환된 실릴렌(-Si(R)₂-)의 2가 라디칼과 융합된, 1개, 2개 또는 3개의 공역된 페닐렌 고리 (예를 들어, 페닐렌, 바이페닐렌 및 터페닐렌)를 갖는 2가 불포화 방향족 카르보시클릭 라디칼을 지칭하며, 이때 각각의 R은 독립적으로 C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, C₁₋₃₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴, 플루오로, C₁₋₃₀ 플루오로알킬, C₁₋₃₀ 퍼플루오로알킬 또는 이들의 조합이다. 비치환 페닐렌 기 아릴렌은 3개 이하의 카르보시클릭 방향족 고리를 갖는다. 페닐렌 기 아릴렌의 예에는 벤젠-1,3-디일, 벤젠-1,4-디일, 페난트렌-3,8-디일, 5,6-디히드로페난트렌-3,8-디일, 4,5,9,10-테트라히드로피렌-2,7-디일, 플루오렌-2,7-디일, 9-실라플루오렌-2,7-디일, 스피로비스플루오렌-2,7-디일, 6,12-디히드로인데노[1,2-b]플루오렌-2,8-디일, 5,12-디히드로-6H-인데노[1,2-b]페난트렌-3,10-디일, 5,6,12,13-테트라히드로디벤조[a,h]안트라센-3,10-디일 등이 포함되나, 이들로 한정되지 않는다.

본원에서 사용된 용어 "소분자"는 비중합체성(예를 들어, 반복 단위가 있는 경우 3개 미만의 반복 단위를 가짐)인 화합물을 지칭한다.

본원에 사용된 용어 "용액 가공성(solution processible)"은 용액에 용해될 수 있는 화합물 또는 조성물을 지칭한다. 일부 실시태양에서, 용액 가공성인 화합물 또는 조성물은 용액으로부터 얇은 필름으로 코팅될 수 있다. 다른 실시태양에서, 조성물 또는 화합물의 용액은 기판에 적용될 수 있다. 예를 들어, 용액은 기판상에 프린팅되거나 코팅될 수 있다.

본원에서 사용된 용어 "치환기"는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 헤테로알킬, 헤테로아릴, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬 등과 같은 기를 지칭한다. 화학식 I의 각종 기는, 예를 들어 C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, C₁₋₃₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴, 플루오로, C₁₋₃₀ 플루오로알킬 및 C₁₋₃₀ 퍼플루오로알킬로부터 선택되는 하나 이상의 기로 치환될 수 있다.

본원에서 사용된 용어 "3급 방향족 아민"은 하나 이상의 3급 질소 중심을 갖는 분자 화합물의 한 부류를 지칭하며, 각 질소 중심은 3개의 방향족 탄소 중심에 결합된다. 3급 방향족 아민의 예는 디아릴아닐린; 알킬 카르바졸; 아릴 카르바졸; 및 테트라아릴디아민, 예를 들어 N,N,N',N'-테트라아릴벤지딘, N,N,N',N'-테트라아릴-1,4-페닐렌디아민, N,N,N',N'-테트라아릴-2,7-디아미노플루오렌 유도체, 예를 들어 특허 출원 EP 0 953 624 A1호 및 EP 0 879 868 A2호에 교시되어 있는 것들, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)벤지딘 (TPD로도 알려져 있음), N,N'-비스(3-나프탈렌-2-일)-N,N'-비스(페닐)벤지딘 (NPB로도 알려져 있음), 1,4-비스(카르바졸릴)바이페닐 (CBP로도 알려져 있음), 및 기타 테트라아릴디아민 유도체, 예를 들어 문헌[B. E. Koene 등, *Chem. Mater.*, **10**, 2235-2250 (1998)], 미국 특허 제5,792,557호, 미국 특허 제5,550,290호 및 특허 출원 EP 0 891 121 A1호에 기재되어 있는 것들; 피아릴트리아민 유도체, 예를 들어 미국 특허 제6,074,734호 및 특허 출원 EP 0 827 367 A1호에 기재되어 있는 것들; 스타르버스트 아민 유도체, 예를 들어 4,4',4"-트리스(N,N-디아릴아미노)트리페닐아민 및 1,3,5-트리스(4-디아릴아미노페닐)벤젠, 4,4',4"-트리스(N,N-디페닐아미노)트리페닐아민 (TDATA로도 알려져 있음), 4,4',4"-트리스(N-3-메틸페닐-N-페닐아미노)트리페닐아민 (mTDATA로도 알려져 있음); 1,3,5-트리스(4-디페닐아미노페닐)벤젠 (TDAPB); 및 다른 덴드리틱(dendritic) 및 스피로 아민 유도체, 예를 들어 특허 출원 EP 0 650 955 A1호, 문헌[Tokito 등, *Polym. Prep. (Am. Chem. Soc. Div. Polym. Chem.)* **38**(1), 388-389 (1997)], [Tamake 등, *Chem. Commun.*, 2175-21761 (1996)] 및 [Tokito 등, *Appl. Inst. Phys.*, **70**(15), 1929-1931 (1997)]에 교시되어 있는 것들을 포함한다.

본원에서 사용된 용어 "3급 방향족 아미노 아릴"은 상기 정의한 바와 같은 3급 방향족 아민의 1가 방향족 고리 라디칼을 지칭한다.

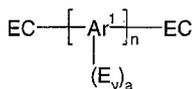
본원에서 사용된 용어 "3급 방향족 아미노 아릴렌"은 상기 정의한 바와 같은 3급 방향족 아민의 2가 불포화 방향족 카르보시클릭 라디칼을 지칭한다.

화합물

본 발명의 한 양태는 방향족 코어 및 이 방향족 코어에 공액된 2개의 말단 캡핑기들(EC)을 갖는 화합물을 제공한다. 방향족 코어는 -C=N- 단위를 포함하는 측쇄 헤테로아릴 기를 갖는 페닐렌 기 아릴렌 또는 나프탈렌 기 아릴렌을 함유한다. 상기 화합물은 유기 전자 장치에 사용될 수 있다. 예를 들어, 화합물은 유기 전계발광 장치와 같은 유기 전자 장치에서 전자 수송 물질로서 사용될 수 있다.

상기 화합물은 하기 화학식 I에 따른 구조를 갖는다.

<화학식 I>



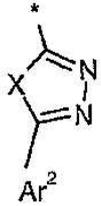
상기 식에서,

각각의 Ar¹은 독립적으로 비치환 또는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, 페닐렌 기 아릴렌 또는 나프탈렌 기 아릴렌이고;

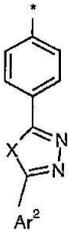
각각의 a는 독립적으로 1 또는 2이고;

각각의 E_v는 독립적으로 하기 화학식 II 또는 화학식 III의 구조이고:

<화학식 II>



<화학식 III>



[상기 식들에서,

각각의 X는 독립적으로 O, S 또는 NR¹이고, 이때 R¹은 알킬, 아릴, 헤테로아릴, 헤테로알킬 또는 이들의 조합이고;

각각의 Ar²는 독립적으로 비치환 또는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴, 알킬 옥사디아졸릴, 아릴 옥사디아졸릴, 알킬 트리아졸릴, 아릴 트리아졸릴, 디아릴아미노, 아릴디아릴아미노 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된 카르보시클릭 아릴 기이고;

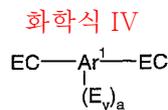
각각의 별표(-*)는 화합물중의 또다른 기에 대한 결합 위치를 나타낸다];

n은 1 또는 2의 정수이고;

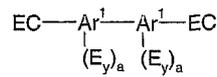
각각의 말단 캡핑기(EC)는 독립적으로 비치환 또는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, 카르보시클릭 아릴, 헤테로아릴 또는 3급 아미노 아릴 기이고, 이때 단지 1개의 EC만이 화학식 II 또는 화학식 III의 기이다.

본원에서 사용된 용어 "방향족 코어"는 말단 캡핑기가 아닌 화학식 I의 화합물의 부분을 지칭한다. 방향족 코어는 카르보시클릭 아릴렌 기, 헤테로아릴렌 기, 3급 방향족 아미노 아릴렌 기 및 이들의 조합을 포함할 수 있다. 용어 방향족 코어는 임의의 특정한 합성 방법 또는 합성 순서를 의미하는 것은 아니다.

화학식 I의 화합물은 하기 화학식 IV 또는 V의 화합물일 수 있다.



화학식 V



상기 식들에서, Ec, Ar¹, E_y 및 a는 각각 상기에서 정의한 바와 같다.

말단 캡핑기(EC)는 동일하거나 상이할 수 있다.

상기 화합물은 용액 가공성일 수 있으며, 유기 전자 장치에서 사용하기 위해 얇은 필름으로 성형될 수 있다. 일부 실시태양에서, 말단 캡핑기 및 방향족 코어는 비결정질인 화합물을 제공하기 위해 선택될 수 있다.

화학식 I의 화합물은 유기 전자 장치에서 전자 수송체로서 사용될 수 있다. 방향족 코어는 -C=N- 단위를 갖는 하나 이상의 헤테로아릴 기(즉, 화학식 I의 E_y)를 함유한다. -C=N- 단위는 탄소-탄소 이중결합에 비해 전자가 부족한 경향이 있다.

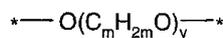
일부 실시태양에서, -C=N- 단위는 화합물에 전자 수송성 및 전자 주입성을 제공할 수 있다. Ar¹ 기 및 말단 캡핑기는 화합물에 추가 기능을 제공하기 위해 선택될 수 있다. 예를 들어, 일부 실시태양에서, 화합물은 전자 수송체 뿐만 아니라 정공 수송 분자로서도 사용될 수 있다. 다른 실시태양에서, 화합물은 전자 수송 분자 뿐만 아니라 발광 분자로서도 사용될 수 있다.

치환기들이 Ar¹-(E_y)_a 기, 말단 캡핑기 또는 이들의 조합상에 존재할 수 있다. 치환기는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 및 이들의 조합에서 선택될 수 있다. 일부 실시태양에서, 화합물은 C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₃₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₃₀ 플루오로알킬, C₁₋₃₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₃₀ 헤테로알킬, C₃₋₃₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로 치환된다. 예를 들어, 화합물은 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로 치환될 수 있다.

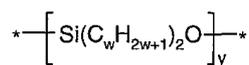
치환기들은, 예를 들어 유기 용매 중의 화합물의 용해도, 본 화합물과 조성물 중의 다른 물질과의 상용성, 용액 가공성, 또는 이들의 조합을 증진시킬 수 있다. 치환기는 용해도 파라미터를 변화시키거나, 이온전위를 변화시키거나, 전자 친화도를 변화시키거나, 원치않는 방출을 생산할 수 있는 분자내 또는 분자간 상호작용을 감소시키거나, 또는 이들의 조합을 야기할 수 있다. 예를 들어, 치환기들은 화합물이 얇은 필름으로 성형될 때, 화합물의 응집 및 상 분리의 억제를 보조할 수 있다.

본 발명의 화합물의 일부 실시태양에서, 치환기는 하기 화학식 VI의 2가 폴리(옥시알킬렌) 연결 부분(soft segment), 또는 하기 화학식 VII의 2가 폴리(디알킬실록산) 연결 부분을 포함할 수 있다.

화학식 VI

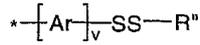


화학식 VII



상기 식들에서, m은 1 내지 6의 정수이고, y는 2 내지 20의 정수이고, w는 1 내지 10의 정수이다. 일부 실시태양에서, 폴리(옥시알킬렌) 또는 폴리(디알킬실록산) 연결 부분은 알킬, 아릴, 또는 헤테로아릴 기와 연결될 수 있다. 예를 들어, 치환기는 하기 화학식 VIII를 가질 수 있다.

화학식 VIII



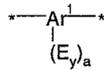
상기 식에서, SS는 폴리(옥시알킬렌) 또는 폴리(디알킬실록산) 연결 부분이고, Ar은 아릴렌 기이고, v는 0 또는 1의 정수이고, R''는 아릴, 헤테로아릴, 또는 알킬이다. 어떤 예에서, R''는 입체적 장애가 있는 기이다. 화학식 VIII에 따른 기는 원치 않는 엑시머(excimer) 또는 엑시플렉스(exciplex) 방출을 생산하는 분자간 또는 분자내 배위의 형성을 감소시킬 수 있다.

다른 실시태양에서, 본 발명의 화합물은 플루오로, C₁₋₃₀ 플루오로알킬 및 C₁₋₃₀ 퍼플루오로알킬에서 선택되는 하나 이상의 기로 치환될 수 있다. 이들 치환기는 화합물의 용해도 및 필름 형성 특성을 개선할 수 있고, 화합물의 이온전위 및 전자 친화도를 증가시킬 수 있으며, 또한 이들의 조합을 야기할 수 있다. 이온전위 및 전자 친화도가 증가된 화합물은 유기 전계 발광 장치에서 사용될 때, 전자를 보다 용이하게 주입하여 정공을 차단할 수 있다. 플루오로, 플루오로알킬, 또는 퍼플루오로알킬 치환기가 또한 화합물의 증기압을 낮출 수 있고, 증착을 더욱 용이하게 할 수 있다.

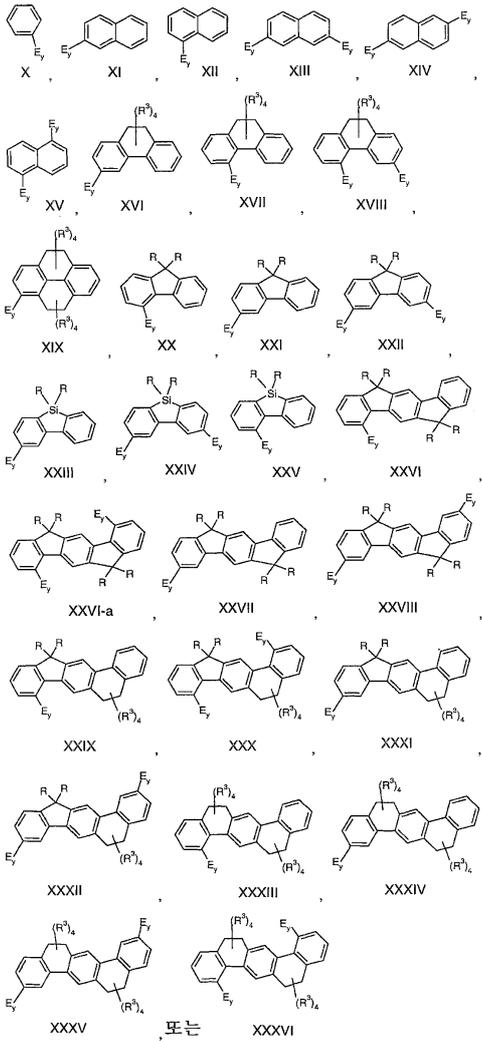
일부 실시태양에서는, 광발광 켄처(quencher)로 알려진 치환기, 예를 들어 아릴 카르보닐 및 니트로 기는 유기 전계발광 장치의 전계발광 효율을 떨어뜨릴 수 있기 때문에 바람직하지 않을 수 있다. 일부 실시태양에서, 전기화학적 제거 반응을 거친다고 알려져 있는 치환기, 예를 들어 알킬 아민은 유기 전계발광 장치의 작동 수명을 감소시킬 수 있기 때문에 바람직하지 않을 수 있다. 일부 실시태양에서, 전기화학적 반응을 거칠 수 있는 적정가능한 양성자를 함유하는 치환기, 예를 들어 1급 또는 2급 아민, 페놀, 알코올 등은 유기 전계발광 장치의 작동 중에 수소로 환원될 수 있기 때문에 바람직하지 않을 수 있다. 수소가 발생하면 캐소드가 박리되고 결국 유기 전계발광 장치의 고장을 야기할 수 있다. 염소, 브롬, 요오드, 보론산 및 보론산 에스테르 치환기는 일부 실시태양에서 전기화학적 불안정을 야기할 수 있다. 그러한 기가 본 발명의 화합물에 불순물로 존재하는 경우, 백만 중량부 당 약 1000 중량부(ppm) 미만의 양으로 존재하여야 한다. 추가로, 파라플루오로페닐과 같은 기는 그러한 기가 비가역적 전기화학적 분해에 민감하기 때문에 일부 적용에서는 바람직하지 않을 수 있다. 그러나, 다른 바람직한 특성을 얻을 수 있다면 이들 기 중 어떤 것을 포함할 수도 있다.

본 발명의 화합물은 방향족 코어에서 하나 이상의 하기 화학식 IX의 기를 함유한다.

화학식 IX



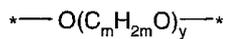
상기 식에서, Ar¹, E_v 및 a는 각각 상기에서 정의한 바와 같다. 화학식 IX의 각각의 기는 독립적으로 페닐렌 기 아릴렌 또는 나프탈렌 기 아릴렌이다. 화학식 IX의 적합한 기는 비치환 또는 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된 하기 화학식 X 내지 XXXVI의 2가 라디칼을 포함하나, 이들로 한정되지 않는다.



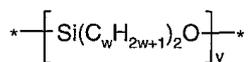
각각의 R은 독립적으로 C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₃₀ 아릴, C₆₋₃₀ 아릴옥시, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 또는 이들의 조합이다. 각각의 R³은 독립적으로 수소, C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₃₀ 아릴, C₆₋₃₀ 아릴옥시, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 및 이들의 조합으로부터 선택된다.

방향족 코어중의 임의의 R 또는 R³ 기는 하기 화학식 VI의 2가 폴리(옥시알킬렌) 연결 부분 또는 하기 화학식 VII의 2가 폴리(디알킬실록산) 연결 부분을 포함할 수 있다.

<화학식 VI>

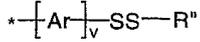


<화학식 VII>



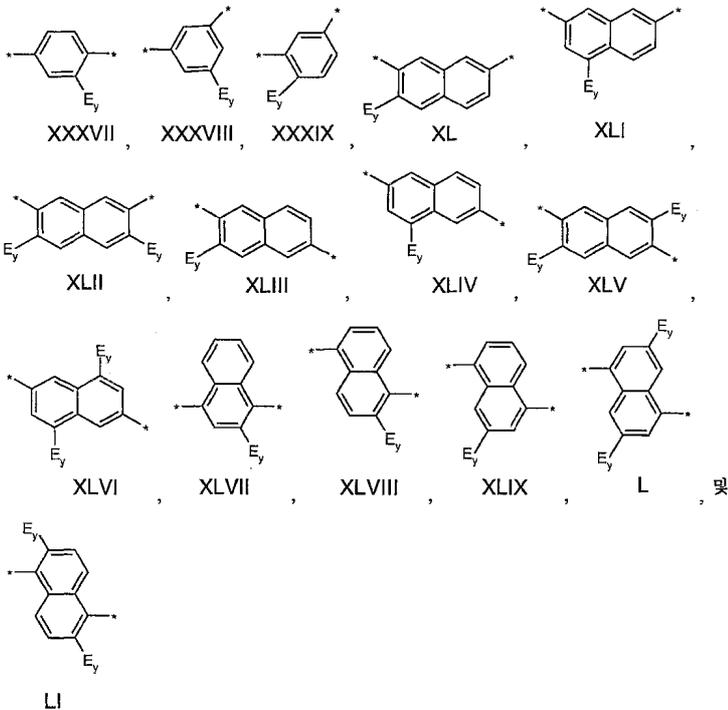
상기 식들에서, m은 1 내지 6의 정수이고, y는 2 내지 20의 정수이고, w는 1 내지 10의 정수이다. 일부 실시태양에서, 폴리(옥시알킬렌) 또는 폴리(디알킬실록산) 연결 부분은 알킬, 아릴 또는 헤테로아릴 기에 연결될 수 있다. 치환기는, 예를 들어 하기 화학식 VIII를 가질 수 있다.

<화학식 VIII>

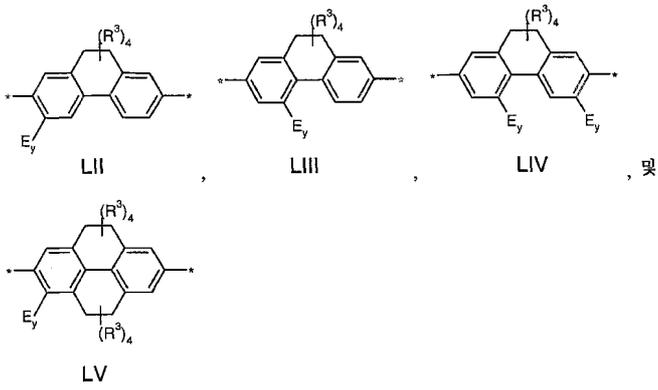


상기 식에서, SS는 폴리(옥시알킬렌) 또는 폴리(디알킬실록산) 연결 부분이고, Ar은 아릴렌 기이고, v는 0 또는 1의 정수이고, R''는 아릴, 헤테로아릴, 또는 알킬이다. 어떤 예에서, R''는 입체적 장애가 있는 기이다. 화학식 VIII에 따른 기는 원치 않는 엑시머 또는 엑시플렉스 방출을 생산하는 분자간 또는 분자내 배위의 형성을 감소시킬 수 있다.

일부 화합물에서, 화학식 IX의 하나 이상의 2가 라디칼은 비치환 또는 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된 하기 화학식 XXXVII 내지 LI로부터 선택될 수 있다.

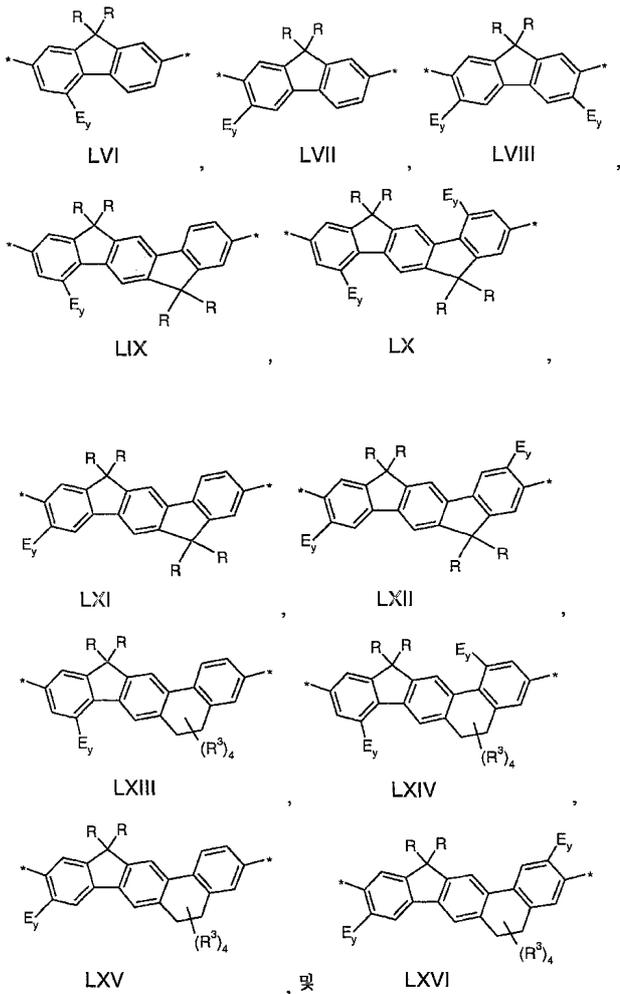


다른 예에서, 화학식 IX의 하나 이상의 2가 라디칼은 비치환 또는 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된 하기 화학식 LII 내지 LV로부터 선택될 수 있다.



각각의 R³은 독립적으로 수소, C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₃₀ 아릴, C₆₋₃₀ 아릴옥시, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 및 이들의 조합으로부터 선택된다.

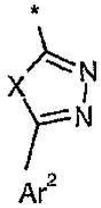
또다른 예에서, 화학식 IX의 하나 이상의 2가 라디칼은 비치환 또는 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된 하기 화학식 LVI 내지 LXVI로부터 선택된다.



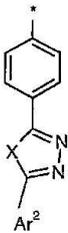
각각의 R은 독립적으로 C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₃₀ 아릴, C₆₋₃₀ 아릴옥시, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 또는 이들의 조합이다. 각각의 R³은 독립적으로 수소, C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₃₀ 아릴, C₆₋₃₀ 아릴옥시, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 및 이들의 조합으로부터 선택된다.

화학식 I에서 각각의 E_y는 하기 화학식 II 또는 화학식 III의 1가 라디칼이다.

<화학식 II>



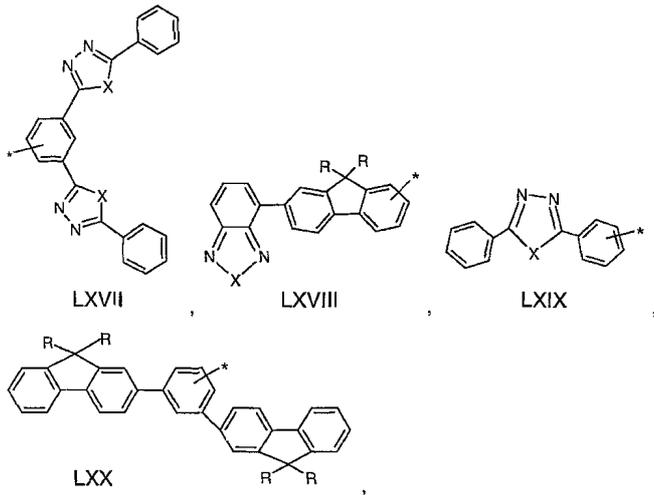
<화학식 III>



상기 식들에서, 각각의 X는 독립적으로 O, S 또는 NR¹이고, 이때 R¹은 알킬, 아릴, 헤테로아릴, 헤테로알킬 또는 이들의 조합이다. 화학식 II 또는 화학식 III에서 각각의 Ar²는 독립적으로 카르보시클릭 아릴 기이다. Ar² 기는 전형적으로 C₆₋₄₀ 카르보시클릭 아릴 기이다. Ar² 기는 Ar²에 포함된 카르보시클릭 방향족 고리를 통해 E_y의 나머지에 결합한다. 즉, Ar²은 화학식 II 및 화학식 III에서 헤테로시클릭 고리에 공액된다.

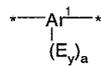
일부 실시태양에서, Ar²는 비치환 또는 하나 이상의 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴, C₃₋₃₀ 알킬 옥사디아졸릴, C₃₋₃₀ 아릴 옥사디아졸릴, C₃₋₂₀ 알킬 트리아졸릴, C₃₋₃₀ 아릴 트리아졸릴, C₃₋₃₀ 디아릴아미노, C₃₋₃₀ 디아릴아미노아릴 또는 이들의 조합으로 치환된, 페닐, 바이페닐, 티페닐, 안트라닐, 나프틸, 아세나프틸, 페난트릴, 디히드로페난트레닐, 안트라세닐, 플루오레닐, 9-실라플루오레닐, 테트라히드로피레닐, 페릴레닐, 스피로비스플루오레닐, 플루오란테닐, 피레닐, 디히드로피레닐, 테트라히드로피레닐, 루브레닐, 크리스세닐, 5,6,12,13-테트라히드로디벤조[a,h]안트라세닐, 6,12-디히드로인덴노[1,2-b]플루오레닐, 5,12-디히드로-6H-인덴노[1,2-b]페난트레닐, 디히드로페난트레닐 및 벤조[g,h,i]페릴레닐로부터 선택된 아릴 기이다.

Ar²의 일부 실시태양은 하나 이상의 C₁₋₂₀ 알킬, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴, C₃₋₃₀ 알킬 옥사디아졸릴, C₃₋₃₀ 아릴 옥사디아졸릴, C₃₋₂₀ 알킬 트리아졸릴 또는 C₃₋₃₀ 아릴 트리아졸릴로 치환된다. 치환된 Ar² 기의 예에는, 예를 들어

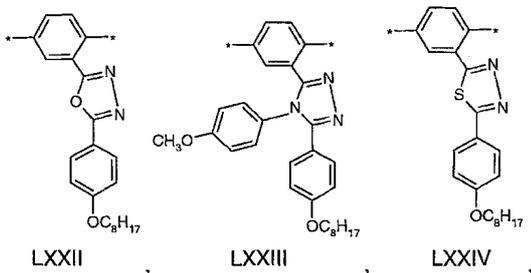
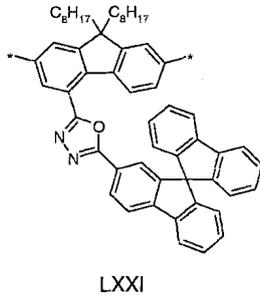


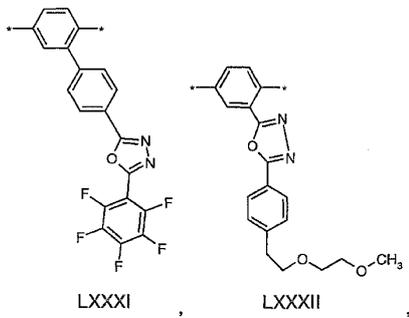
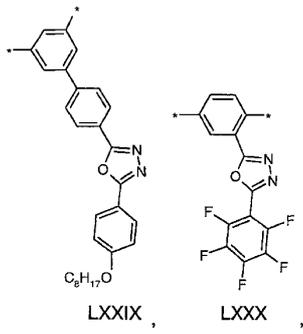
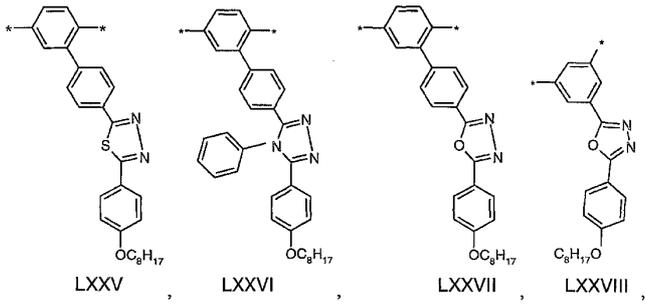
등의 1가 라디칼이 포함된다. 각각의 X는 독립적으로 O, S 또는 NR¹이고, 이때 R¹은 C₁₋₃₀ 알킬, C₆₋₂₀ 아릴, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 또는 이들의 조합이다. 각각의 R은 독립적으로 C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, C₃₋₂₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 또는 이들의 조합이다.

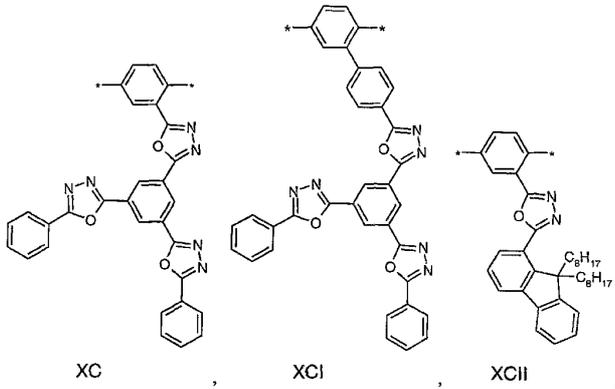
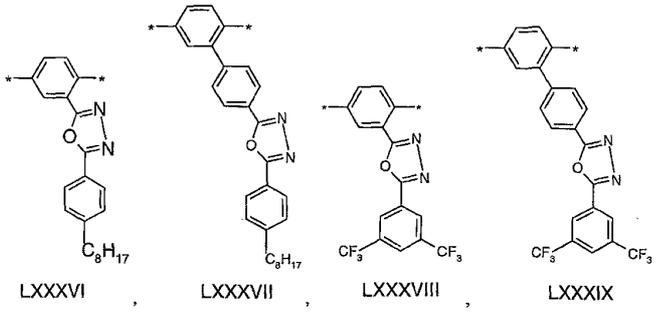
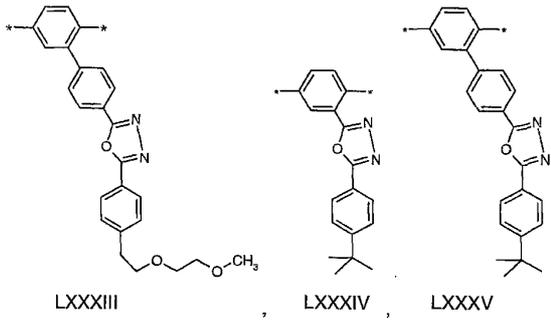
일부 실시태양에서, X는 화학식 II 또는 화학식 III의 헤테로시클릭 고리에서 황 또는 산소이다.

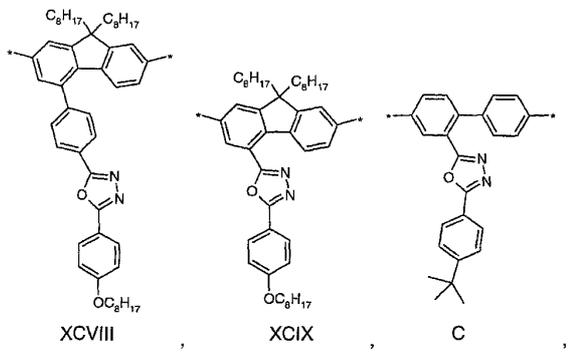
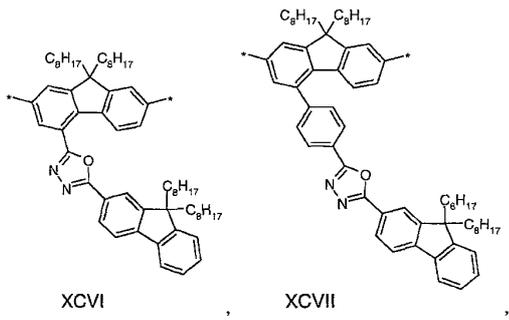
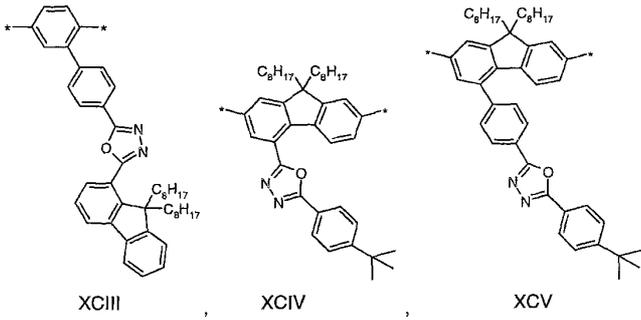


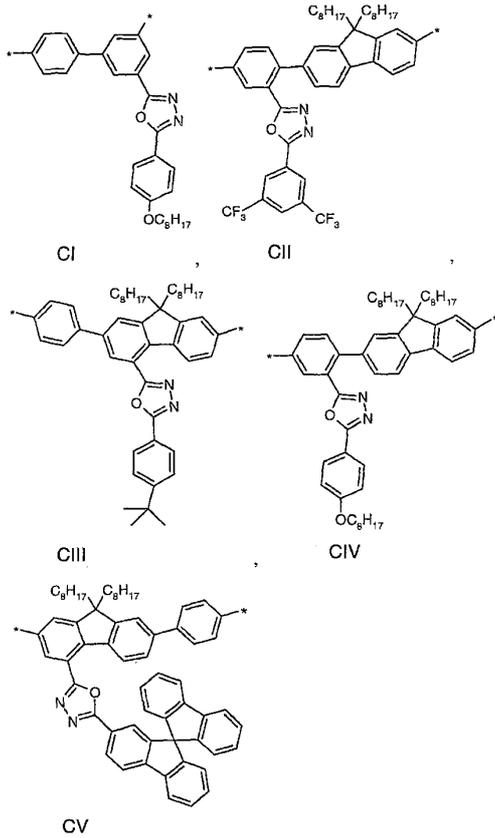
화학식 I에서 화학식 IX 의 2가 라디칼의 구체적인 예에는











등이 포함되나, 이들로 한정되지 않는다.

화학식 I의 말단 캡핑(EC)기들은 각각 비치환 또는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, 카르보시클릭 아릴, 헤테로아릴 및 3급 아미노 아릴 기로부터 독립적으로 선택된다. 말단 캡핑기들은 전형적으로 비치환 또는 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, C₆₋₄₀ 카르보시클릭 아릴, C₃₋₄₀ 헤테로아릴 또는 C₁₂₋₆₀ 3급 방향족 아미노 아릴이다.

상기 말단 캡핑기에 특이적인 탄소 원자의 수는 치환기에 존재할 수 있는 탄소 원자를 포함하지 않는다. 예를 들어, 부틸 기로 치환된 페닐인 말단 캡핑기는 탄소수 6의 카르보시클릭 아릴로 고려될 것이다. 따라서, 카르보시클릭 아릴 말단 캡핑기는 전체로 40개보다 많은 탄소 원자를 가질 수 있다. 마찬가지로, 헤테로아릴 말단 캡핑기는 전체로 40개보다 많은 탄소 원자를 가질 수 있으며, 3급 방향족 아미노 아릴 말단 캡핑기는 전체로 60개보다 많은 탄소 원자를 가질 수 있다.

단지 1개의 말단 캡핑기가 화학식 II 또는 화학식 III이다. 일부 실시태양에서, 말단 캡핑기는 화학식 II도 화학식 III도 아니다. 말단 캡핑기들은 모두 방향족 코어에 공액된다. 각각의 말단 캡핑기와 방향족 코어 사이의 결합은 전형적으로 방향족 코어의 방향족 고리를 각각의 말단 캡핑기의 방향족 고리와 연결시키는 탄소-탄소 단일결합이다.

적합한 C₆₋₄₀ 카르보시클릭 아릴 말단 캡핑기는 비치환 또는 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, 페닐, 바이페닐, 터페닐, 안트릴, 나프틸, 아세나프틸, 페난트릴, 디히드로페난트레닐, 안트라세닐, 플루오레닐, 9-실라플루오레닐, 테트라히드로피레닐, 페릴레닐, 스피로비스플루오레닐, 플루오란테닐, 피레닐, 디히드로피레닐, 테트라히드로피레닐, 루브레닐, 크리세닐 또는 벤조[g,h,i]페릴레닐을 포함하나, 이들로 한정되지 않는다.

적합한 말단 C₃₋₄₀ 헤테로아릴 캡핑기는 비치환 또는 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터

선택된 하나 이상의 기들로 치환된, 푸라닐, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 티아졸릴, 옥사졸릴, 이속사졸릴, 옥사디아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 피리디닐, 피리다지닐, 피라지닐, 피리미디닐, 퀴놀리닐, 이소퀴놀리닐, 벤조푸라닐, 벤조티오펜일, 인돌릴, 카르바졸릴, 벤족사졸릴, 벤조티아졸릴, 벤즈이미다졸릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 프탈라지닐, 벤조티아디아졸릴, 벤조트리아지닐, 펜아지닐, 페난트리아지닐, 아크리디닐, 인다졸릴 또는 실을을 포함하나, 이들로 한정되지 않는다.

적합한 C₁₂₋₆₀ 3급 방향족 아미노 아릴 말단 캡핑기는 비치환 또는 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, 디아릴아닐린, 알킬카르바졸, 아릴카르바졸, 테트라아릴디아민, 스타르버스트 아민, 피아릴트리아민, 덴드리틱 아민, 스피로아민 등의 1가 라디칼을 포함하나, 이들로 한정되지 않는다. 예를 들어, 3급 방향족 아미노 아릴 기는 N,N,N',N'-테트라아릴벤지딘, N,N,N',N'-테트라아릴-1,4-페닐렌디아민, N,N,N',N'-테트라아릴-2,7-디아미노플루오렌, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)벤지딘, N,N'-비스(1-나프틸)-N,N'-비스(페닐)벤지딘, 1,4-비스(카르바졸릴)바이페닐, 4,4',4"-트리스(N,N-디아릴아미노)트리페닐아민, 1,3,5-트리스(4-디아릴아미노페닐)벤젠, 4,4',4"-트리스(N,N-디페닐아미노)트리페닐아민, 4,4',4"-트리스(N-3-메틸페닐-N-페닐아미노)트리페닐아민, 1,3,5-트리스(4-디페닐아미노페닐)벤젠 등의 1가 라디칼일 수 있다.

화학식 I의 일부 실시태양에서, 말단 캡핑기는 최고 점유 분자 궤도함수(HOMO) 및 최저 비점유 분자 궤도함수(LUMO) 사이의 큰 밴드갭(bandgap)을 제공할 수 있다. 본원에서 사용된 바와 같이, 큰 밴드갭이란 2.5 eV 이상의 HOMO 및 LUMO 사이의 에너지 차이를 지칭한다. 일부 실시태양에서, 에너지 차이는 3 eV 이상이다. 큰 밴드갭은 화합물을 발광 분자로서 사용하기에 적합하게 만드는 경향이 있다.

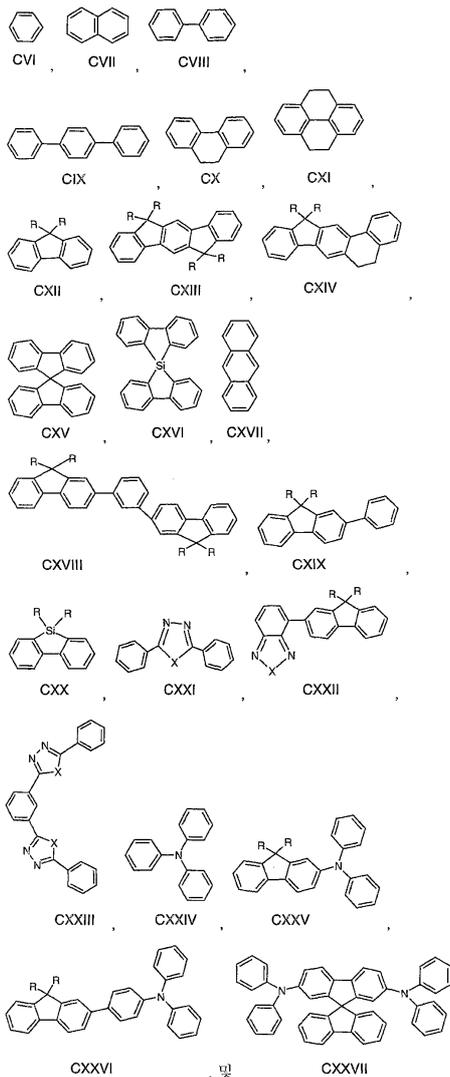
일부 카르보시클릭 아릴 말단 캡핑기(예를 들어, 페닐렌 기 아릴, 나프탈렌 기 아릴 및 축합 폴리시클릭 아릴)는 방향족 코어에 매우 적합한, 최고 점유 분자 궤도함수(HOMO)에 대해서는 전자 친화도 그리고 최저 비점유 분자 궤도함수(LUMO)에 대해서는 이온전위를 제공할 수 있다. HOMO 및 LUMO 사이의 이러한 에너지 적합성 및 큰 밴드갭은 큰 밴드갭을 갖는 분자가 전자 수송제, 정공 차단제, 분자상 또는 중합체상 청색 방출제용 분자 호스트(host), 또는 청색 방출 전계발광 분자로서 사용하기에 바람직한 경우에 특히 유리하다. 또한, 일부 카르보시클릭 아릴 말단 캡핑기는 전계발광의 색상 이동(shifting)을 유발시킬 수 있는 엑시머 또는 엑시플렉스 방출을 생성하는 분자간 또는 분자내 배위의 형성을 감소시키기 위해 충분하게 입체적으로 장애될 수 있다.

일부 말단 캡핑기는 정공을 수송하거나 전자의 수송을 차단하는 기능을 할 수 있다. 이러한 말단 캡핑기는, 예를 들어 전자가 풍부한 헤테로아릴 기 및 3급 방향족 아미노 아릴 기를 포함할 수 있다. 이러한 말단 캡핑기를 사용하면 정공 및 전자 수송 효율을 조화시키거나 본 발명의 화합물의 이온전위 및(또는) 전자 친화도를 조율할 수 있다. 상기 말단 캡핑기는 상기 화합물의 밴드 갭 및(또는) 전계발광 특성을 증진시키거나 변형시킬 수 있다. 말단 캡핑기를 사용하여, 예를 들어 조성물에서 상기 화합물 또는 다른 화합물의 발광색을 조율할 수 있다. 특정한 헤테로아릴 및 3급 방향족 아미노 아릴 말단 캡핑기들은 가시광선 스펙트럼의 적색, 녹색 또는 청색 영역들에서 발광하는 화합물을 제공할 수 있다.

축합 폴리시클릭 아릴렌은 -C=N- 단위를 갖는 헤테로아릴렌과 함께 말단 캡핑기에 포함되어, 일부 화합물에서는 엑시톤(exciton) 재조합 및 방출을 위한 중심을 제공할 수 있다. 일부 화합물에서, 축합 폴리시클릭 아릴렌 또는 아릴 기를 -C=N- 단위를 갖는 헤테로아릴렌 또는 헤테로아릴 기와 조합하여 도입시키면 색 조율을 제공할 수 있다. 예를 들어, 안트라센, 페릴렌 및 피렌으로부터 유도된 축합 폴리시클릭 아릴렌 또는 아릴은 벤조티아디아졸로부터 유도된 인접한 헤테로아릴렌 또는 헤테로아릴과 조합될 수 있다.

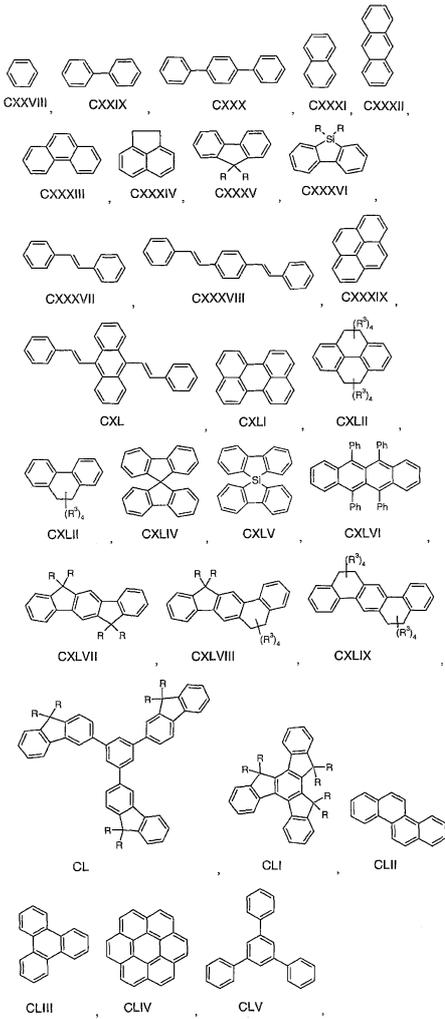
다른 실시태양에서, 말단 캡핑기는 전자를 수송하거나 정공의 수송을 차단하는 기능을 할 수 있다. 이러한 말단 캡핑기는, 예를 들어 옥사디아졸, N-치환된-트리아졸, N-치환된 이미다졸, N-치환된 피라졸, 옥사졸, 이속사졸, 티아졸, 이소티아졸, 피리딘, 피리다진, 피리미딘, 피라진, 트리아진, 테트라젠, 벤족사졸, 벤조티아졸, 벤조티아디아졸, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 신놀린, 퀴나졸린, 퀴녹살린, 프탈라진, 벤조트리아진, 펜아진, 페난트리아진, 아크리딘 등의 라디칼과 같은 -C=N- 단위를 갖는 헤테로시클릭 화합물의 라디칼을 포함할 수 있다.

일부 화학식 I의 화합물에서, 양 말단 캡핑기는 비치환 또는 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, 하기 화학식 CVI 내지 CXXVII의 1가 라디칼들로부터 독립적으로 선택된다.



각각의 R은 독립적으로 C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₃₀ 아릴, C₆₋₃₀ 아릴옥시, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 및 이들의 조합으로부터 선택된다. 각각의 X는 독립적으로 O, S 또는 NR¹이고, 이때 R¹은 C₁₋₃₀ 알킬, C₆₋₂₀ 아릴, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 또는 이들의 조합이다.

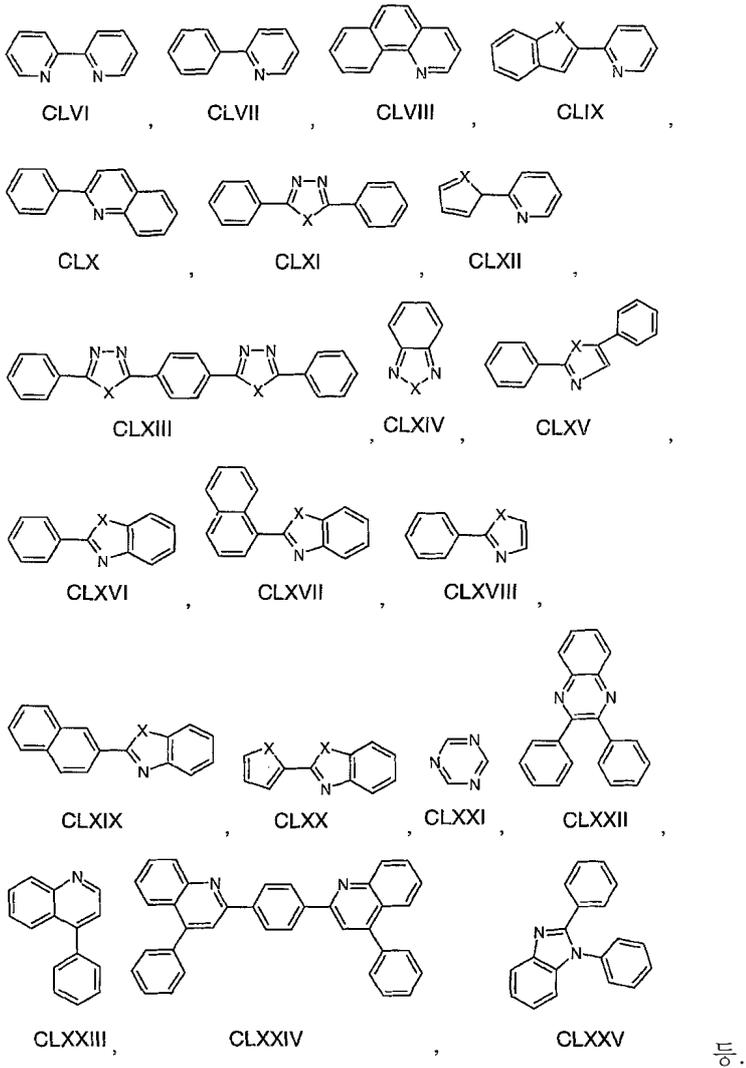
말단 캡핑기의 일부 실시태양에서, 카르보시클릭 아릴렌 기는 화학식 CVI 내지 CXXVII의 기에 공액된다. 카르보시클릭 아릴렌 기는 방향족 코어와 화학식 CVI 내지 CXXVII의 기 사이에 존재한다. 예를 들어, 화학식 CVI 내지 CXXVII의 기는 비치환 또는 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된 하기 화학식 CXXVIII 내지 CLV 등의 2가 라디칼에 공액될 수 있다.



등.

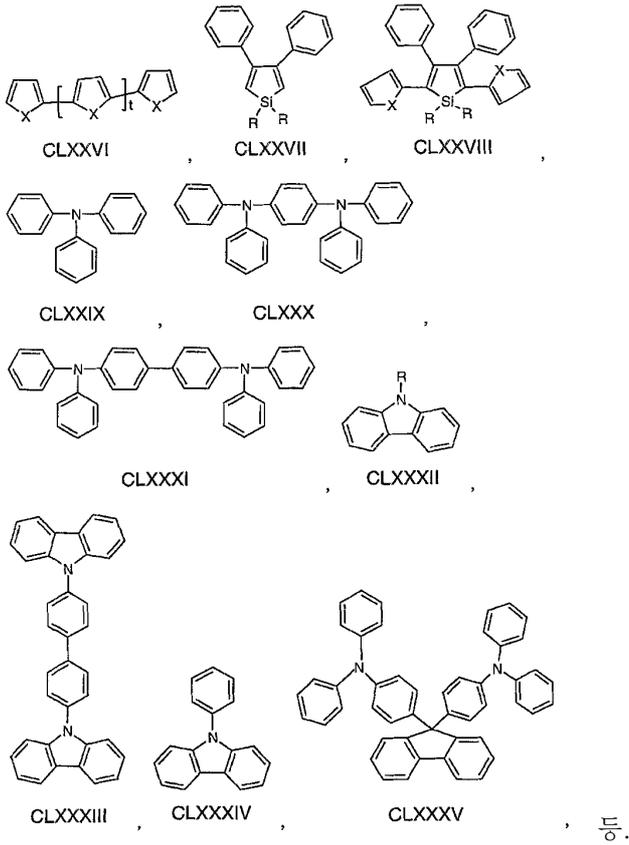
이들 식에서, Ph란 기호는 페닐 고리를 지칭한다. 각각의 R은 독립적으로 C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₃₀ 아릴, C₆₋₃₀ 아릴옥시, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 및 이들의 조합으로부터 선택된다. 각각의 R³은 독립적으로 수소, C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₃₀ 아릴, C₆₋₃₀ 아릴옥시, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 및 이들의 조합으로부터 선택된다.

1가 말단 캡핑기의 다른 실시태양에서, 화학식 CVI 내지 CXXXVII에 따른 기는 -C=N= 단위를 갖는 기에 공액될 수 있다. -C=N- 단위를 갖는 기는 방향족 코어와 화학식 CVI 내지 CXXXVII의 기 사이에 존재한다. 예를 들어, 화학식 CVI 내지 CXXXVII의 기는 비치환 또는 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된 하기 화학식 CLVI 내지 CLXXV 등의 2가 라디칼에 공액될 수 있다.



각각의 X는 독립적으로 O, S 또는 NR¹이고, 이때 R¹은 C₁₋₃₀ 알킬, C₆₋₂₀ 아릴, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 또는 이들의 조합이다.

1가 말단 캡핑기의 또다른 실시태양에서, 화학식 CVI 내지 CXXVII에 따른 기는 전자가 풍부한 헤테로아릴렌 또는 3급 방향족 아미노 아릴렌에 공액될 수 있다. 헤테로아릴렌 또는 3급 방향족 아미노 아릴렌은 방향족 코어와 화학식 CVI 내지 CXXVII의 기 사이에 위치한다. 예를 들어, 화학식 CVI 내지 CXXVII의 기는 비치환 또는 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된 하기 화학식 CLXXVI 내지 CLXXXV 등의 라디칼에 공액될 수 있다.

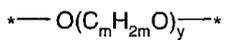


각각의 R은 독립적으로 C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₃₀ 아릴, C₆₋₃₀ 아릴옥시, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 및 이들의 조합으로부터 선택된다. 각각의 X는 독립적으로 O, S 또는 NR¹이고, 이때 R¹은 C₁₋₃₀ 알킬, C₆₋₂₀ 아릴, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 또는 이들의 조합이다. 각각의 t는 0 내지 4의 정수이다.

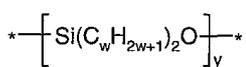
화학식 CVI 내지 CXXVII의 기를 말단 캡핑기로부터 또다른 기와 조합시키는 경우, 화학식 I의 화합물을 제조하는데 있어서 어떠한 합성 순서나 합성 방법도 포함되지 않는다. 제 2 기(예를 들어, 화학식 CXXVIII 내지 CLXXXV의 기)를 방향족 코어에 부착시킨 후 화학식 CVI 내지 CXXCVII의 기에 부착시키거나, 또는 제 2 기를 말단 캡핑기(예를 들어, 화학식 CVI 내지 CXXVII의 기)의 나머지에 부착시킨 후 방향족 코어에 부착시킬 수 있다.

말단 캡핑기상의 임의의 R 또는 R³ 기는 하기 화학식 VI의 2가 폴리(옥시알킬렌) 연결 부분 또는 하기 화학식 VII의 2가 폴리(디알킬실록산) 연결 부분을 포함할 수 있다.

<화학식 VI>

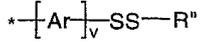


<화학식 VII>



상기 식들에서, m은 1 내지 6의 정수이고, y는 2 내지 20의 정수이고, w는 1 내지 10의 정수이다. 일부 실시태양에서, 폴리(옥시알킬렌) 또는 폴리(디알킬실록산) 연결 부분은 알킬, 아릴, 또는 헤테로아릴 기와 연결될 수 있다. 예를 들어, 치환기는 하기 화학식 VIII를 가질 수 있다.

<화학식 VIII>



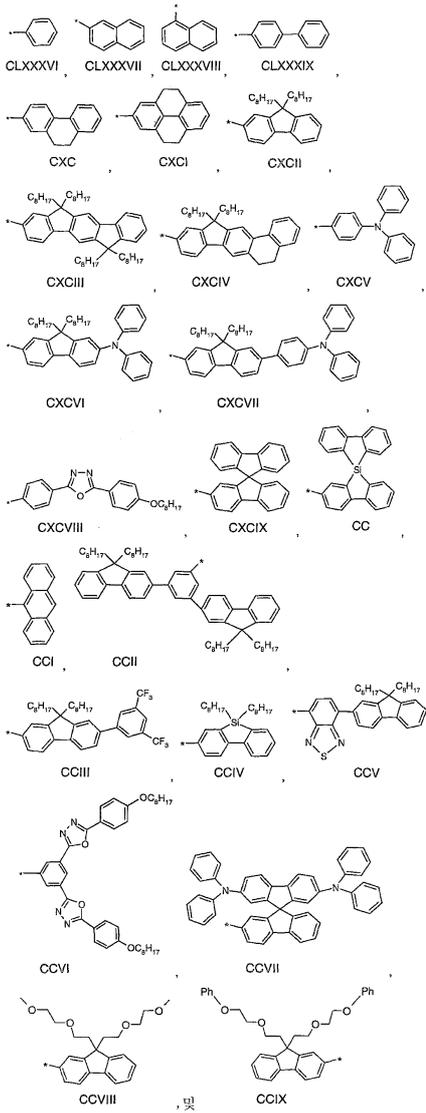
상기 식에서, SS는 폴리(옥시알킬렌) 또는 폴리(디알킬실록산) 연결 부분이고, Ar은 아릴렌 기이고, v는 0 또는 1의 정수이고, R''는 아릴, 헤테로아릴, 또는 알킬이다. 어떤 예에서, R''는 입체적 장애가 있는 기이다. 화학식 VIII에 포함되는 것과 같은 기들은 원치않는 엑시머 또는 엑시플렉스 방출을 생산하는 분자간 또는 분자내 배위의 형성을 감소시킬 수 있다.

유기 전계발광 장치를 제조하는 일부 방법에서, 본 발명의 화합물은 공여자 기관으로부터 수용자 기관으로 열 전달된다. 예를 들어, 폴리(옥시알킬렌) 또는 폴리(디알킬실록산) 연결 부분을 갖는 화합물은 수용자 기관에 적합한 적절한 용해도 파라미터를 제공할 수 있다. 또한 또는 또다르게는, 이들 연결 부분들은 열전달 또는 필름 안정성에 유용한 다른 특성들, 예를 들어 경우에 따라 분자량, 용융 온도, 유리 전이 온도, 결정도 백분율 및 결정화되거나 응집체를 형성하는 경향, 점도, 얇은 필름 형태, 레올로지 특성(예를 들어, 용융 점도 및 이완 시간), 엑시머 및 엑시플렉스 형성, 응집 강도 및 발광 주기를 변경시킬 수 있다. 일부 화합물에서, 폴리(옥시알킬렌) 기 또는 폴리(디알킬실록산) 연결 부분들은 열전달 및 분자 필름 또는 블렌드의 PEDT 및 PANI(이들은 유기 전계발광 장치 구성에서 애노드 완충층으로 통상적으로 사용된다)와 같은 상업적으로 구입가능한 전도성 이온 중합체에 대한 접착성을 개선시킬 수 있다.

일부 화합물에서, 말단 캡핑기는 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기로 치환될 수 있다. 이들 치환기는 화합물의 증기압을 더 낮춰 화합물을 증착에 더욱 적합하게 만들 수 있다. 이들 치환기는 화합물의 용해도 및 필름 형성 특성을 개선시킬 수 있다. 이들 치환기는, 일부 화합물에서 이온전위 및 전자 친화도를 증가시켜, 화합물이 더욱 용이하게 전자를 주입하고 정공을 차단하게 만들 수 있다.

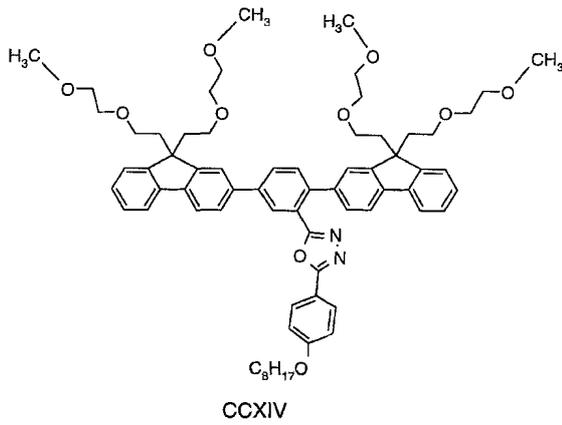
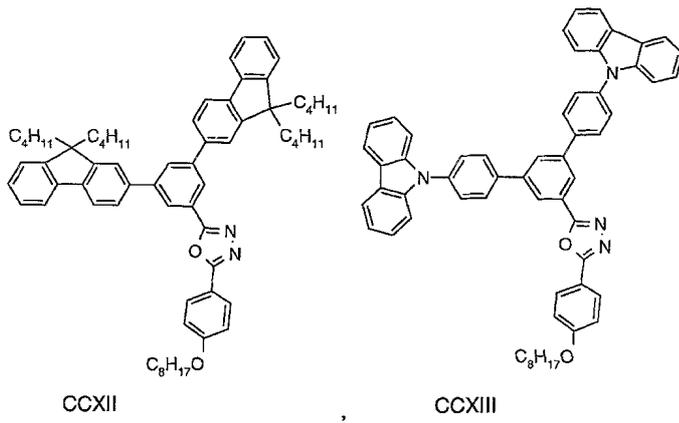
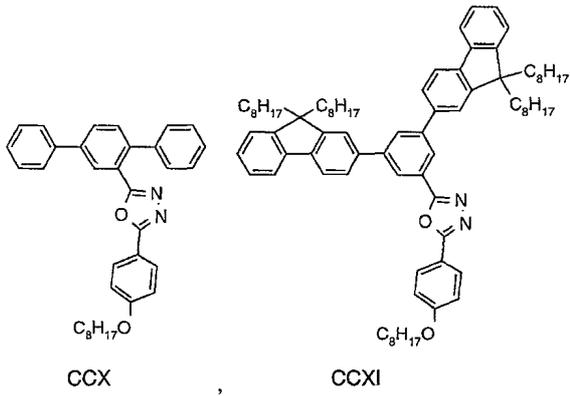
2개의 말단 캡핑기들은 동일하거나 상이할 수 있다. 화학식 I의 일부 실시태양에서, 양 말단 캡핑기(EC)들은 동일하다. 다른 실시태양에서, 말단 캡핑기는 동일한 기본 구조를 가지지만, 한 말단 캡핑기에 존재하는 치환기는 다른 캡핑기에는 존재하지 않을 수 있다. 또다른 실시태양에서, 2개의 말단 캡핑기는 동일한 기본 구조를 가지며, 각각의 말단 캡핑기는 동일한 유형의 치환기(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 또는 이들의 조합)를 가지지만, 상기 치환기들은 상이한 수의 탄소 원자를 함유한다.

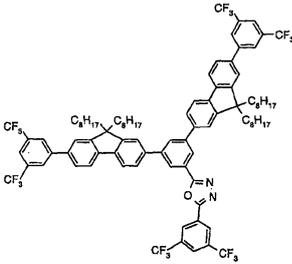
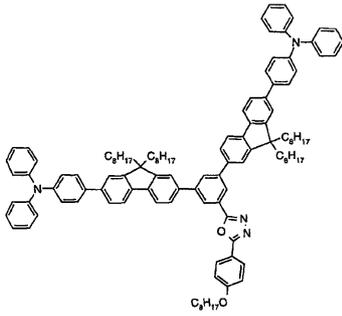
일부 실시태양에서, 양 말단 캡핑기들은



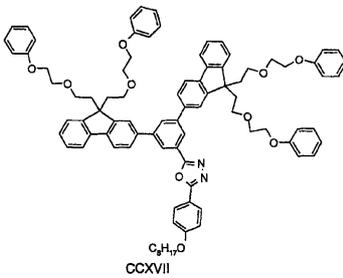
로부터 선택된다.

화학식 I에 따른 화합물의 구체적인 예에는





, 또는

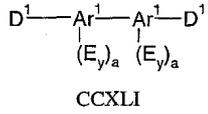
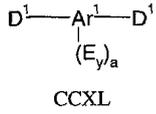


이 포함되나, 이들로 한정되지 않는다.

화학식 I의 화합물은 당업계에 공지된 임의의 방법에 의해 제조할 수 있다. 일부 실시태양에서, 상기 화합물은 방향족 코어의 디브로미드 또는 디클로리드 중간체를 말단 캡핑기의 보론산 또는 보론산 에스테르 중간체와 본원에 그 전체가 참고로 인용된 문헌[Suzuki 등, *Chemical Reviews*, **95**, 2457-2483 (1995)]에 의해 교시된 바와 같은 스즈키 커플링(Suzuki coupling) 방법을 사용하는 팔라듐 촉매화 조건하에서 반응시켜 제조된다.

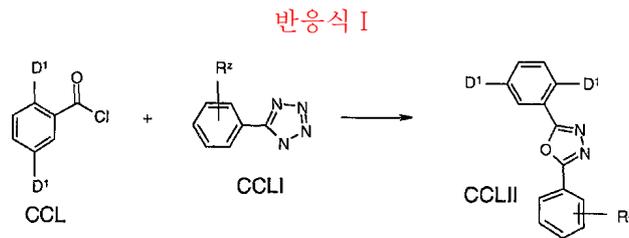
화학식 I의 화합물은 또한 아릴 디브로미드 또는 요오디드를 아릴 그리냐르(Grignard) 시약 (문헌[Widdowson, D. A., Zhang, Y., *Tetrahedron*, **42**, 2111 (1986)] 참조), 아릴주석 화합물 (본원에 참고로 인용된 문헌[Beiley, T. R., *Tetrahedron Lett.*, **27**, 4407 (1986)] 참조) 및 아릴수은 화합물 (본원에 참고로 인용된 문헌[Bumagin, N. A., More, P. G., Beletskaya, I. P., *J. Organomet. Chem.*, **364**, 231 (1986)] 참조)과 반응시켜 제조할 수 있다. 아릴 술폰은 니켈 촉매의 존재하에 임의의 그리냐르 시약과 커플링될 수 있다 (본원에 참고로 인용된 문헌[Clayden, J., Cooney, J. J. A., Julia, M., *J. Chem. Soc., Perkin Trans.*, **1**, 7 (1995)] 참조). 일부 실시태양에서, EC는 한 번에 1개씩 방향족 코어에 커플링될 수 있다. 일부 실시태양에서, 방향족 코어를 말단 캡핑기의 일부분에 커플링시킬 수 있으며, 이어서 말단 캡핑기의 나머지 부분을 이후 단계에서 첨가할 수 있다.

방향족 코어의 디할로젠화 중간체는 다음을 포함한다.



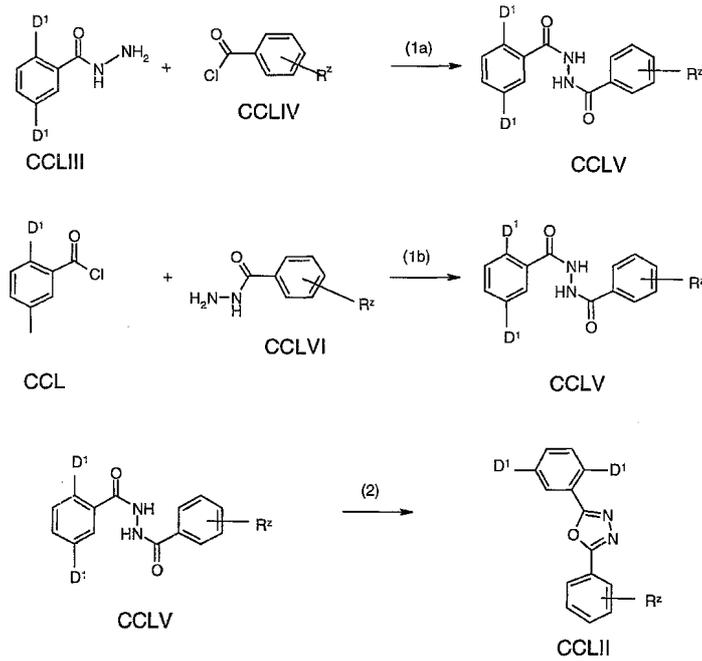
상기 식들에서, D¹은 브로미드 또는 클로리드라고, Ar¹-(E_y)_a는 전술한 바와 같다.

화학식 CCLII의 디할로겐화 1,3,4-옥사디아졸은 하기 반응식 I에 나타난 바와 같이 치환된 테트라졸을 아실화시켜 합성할 수 있다. 화학식 CCL의 디할로아로일 클로리드를 피리딘과 같은 비활성 용매중에서 약 12시간 동안 가열하여 화학식 CCLI의 치환된 테트라졸과 반응시켜 (문헌[Myznikov 등, *J. Gen. Chem. USSR*(영문 번역문), **62** (6), 1125-1128 (1992)]) 화학식 CCLII의 디할로겐화된 옥사디아졸 중간체를 형성한다. D¹은 할로겐이고, R²는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴, 알킬 옥사디아졸릴, 아릴 옥사디아졸릴, 알킬 트리아졸릴, 아릴 트리아졸릴, 디아릴아미노, 아릴디아릴아미노 및 이들의 조합의 기로부터 선택된 임의적인 치환기이다. 화학식 CCLI의 테트라졸은 환류하여 N,N-디메틸포름아미드(DMF)중에서 상응하는 니트릴을 NaN₃ 및 NH₄Cl과 반응시켜 제조할 수 있다.

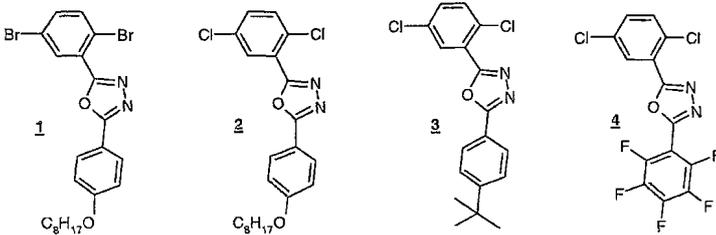


별법적으로, 화학식 CCLII의 화합물은 하기 반응식 II (문헌[Grekow 등, *J. Gen. Chem. USSR*(영문 번역문), **30**, 3763-3766 (1960)]) (이때, D¹ 및 R²는 전술한 바와 같다)에 나타난 바와 같이 벤조일아로일히드라이드를 축합환화시켜 제조할 수 있다. 반응식 II의 단계 (1a)에서, 화학식 CCLIII의 디할로아로일 히드라이드를 1당량의 트리에틸아민을 포함하는 디클로로메탄(DCM)중에서 실온에서 화학식 CCLIV의 임의로 치환된 벤조일클로리드와 반응시켜 화학식 CCLV의 벤조일아로일히드라이드를 형성한다. 별법적으로, 반응식 II의 단계 (1b)에서는, 화학식 CCL의 디할로아로일 클로리드를 화학식 CCLVI의 치환된 벤조일 히드라이드 화합물과 반응시켜 화학식 CCLV의 벤조일아로일히드라이드를 형성한다. 단계 (2)에서, 화학식 CCLV의 벤조일아로일히드라이드를 인 옥시클로리드와 환류하여 반응시켜 화학식 CCLII의 디할로겐화 옥사디아졸 중간체를 형성한다.

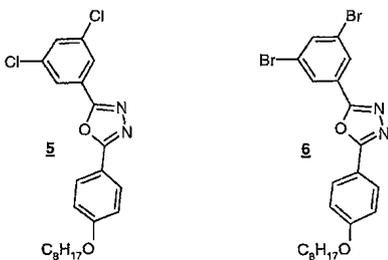
반응식 II



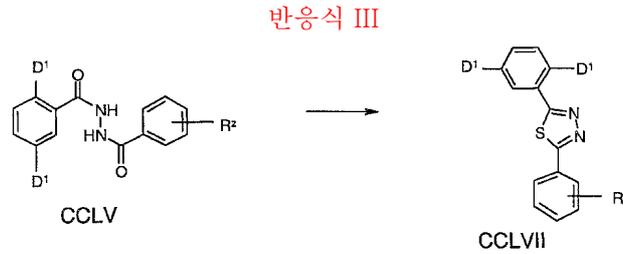
예를 들어, 하기 전자 수송 중간체들(1, 2, 3 및 4)은 상응하는 2,5-디할로벤조일 클로리드를 적절하게 치환된 벤조일 히드라지드와 축합시켜 제조하였다.



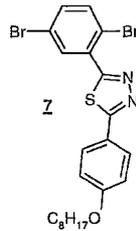
1,3-디할로젠화 중간체들은 유사하게 제조된다. 예를 들어, 전자 수송 중간체 2-(3,5-디클로로페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸(5) 및 2-(3,5-디브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸(6)은 상응하는 3,5-디할로벤조일 클로리드를 4-옥틸옥시벤조일 히드라지드와 축합한 후, 중간체 3,5-디할로-N'-[4-(옥틸옥시)벤조일]-벤조히드라지드와 축합환화시켜 제조하였다. 모노할로젠화 1,3,4-옥사디아졸 말단 캡핑기 중간체들은 상응하는 모노할로젠화 전구체들로부터 유사하게 제조하였다.



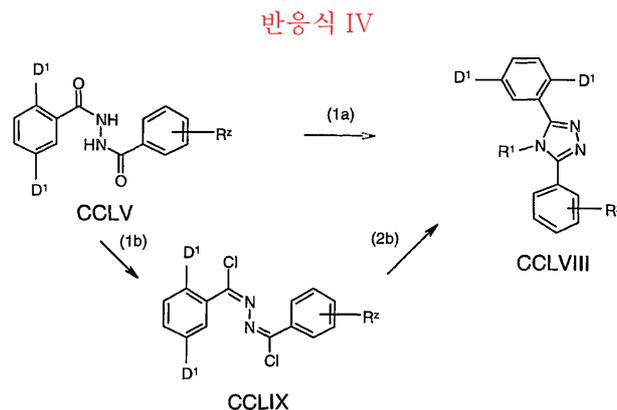
화학식 CCLVII의 디할로젠화 1,3,4-티아디아졸 중간체는 하기 반응식 III(문헌[A. T. Prudchenko, *J. Gen. Chem. USSR* (영문 번역문), **37**, 2082-2084(1967)]) (이때, D¹ 및 R²는 반응식 I에서 정의된 바와 같다)에 나타난 바와 같이 벤조일아로일히드라지드 중간체를 축합환화시켜 제조할 수 있다. 반응식 III에서, 화학식 CCLV의 벤조일아로일히드라지드 중간체를 상호교환 조건하에 P₂S₅와 반응시켜 화학식 CCLVII의 1,3,4-티아디아졸을 제공한다.



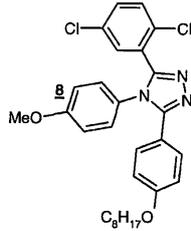
예를 들어, 상응하는 3-(2,5-디브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-티아디아졸(7)을 이러한 방식으로 제조할 수 있다. 모노할로젠화 1,3,4-티아디아졸 말단 캡핑기 중간체는 상응하는 모노할로젠화 전구체들로부터 유사하게 제조된다.



화학식 CCLVIII의 디할로젠화 1,3,4-트리아졸 중간체는 하기 반응식 IV(문헌[E. Klingsberg, *J. Org. Chem.*, **23**, 1086(1958)]) (이때, D¹ 및 R²는 반응식 I에서 정의한 바와 같고, R¹은 아릴, 알킬, 헤테로아릴 또는 헤테로알킬이다)에 나타난 바와 같이 벤조일아로일히드라지드 중간체를 축합환화시켜 제조할 수 있다. 반응식 IV의 단계 (1a)에서, 화학식 CCLV의 벤조일아로일히드라지드 중간체를 승온, 예를 들어 150°C에서 R¹NH₂(이때, R¹은 아릴 또는 헤테로아릴이다)의 존재하에 인 트리클로리드와 반응시켜 화학식 CCLVIII의 1,3,4-트리아졸을 제공한다. 별법적으로, 반응식 IV의 단계 (1b)에서는, 벤조일아로일히드라지드를 빙초산(문헌[Moss 등, *J. Chem. Soc. Perkin Trans.*, **1**(9), 1999-2006 (1982)]) 또는 다른 비-반응성 용매중에서 염소와 반응시켜 화학식 CCLIX의 1,4-디클로로-1,4-디페닐 화합물을 형성한다. 반응식 IV의 단계 (2b)에서, 화학식 CCLIX의 1,4-디클로로-1,4-디페닐 화합물을 R¹NH₂(문헌[Gautun 등, *Acta Chem. Scand.*, **45**(6), 609-615 (1991)]) (이때, R¹은 알킬 또는 아릴알킬이다)와 반응시켜 화학식 CCLVIII의 상응하는 1,3,4-트리아졸을 제공한다.

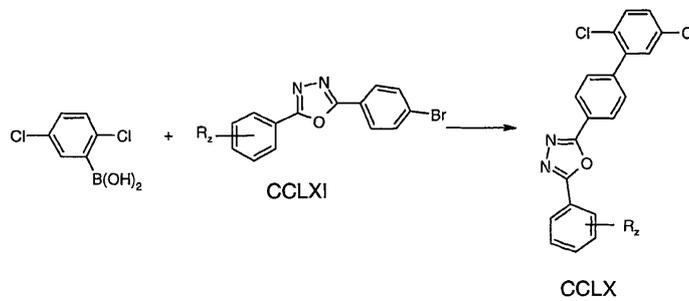


예를 들어, 트리아졸 유도체 3-(2,5-디클로로페닐)-4-(4-메톡시페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-4H-1,2,4-트리아졸(8)을 상기 방법에 의해 제조하였다. 모노할로젠화 1,3,4-트리아졸 말단 캡핑기 중간체는 상응하는 모노할로젠화 전구체로부터 유사하게 제조된다.

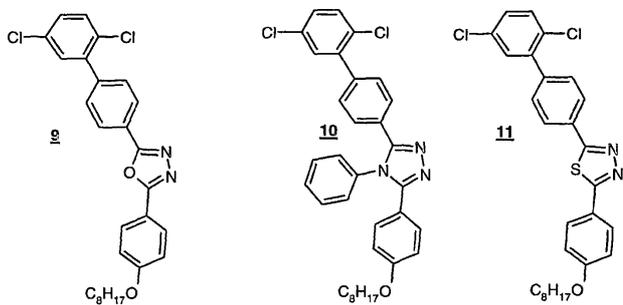


화학식 CCLX의 디할로겐화 1,3,4-옥사디아졸 중간체는 하기 반응식 V에 나타난 바와 같이 일작용성 디아릴옥사디아졸을 디할로아릴렌의 모노보론산/에스테르와 스즈키 커플링시킴으로써 합성할 수 있다. 반응식 V (이때, R^Z는 반응식 I에서 정의된 바와 같다)에서, 2,5-디클로로페닐 보론산을 테트라히드로푸란과 같은 비활성 용매중에서 팔라듐 비스(트리페닐포스핀)디클로리드 및 탄산나트륨의 존재하에 가열하면서 화학식 CCLXI의 일작용성 2-(4-브로모페닐)-1,3,4-옥사디아졸과 반응시켜 화학식 CCLX의 디할로겐화 1,3,4-옥사디아졸 중간체를 형성한다. 2,5-디클로로페닐 보론산은 1-브로모-2,5-디클로로벤젠을 부틸 리튬과 반응시킨 후, 트리메틸 보레이트와 반응시키고 이어서 산성화시킴으로써 제조할 수 있다.

반응식 V

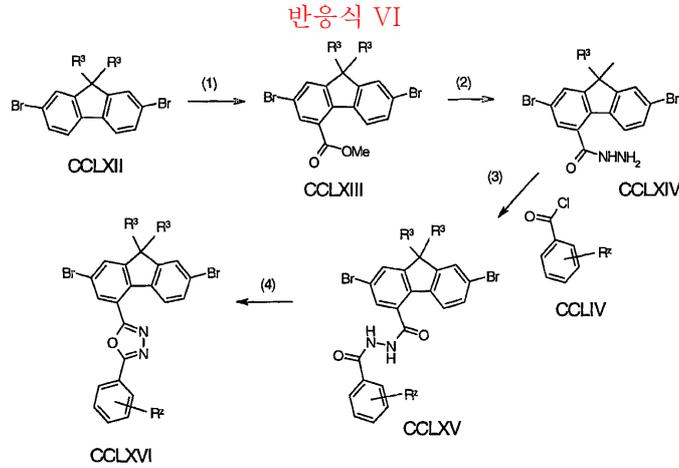


예를 들어, 전자 수송 중간체 2-(2',5'-디클로로-1,1'-바이페닐-4-일)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸(9)은 2,5-디클로로페닐 보론산을 2-(4-브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸과 표준 스즈키 커플링 조건하에 반응시킴으로써 제조할 수 있다. 상응하는 1,3,4-티아디아졸(11)은 2,5-디클로로페닐 보론산을 2-(브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-티아디아졸과 표준 스즈키 커플링 조건하에 반응시킴으로써 유사하게 제조할 수 있다. 또한, 상응하는 트리아졸 화합물(10)은 2,5-디클로로페닐 보론산을 일작용성 3-(4-브로모페닐)-4-(4-페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-4H-1,2,4-트리아졸 중간체와 반응시킴으로써 유사하게 제조할 수 있다. 화학식 CCLX의 디클로로 중간체는 할로젠 교환에 의해, 예를 들어 촉매량의 FeBr₃ (문헌[Yoon 등, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, **13**, 1013-1014 (1987)]의 존재하에 브롬화수소와 반응시킴으로써 상응하는 디브로모 중간체로 전환시킬 수 있다.



화학식 I의 유용한 한 실시태양에서, Ar¹-(E_y)_a 기는 플루오렌이다. 이들은, 예를 들어 하기 반응식 VI (이때, R^Z는 반응식 I에서 정의된 바와 같고, R³은 각각의 경우 독립적으로 수소, 또는 하나 이상의 S, N, O, P 또는 Si 원자를 함유하는, C₁₋₃₀ 알킬, C₁₋₃₀ 알케닐, C₆₋₂₀ 아릴, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 또는 C₁₋₃₀ 히드록아르빌이다)에 따른 디아로일히드라이드 축합환화 경로를 사용하여 제조할 수 있다. 반응식 VI의 단계 (1)에서, 화학식 CCLXII의 2,7-디브로모플루오렌은 이황화탄소와 같은 비활성 용매중에서 염화알루미늄의 존재하에 메톡시카르보닐 클로리드와 반응함으로써 화학식 CCLXIII의 4-메틸 에

스테르로 전환된다. 단계 (2)에서, 화학식 CCLXIII의 4-메틸 에스테르는 가열하에 히드라진과 반응함으로써 화학식 CCLXIV의 히드라지드로 전환된다. 단계 (3)에서, 화학식 CCLXIV의 히드라지드는 트리에틸아민의 존재하에 화학식 CCLXV의 비치환 또는 치환 벤조일 클로리드와 축합되어 화학식 CCLXV의 벤조일아로일히드라지드로 전환된다. 단계 (4)에서, 화학식 CCLXV의 벤조일아로일히드라지드는 환류하에 인 옥시클로리드와 축합환화되어 화학식 CCLXVI의 디브로 모플루오레닐-1,3,4-옥사디아졸을 제공한다.

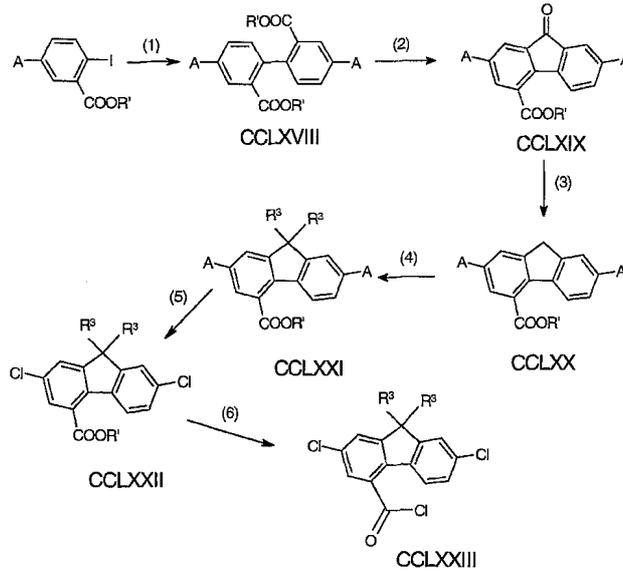


예를 들어, 전자 수송 중간체 2-(2,7-디브로모-9,9-디옥틸-9H-플루오렌-4-일)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸을 상기 방법에 의해 제조할 수 있다. 이 경우, 2,7-디브로모-9,9-이치환된 플루오렌 중간체는 4-메틸 에스테르로 전환되고 (문헌[Bokova 등, *J. Org. Chem. USSR* (영문 번역문), **5**, 1103-1106 (1969)]; 문헌[Schidlo 등, *Chem Ber.*, **96**, 2595-2600 (1963)]), 히드라진과 반응한 후, 4-(옥틸옥시)벤조일클로리드와 축합되어 2,7-디브로모-N'-[4-(옥틸 옥시)벤조일]-플루오레노일 히드라지드 중간체를 제공하며, 이는 축합환화시 원하는 중간체를 제공한다.

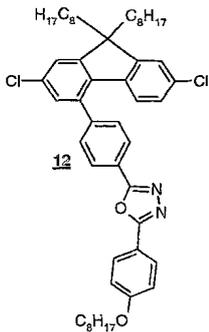
상응하는 티아디아졸 및 트리아졸은 반응식 III에서와 같이 상호교환 조건하에 화학식 CCLXV의 중간체 벤조일아로일히드라지드를 P_2S_5 와 반응시켜 1,3,4-티아디아졸을 제공하고, 반응식 IV에서와 같이 R_1NH_2 와 반응시켜 1,3,4-트리아졸을 제공함으로써 제조할 수 있다.

하기 반응식 VII에서, $Ar^1-(E_y)_a$ 기는 또한 단계 (1)에서 화학식 CCLXVII의 요오도-치환된 벤조일옥시 에스테르(이때, A는 H, Cl 또는 Br이고, R^1 은 C_{1-4} 알킬이다)를 구리/청동과 울만(Ulmann) 자가 커플링 반응시킨 후(문헌[Rule 등, *J. Chem. Soc.* 1096-1101 (1937)]; 문헌[Namkung 등., *J. Med. Chem. Soc.*, **8**, 551-554 (1965)] 참조), 단계 (2)에서 화학식 CCLXVIII의 생성된 디펜산(문헌[Huntress 등, *J. Am. Chem. Soc.*, **55**, 4262-4270 (1933)]을 예를 들어 170°C에서 황산으로 산 축진화 폐환시켜 화학식 CCLXIX의 9-플루오레논을 수득함으로써 구성될 수 있다. 9-플루오레논을 단계 (3)에서 적린(red phosphorus)으로 환원시켜 화학식 CCLXX의 플루오렌을 수득하고, 이를 단계 (4)에서 부틸 리튬과 반응시킨 후 R^3 -할리드와 반응시키거나, 또는 예를 들어 디메틸술폭시드중의 벤질트리에틸암모늄 클로리드 및 이후 50% 수성 수산화나트륨 및 이어서 R^3 -Br를 사용하는 상 전달 방법에 의해 9-위치에서 알킬화시킬 수 있다. 화학식 CCLXXI의 생성된 9-알킬화 플루오렌(이때, A는 H이고, R'는 메틸이다)은, 예를 들어 단계 (5)에서 메틸옥시란중의 염소와 반응시켜 화학식 CCLXXII의 2,7-디클로로 플루오렌(이때, R'는 메틸이다)을 수득함으로써 2번 및 7번 위치에서 할로겐화될 수 있다 (문헌[Schidlo 등, *Chem Ber.*, 2595-2600 (1963)]). 화학식 CCLXXII의 2,7-디클로로 플루오렌을 단계 (6)에서 티오닐 클로리드로 처리하여 화학식 CCLXXIII의 반응성 아실 클로리드 중간체를 수득한다. 그다음 반응식 II 내지 IV에서와 같이 벤조히드라지드 중간체를 통하거나 또는 반응식 I에서와 같이 테트라졸과 직접 커플링시킴으로써 산 클로리드 중간체의 산 클로리드 기에서 옥사디아졸, 티아디아졸 또는 트리아졸을 형성할 수 있다.

반응식 VII

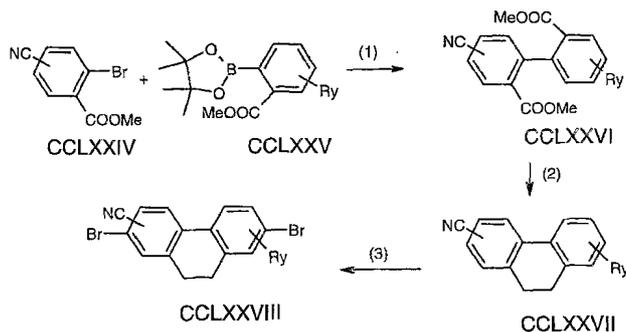


전자 수송 중간체 중간체 2-[4-(2',7'-디클로로-9',9'-디옥틸-9'H-플루오렌-4'-일)페닐]-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸 (**12**)은 2,7-디클로로-9,9-디옥틸-9H-플루오렌을 모노브롬화시켜 4-브로모-2,7-디클로로-9,9-디옥틸-9H-플루오렌을 수득한 후, 상응하는 디클로로보탈란으로 전환시킨 후, 표준 스킵 커플링 조건하에서 2-(4-브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸과 반응시킴으로써 제조할 수 있다.



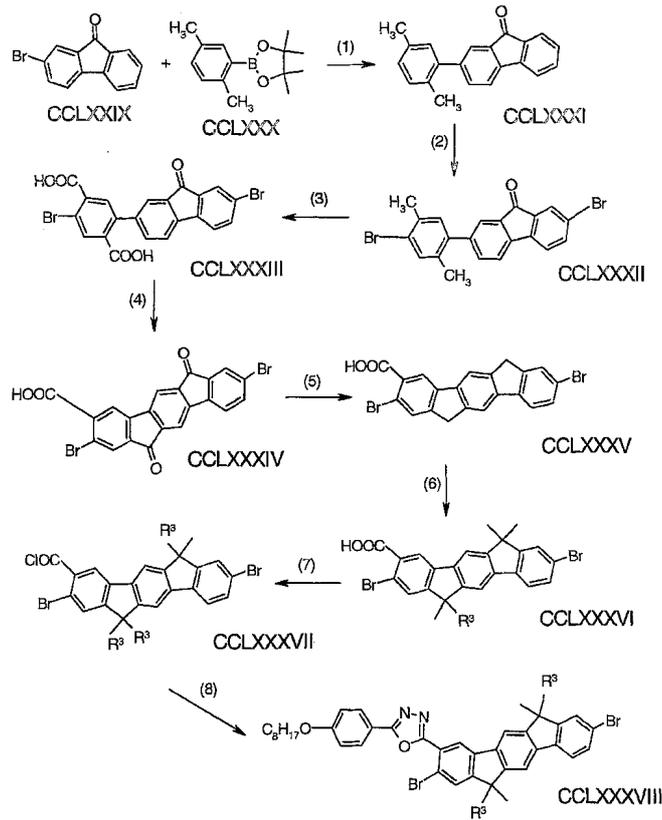
9,10-디히드로페난트렌에 기초한 Ar¹-(E_y)_a 기는 하기 반응식 VIII에 나타난 방법에 의해 합성할 수 있다. 단계 (1)에서, 화학식 CCLXXV의 페닐보탈란을 화학식 CCLXXIV의 메틸 시아노브로모벤조에이트와 스킵 커플링시켜 화학식 CCLXXVI의 시아노디펜산 에스테르를 수득한다. 단계 (2)에서, 아실로인 환원(문헌[Fritsch 등, *Chem Ber.*, **125**, 849-855 (1992)])시켜 화학식 CCLXXVII의 시아노-9,10-디히드로페난트렌을 수득할 수 있다. 단계 (3)에서, 화학식 CCLXXVII를 실온에서, 예를 들어 메틸렌 클로리드중의 브롬으로 디브롬화시켜 화학식 CCLXXVIII의 디브로모-시아노-9,10-디히드로페난트렌을 수득한 후, 그의 시아노기를 염기로 처리하여 카르복실산기로 전환시키거나 환류하에 DMF중의 NaN₃ 및 NH₄Cl로 처리하여 테트라졸기로 전환시킬 수 있다. 상기 카르복실산기로부터 먼저 메틸옥시란중의 티오닐 클로리드 또는 염소로 할로겐화시킨 후, 반응식 II, III 또는 IV에서와 같이 옥사디아졸, 티아디아졸 또는 트리아졸기를 형성함으로써 옥사디아졸릴, 티아디아졸릴 또는 트리아졸릴기를 형성할 수 있다. 테트라졸은 반응식 II에 나타난 바와 같이 아릴로일 클로리드와 반응시켜 옥사디아졸을 형성할 수 있다.

반응식 VIII

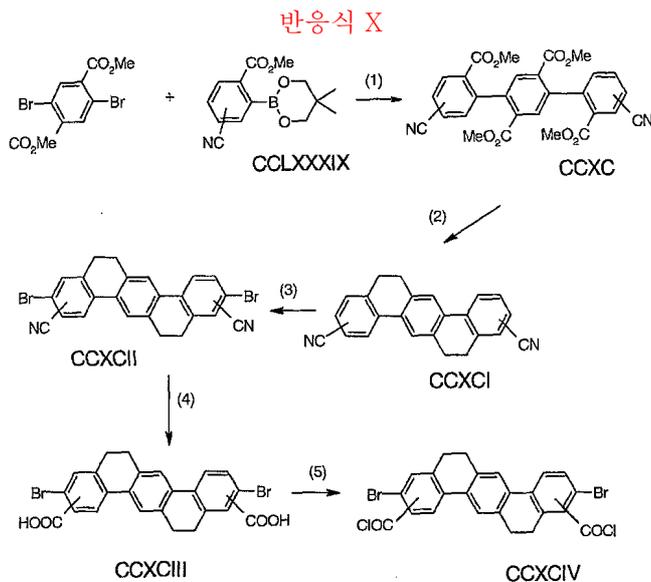


Ar¹-(E_y)_a의 기는 하기 반응식 IX의 방법을 사용하여 2,8-디브로모-6,12-디히드로인데노[1,2-b]플루오렌을 제조함으로써 제조할 수 있다. 단계 (1)에서, 2-(2,5-디메틸페닐)-4,4,5,5-테트라메틸[1,3,2]디옥사보롤란(CCLXXX)을 상업적으로 구입가능한 2-브로모-9-플루오레논(CCLXXIX)과 스즈키 커플링시켜 2-(2,5-디메틸페닐)플루오렌-9-온(CCLXXXI)을 수득한다. 상업적으로 구입가능한 2-브로모-p-크실렌을 부틸 리튬으로 처리한 후, 이러한 리튬첨가된 중간체를 2-이소프로폭시-4,4,5,5-테트라메틸[1,3,2]디옥사보롤란과 반응시켜 2-(2,5-디메틸페닐)-4,4,5,5-테트라메틸[1,3,2]디옥사보롤란(CCLXXX)으로 전환시킨다. 단계 (2)에서, 2-(2,5-디메틸페닐)플루오렌-9-온(CCLXXXI)은 0℃에서 클로로포름중의 브롬에 의해 2-브로모-7-(4-브로모-2,5-디메틸페닐)플루오렌-9-온(CCLXXII)으로 전환될 수 있다. 페닐 고리의 4'번 위치에서 위치특이적 브롬화시켜 5'-메틸 및 플루오렌 치환기를 도입시킨다. 단계 (3)에서, 2-브로모-7-(4-브로모-2,5-디메틸페닐)플루오렌-9-온(CCLXXII)을 과망간산칼륨으로 산화시켜 2-브로모-5-(7-브로모-9-옥소-9H-플루오렌-2-일)-테레프탈산(CCLXXIII)을 수득할 수 있다. 단계 (4)에서, 황산으로 처리하여 2,8-디브로모-6,12-디옥사-6,12-디히드로인데노[1,2-b]플루오렌-3-카르복실산(CCLXXXIV)으로 폐환시킨다. 단계 (5)에서, 적린으로 2,8-디브로모-6,12-디옥사-6,12-디히드로인데노[1,2-b]플루오렌-3-카르복실산(CCLXXXIV)을 환원시켜 2,8-디브로모-6,12-디히드로인데노[1,2-b]플루오렌-3-카르복실산(CCLXXXV)을 수득한다. 단계 (6)에서, 부틸 리튬과 반응시킨 후 R³-할리드와 반응시키거나, 또는 예를 들어 디메틸술폭시드중의 벤질트리에틸암모늄 클로리드 및 이후 50% 수성 수산화나트륨 및 이어서 R³-Br를 사용하는 상 전달 방법에 의해 알킬화시켜 화학식 CCLXXXVI의 인데노[1,2-b]플루오렌 유도체를 수득한다. 화학식 CCLXXXVI의 인데노[1,2-b]플루오렌을 티오닐 클로리드로 처리하여 화학식 CCLXXXVII의 반응성 아실 클로리드 중간체를 수득한다. 그다음 반응식 II 내지 IV에서와 같이 벤조히드라지드 중간체를 통하거나 또는 반응식 I에서와 같이 테트라졸과 직접 커플링시킴으로써 산 클로리드 중간체의 산 클로리드 기에서 옥사디아졸, 티아디아졸 또는 트리아졸을 형성할 수 있다. 단계 (8)에서, 예를 들어 화학식 CCLXXXVIII의 옥사디아졸은 화학식 CCLXXXVII의 아실 클로리드 중간체를 반응식 I에서와 같이 5-(4-옥틸옥시페닐)-1H-테트라졸과 반응시켜 수득된다.

반응식 IX



E_y 로 치환된 1개 또는 2개의 말단 고리를 갖는 $Ar^1-(E_y)_a$ 의 기는 하기 반응식 X에 예시된 바와 같이 먼저 3,10-디브로모-5,6,12,13-테트라히드로디벤조[a,h]안트라센의 디카르복실산을 제조함으로써 제조할 수 있다. 단계 (1)에서, 디메틸 2,4-디브로모테레프탈레이트 (영국 메이브리지 케미칼 캄파니(Maybridge Chemical Co.)로부터 구입함)를 화학식 CCXC의 시아노페닐보롤란 (문헌[Kristensen 등, *Org. Lett.*, **10**, 1435-1438 (2001)] 참조)과 반응시켜 화학식 CCXC의 시아노 치환된 트리페닐 화합물을 수득한다. 단계 (2)에서, 화학식 CCXC의 화합물을 아실로인 환원 (문헌 [Fritsch 등, *Chem Ber.*, **125**, 849-855 (1992)])시켜 화학식 CCXCI의 디시아노 치환된 5,6,12,13-테트라히드로디벤조[a,h]안트라센을 수득할 수 있다. 예를 들어, 단계 (3)에서는 0°C에서 클로로포름중의 브롬으로 디브롬화시켜 화학식 CCXCII의 디시아노 치환된 3,10-디브로모-5,6,12,13-테트라히드로디벤조[a,h]안트라센을 수득할 수 있다. 단계 (4)에서, 화학식 CCXCII의 화합물을 염기로 처리하여 화학식 CCXCIII의 디카르복실산을 수득할 수 있다. 단계 (5)에서, 화학식 CCXCIII의 화합물을 티오닐 클로리드로 처리하여 화학식 CCXCIV의 반응성 아실 클로리드 중간체를 수득할 수 있다.



반응식 II 내지 IV에서와 같이 벤조히드라지드 중간체를 통하거나 또는 반응식 I에서와 같이 테트라졸과 직접 커플링시킴으로써 산 클로리드 중간체의 산 클로리드 기에서 옥사디아졸, 티아디아졸 또는 트리아졸을 형성할 수 있다.

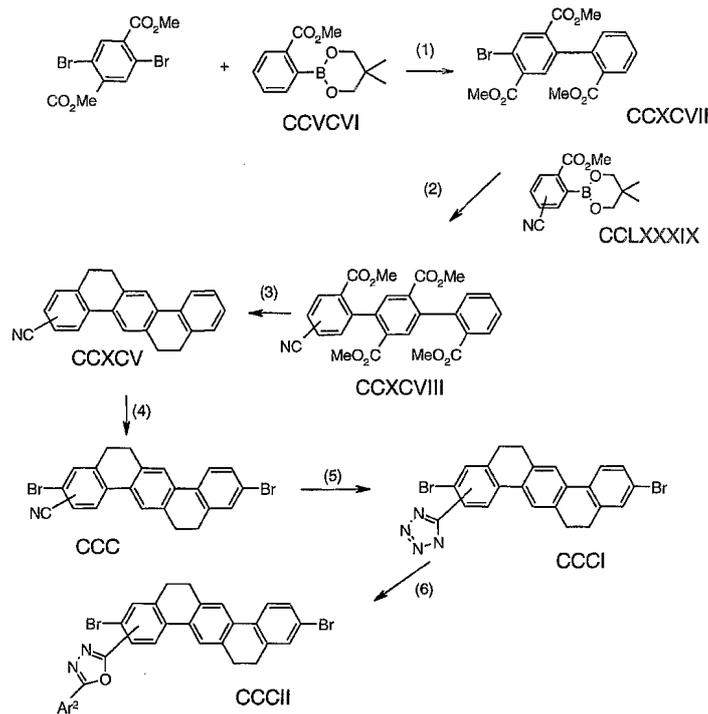
별법적으로, 화학식 CCXCII의 디시아노 치환된 3,10-디브로모-5,6,12,13-테트라히드로벤조[a,h]안트라센의 시아노기는 환류하에 DMF중의 NaN_3 및 NH_4Cl 로 처리함으로써 테트라졸 기로 전환시킬 수 있다. 테트라졸은 반응식 I에 나타난 바와 가타이 아릴로일 클로리드와 반응시켜 옥사디아졸을 형성할 수 있다.

화학식 CCXCV의 모노시아노 치환된 5,6,12,13-테트라히드로디벤조[a,h]안트라센은 하기 반응식 XI에 나타난 바와 같이 순차적인 스즈키 커플링을 통해 제조할 수 있다. 단계 (1)에서, 화학식 CCXCVI의 페닐보롤란을 과량의 (전형적으로는 5 당량)의 디메틸 2,4-디브로모테레프탈레이트와 반응시켜 주요 생성물로서 화학식 CCXCVII의 4-브로모바이페닐을 수득한다. 단계 (2)에서, 정제 후에, 화학식 CCXCVII의 4-브로모바이페닐을 표준 스즈키 커플링 조건하에 화학식 CCLXXXIX의 시아노페닐보롤란과 반응시켜 화학식 CCXCVIII의 모노시아노 치환된 트리페닐을 수득한다. 단계 (3)에서, 반응식 X에서와 같이 아실로인 환원시켜 화학식 CCXCV의 모노시아노 치환된 5,6,12,13-테트라히드로디벤조[a,h]안트라센을 수득한다. 단계 (4)에서, 예를 들어 0°C 에서 클로로포름중의 브롬으로 후속적으로 디브롬화시켜 화학식 CCC의 디브로모 모노시아노 화합물을 수득할 수 있다. 화학식 CCC의 디브로모 모노시아노 화합물을 단계 (5)에서 환류하에 DMF중의 NaN_3 및 NH_4Cl 과 반응시켜 화학식 CCCI의 테트라졸을 형성할 수 있으며, 이를 단계 (6)에서 아로일 클로리드,

$\text{Ar}^2\text{C}(\text{O})\text{Cl}$ 과 반응시켜 화학식 CCCII의 측쇄 옥사디아졸을 갖는 5,6,12,13-테트라히드로디벤조[a,h]안트라센을 수득할 수 있다.

별법적으로, 화학식 CCC의 화합물상의 시아노기는 가수분해되어 카르복실산을 형성할 수 있으며, 이를 다시 티오닐 클로리드로 처리하여 아실 클로리드 중간체를 형성할 수 있다. 아실 클로리드 중간체를 반응식 II에서와 같이 아로일 히드라지드와 반응시켜 벤조일아로일히드라지드를 형성한 후, 이를 반응식 II 내지 IV에 기재된 바와 같이 옥사디아졸, 티아디아졸 또는 트리아졸로 전환시킬 수 있다.

반응식 XI



상기 반응식들에서 기재된 바와 같이 제조된 디할로 중간체를 디메틸 설펍시드중의 [1,1'-비스(디페닐포스포노)페로센] 디클로로팔라듐으로 촉매작용하면서 비스(피나콜라토)디보론 및 아세트산칼륨으로 처리하여 디보롤란 유도체를 수득함으로써 상응하는 디보롤란으로 전환시킬 수 있다 (문헌[Meng 등, *J. Am. Chem. Soc.*, 123(37), 9214-9215 (2001)]).

화학식 V의 화합물은 스즈키 커플링 조건하에 선택된 캡핑기의 아릴 보론산 에스테르를 선택된 과량의 방향족 코어 중간체의 디할라이드와 반응시켜 1개의 모노할로젠화 방향족 코어 기에 커플링된 1개의 캡핑기를 갖는 중간체를 생성함으로써 합성될 수 있다. 그다음 이러한 중간체를 디메틸 설펍시드중의 [1,1'-비스(디페닐포스포노)페로센] 디클로로팔라듐으로 촉매작용하면서 비스(피나콜라토)디보론 및 아세트산칼륨으로 처리하여 상응하는 아릴보론산 에스테르 중간체로 전환시킬 수 있다 (문헌[Ishiyama 등, *J. Org. Chem.* 60, 7508-7510 (1995)]). 아릴보론산 에스테르 중간체를 동일하거나 상이한 구조의 말단 캡핑되고 모노할로젠화된 방향족 코어와 스즈키 커플링 조건하에서 교차 커플링시켜 화학식 V의 최종 화합물에 도달할 수 있다.

조성물

당업계에서는 유기 전계발광 장치를 제작하기 위한 목적으로 기관 상으로 균일하게 코팅되거나 프린팅될 수 있는 용액 가공성 전계발광 조성물이 요구되었다. 이러한 조성물로부터 제조된 OLED 장치는 바람직하게는 하기의 것들 중 하나 이상을 제공할 것이다: 낮은 작동 전압, 높은 외부 양자 효율, 적당한 색 조화 (예를 들어, 디스플레이 적용을 위한 적색, 녹색 및 청색, 또는 배경 조명을 위한 백색), 긴 작동 수명 및 프린팅 공정과의 상용성 (예를 들어, 잉크젯 프린팅, 레이저 유도열 화상화, 그라비아 프린팅 등).

본 발명의 한 양태는 유기 전계발광 장치와 같은 유기 전자 장치에서 사용될 수 있는 조성물을 제공하는 것이다. 본 조성물은 전하 수송 물질, 전하 차단 물질, 발광 물질, 색상 전환 물질, 중합체성 결합제 또는 이들의 조합과 블렌딩된 화학식 I의 화합물을 포함한다. 전하 수송 물질은 소분자 또는 중합체성 물질일 수 있고, 정공, 전자 또는 이들의 조합을 수송할 수 있다. 전하 차단 물질은 소분자 또는 중합체성 물질일 수 있고, 정공, 전자 또는 이들의 조합을 차단할 수 있다. 발광 물질 및 색상 전환 물질은 소분자 또는 중합체성 물질일 수 있다. 그러한 블렌드는 예를 들어 용액 또는 용융 상태에서 화합물을 블렌딩하여 제조할 수 있다. 조성물은 블렌딩된 화합물로부터 제조된 필름의 형태일 수 있다.

그러한 조성물은 물질을 수용자로 열 패터닝하여 유기 전자 장치를 제조하는데 유용할 수 있다. 본 조성물은 또한 예를 들어 잉크젯 프린팅, 스크린 프린팅 및 사진석판술 패터닝을 포함하여 비열(non-thermal) 프린팅, 패터닝 및 전달 방법에 유용할 수 있다.

이러한 조성물에 유용한 정공 수송제는 바람직하게는 상기 3급 방향족 아민 유도체, 상기 전자가 풍부한 헤테로아릴렌 유도체, 전자가 풍부한 무기 및 유기금속 착물, 또는 이러한 물질로부터 유도된 중합체로부터 선택된다. 이러한 블렌드에 유용한 정공 수송 중합체는 폴리비닐 카르바졸, 트리아릴 아민 기재 중합체를 포함하며, 이러한 유형은 DE 특허 제 3,610,649호, 미국 특허 제 5,681,664호, 특허 출원 WO 99/32537호 및 특허 출원 WO 98/06773호에 교시되어 있고, 이들은 모두 참조문헌으로 인용되어 있다. 정공 수송제의 다른 예는 구리 프탈로시아닌 (CuPC) 및 화합물, 예를 들어 문헌 [H. Fujikawa, 등, *Synthetic Metals*, **91**, 161 (1997)] 및 [J. V. Grazuleviciua 등, "Charge-Transporting Polymers and Molecular Glasses", *Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials and Devices*, H. S. Nalwa (ed.), 10, 233-274 (2001)]에 기재되어 있는 것을 포함한다.

이러한 블렌딩된 시스템에 유용한 전자 수송제는 폴리시클릭 방향족 탄화수소, -C=N- 단위를 갖는 헤테로방향족 화합물, 및 전자가 부족한 무기 착물로부터 선택될 수 있다. 적절한 전자 수송제는 옥사디아졸 유도체, 예를 들어 2-(4-바이페닐)-5-(4-t-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸 (PBD로도 알려져 있음), 1,3-비스[5-(4-(1,1-디메틸에틸)페닐)-1,3,4-옥사디아졸-2-일]벤젠 (PBD 이량체로도 알려져 있음), 및 옥사디아졸의 스타르버스트 및 덴드리머릭 유도체 (문헌 [Bettenhausen 등, *Synthetic Metals*, **91**, 223 (1997)]); N-치환된 트리아졸 유도체, 예를 들어 3-(4-바이페닐일)-4-페닐-5-(4-3급-부틸페닐)1,2,4-트리아졸 (TAZ로도 알려져 있음) 및 트리아졸의 스타르버스트 및 덴드리머릭 유도체; 유기금속 화합물, 예를 들어 트리스(8-히드록시퀴놀라토)알루미늄 (Alq₃) 및 바이페닐라토비스(8-히드록시퀴놀라토)알루미늄 (Balq); 및 문헌 [C. H. Chen 등, *Macromol. Symp.* **125**, 1 (1997)] 및 [J. V. Grazulevicius 등, "Charge-Transporting Polymers and Molecular Glasses", *Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials and Devices*, H. S. Nalwa (ed.), 10, 233 (2001)]에 기재되어 있는 다른 화합물을 포함한다.

이러한 블렌딩된 시스템에 유용한 소분자 방출제는 한정되지는 않지만, 통상적으로 Ir(III), Rh(III), Os(II), Ru(II), Ni(II) 및 Pt(II)의 형광 다핵 아릴렌 및 헤테로아릴렌 유도체, 인광 시클로금속화 킬레이트 착물, 및 Zn(II) 및 Al(III)의 형광 킬레이트 착물에서 유도된 분자 방출제에서 선택된다. 유용한 형광 다핵 아릴렌 방출제의 예는 페릴렌, 벤조[g,h,i]페릴렌, 안트라센, 피렌, 데카시클렌 및 플루오렌에서 유도된 분자를 포함한다. 유용한 형광 다핵 헤테로아릴렌 유도체의 예는 쿠마린에서 유도된 분자, 예를 들어 10-(2-벤조티아졸릴)-2,3,6,7-테트라히드로-1,1,7,7-테트라메틸-1H,5H,11H-[1]벤조피라노[6,7,8-ij]퀴놀리진-11-온 (쿠마린 C545T로도 알려져 있음), 3-(2-벤조티아졸릴)-7-디에틸아미노쿠마린 (쿠마린 6 또는 쿠마린 540로도 알려져 있음) 및 3-티오펜일-7-메톡시쿠마린을 포함한다.

Ir(III), Rh(III), Os(II), Ru(II) 및 Pt(II)의 유용한 인광 시클로금속화 킬레이트 착물의 예는 인광 유기금속 L¹₃Ir(III), L¹₃Rh(III), L¹L²Ir(III)X, L¹L²Rh(III)X, L¹L²Os(II)Y, L¹L²Ru(II)Y 및 L¹L²Pt(II) 화합물에서 유도된 분자를 포함하며, 여기서 L¹ 및 L²는 각 경우마다 동일하거나 상이할 수 있고, 2-(1-나프틸)벤젠사졸, 2-페닐벤젠사졸, 2-페닐벤조티아졸, 2-페닐벤즈이미다졸, 7,8-벤조퀴놀린, 쿠마린, (티에닐피리딘), 페닐피리딘, 벤조티에닐피리딘, 3-메톡시-2-페닐피리딘, 티에닐피리딘, 툴릴피리딘의 임의적으로 치환된 시클로금속화 두자리 리간드이고; X는 아세틸아세토네이트 ("acac"), 헥사플루오로아세틸아세토네이트, 살리실리덴, 피콜리네이트 및 8-히드록시퀴놀리네이트로 이루어진 군에서 선택되며; Y는 전하 중성 킬레이트 화합물, 예를 들어 페나트롤린 또는 바이피리딘의 임의적으로 치환된 유도체에서 선택된다. 시클로금속화 Ir(III) 킬레이트 유도체, 예를 들어 특허 출원 WO 00/70655 및 WO 01/41512 A1에서 교시된 것들 및 시클로금속화 Os(II) 킬레이트 유도체, 예를 들어 미국 특허 출원 일련 번호 제 09/935,183호(2001년 8월 22일에 출원)에서 교시된 것이 있으며, 이들은 본원에 참조문헌으로 인용되어 있다. 백금(II) 포르피린, 예를 들어 옥타에틸 포르피린 (Pt(OEP)로도 알려져 있음)이 또한 유용하다.

Zn(II) 및 Al(III)의 유용한 형광 킬레이트 착물의 예는 비스(8-퀴놀리놀라토)아연(II), 비스(2-(2-히드록시페닐)벤젠사졸레이트)아연(II), 비스(2-(2-히드록시페닐)벤조티아졸레이트)아연(II), 비스(2-(2-히드록시페닐)-5-페닐-1,3,4-옥사디아졸)아연(II), 비스(8-퀴놀리놀라토)알루미늄(III) 및 바이페닐라토비스(8-히드록시퀴놀라토)알루미늄 (BALq)의 착물을 포함한다. 형광 Zn(II) 킬레이트, 예를 들어 문헌 [Tokito 등, *Synthetic Metals*, 111-112, 393-396, (2000)] 및 특허 출원 WO 01/39234 A2에 교시되어 있는 것들이 있으며, 이들은 본원에 참조문헌으로 인용되었다. 유용한 Al(III) 킬레이트는 미국 특허 제 6,203,933 B1호에 교시된 것을 포함한다.

이들 블렌드에 사용하기에 적절한 발광 중합체는 폴리플루오렌 (PF), 폴리파라페닐렌 (PPP), 폴리페닐렌비닐렌 (PPV) 및 폴리스피로비스플루오렌의 중합체 및 공중합체이다.

한 실시태양에서, 화학식 I에 따른 화합물은 하나 이상의 물질과 블렌딩되어 정공과 전자 둘다를 수송할 수 있는 조성물을 제공한다. 예를 들어, 전자를 수송할 수 있는 화학식 I의 화합물은 소분자 또는 중합체성 정공 수송 물질과 조합될 수 있다. 그러한 조성물은 선택된 화합물 및 배합비에 따라서 전하를 평형시킬 수 있다. 임의적으로, 발광 중합체 또는 전계발광 소분자는 블렌드에 첨가되어 유기 방출 소자로 형성될 수 있는 조성물을 형성할 수 있다.

이러한 유형의 조성물은 용액 가공성일 수 있고, 스핀 코팅되어 전계발광인 얇은 필름을 제공할 수 있다. 예를 들어, 조성물은 공여자 기관에서 수용자 기관으로 열적 전달될 수 있는 비결정질 필름의 형태일 수 있다. 조성물은 OLED 디스플레이 제조에 유용한 화소화 어레이(array)로 열적 화상화될 수 있으며, 필름의 두께 및 성분의 비율을 특정 범위 내에서 변화시켜서 높은 양자 효율 전계발광을 얻도록 최적화될 수 있다. 발광색은 발광 물질의 선택에 따라서 변할 수 있다. 예를 들어, 페틸렌, 비스(2-(2-히드록시페닐)벤조사졸레이트)아연(II), 또는 3-티에닐-7-메톡시-쿠마린으로 청색 방출이 얻어지고; 벤조티에닐 피리딘 아세틸아세토네이트 이리듐(III), 또는 백금 옥타에틸포르피린으로 적색 방출이 얻어지며; 쿠마린 6, 쿠마린 C545T 및 Ir(ppy)₃으로 녹색 방출이 얻어지고; t-부틸화 데카시클렌으로 백색 방출이 얻어진다.

조성물은 화학식 I에 따른 제 1 화합물 및 제 1 화합물과 구조적으로 유사한 제 2 화합물을 포함할 수 있다. 화학식 I의 화합물은 방향족 코어 및 이 방향족 코어에 부착된 2개의 말단 캡핑기를 가진다. 제 2 화합물은 제 1 화합물의 방향족 코어를 포함하는 라디칼, 제 1 화합물의 말단 캡핑기를 포함하는 1가 라디칼, 제 1 화합물의 말단 캡핑기의 2가 라디칼을 포함하는 2가 라디칼 또는 이들의 조합을 포함할 수 있다. 제 2 화합물은, 예를 들어 발광 물질, 색상 전환 물질, 전하 수송 물질, 전하 차단 물질, 중합체성 결합제 또는 이들의 조합일 수 있다.

이런 양태에서, 제 2 화합물은 치환되지 않을 수 있거나, 제 1 화합물의 상응하는 구조 상에 존재하는 동일한 유형의 치환기를 가질 수 있거나, 제 1 화합물의 상응하는 구조 상에 없는 치환기로 치환될 수 있다. 일부 실시태양에서, 제 2 화합물의 라디칼 상의 치환기는 제 1 화합물의 상응하는 구조 상에 있는 것과 동일하다. 제 1 화합물의 상응하는 구조는 제 1 방향족 코어, 제 1 말단 캡핑기, 또는 제 1 말단 캡핑기의 2가 라디칼일 수 있다. 제 2 화합물의 라디칼 및 제 1 화합물의 상응하는 구조 둘다 치환기가 없을 수 있다. 특정 예에서, 제 1 말단 캡핑기는 치환기가 없는 안트라센 라디칼일 수 있고, 제 2 화합물은 치환기가 없는 안트라센 라디칼을 포함한다. 유사하게, 제 2 화합물의 라디칼 및 제 1 화합물의 상응하는 구조 둘다 동일한 치환기를 가질 수 있다. 특정 예에서, 제 1 말단 캡핑기는 메톡시 치환기를 갖는 안트라센 라디칼일 수 있고, 제 2 화합물은 제 1 말단 캡핑기의 동일한 위치에서 메톡시 치환기를 갖는 안트라센 라디칼을 포함한다.

추가로, 제 2 화합물은 제 1 화합물의 상응하는 구조와 유사하지만 동일하지는 않은 라디칼을 함유할 수 있다. 예를 들어, 제 2 화합물의 라디칼 상의 치환기는 제 1 화합물의 상응하는 구조 상에는 없을 수 있다. 특정 예에서, 제 1 말단 캡핑기는 치환기가 없는 안트라센 라디칼이고, 제 2 화합물은 메톡시 치환기를 갖는 안트라센 라디칼을 포함한다. 마찬가지로, 제 1 화합물에 포함된 라디칼 상의 치환기는 제 2 화합물의 상응하는 구조 상에는 없을 수 있다. 다른 특정 예에서, 제 1 화합물은 메틸 치환기를 갖는 스피로비스플루오레닐 기인 말단 캡핑기를 가지고, 제 2 화합물은 치환되지 않은 스피로비스플루오레닐 기인 말단 캡핑기를 가진다.

제 2 화합물의 라디칼 상의 치환기는 제 1 화합물의 상응하는 구조 상에 존재하는 치환기(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 또는 이들의 조합)와 동일한 유형일 수 있지만, 다른 수의 탄소 원자를 함유한다. 특정 예에서, 제 1 말단 캡핑기는 메톡시 치환기를 갖는 안트라센 라디칼이고, 제 2 화합물은 에톡시 치환기를 갖는 안트라센 라디칼을 포함한다. 다른 특정 예에서, 제 1 화합물은 메틸기로 치환된 스피로비스플루오레닐 기인 말단 캡핑기를 가지고, 제 2 화합물은 3급-부틸기로 치환된 스피로비스플루오레닐 기인 말단 캡핑기를 함유한다.

제 1 화합물 및 제 2 화합물의 치환기는 그것들이 동일한 위치에서 치환된 경우 상이한 유형일 수 없다. 특정 예에서, 제 1 말단 캡핑기는 메틸기로 치환된 스피로비스플루오레닐 기이고, 제 2 화합물은 메틸기가 제 1 말단 캡핑기에 위치하는 동일한 위치에서 페닐기로 치환된 스피로비스플루오레닐기를 가지며, 이 경우 그 기들은 구조적으로 유사하다고 고려되지 않는다.

조성물의 제 2 화합물은 소분자(즉, 비중합체성)일 수 있거나, 중합체성 물질일 수 있다. 일부 실시태양에서, 조성물은 정공 수송 물질 및 전자 수송 물질 둘다를 포함한다. 다른 실시태양에서, 조성물은 정공 수송 물질, 전자 수송 물질 및 발광 물질을 포함한다.

본 발명의 조성물의 한 실시태양에서, 제 1 화합물은 화학식 I에 따른 화합물이고, 제 1 말단 캡핑기를 가진다 (예를 들어, 제 1 화합물은 예를 들어 A가 방향족 코어이고 Z_1 이 2개의 동일한 말단 캡핑기인 화학식 Z_1-A-Z_1 로 나타낼 수 있다). 제 2 화합물은 중합체성 또는 소분자(즉, 비중합체성)일 수 있고, 제 1 말단 캡핑기를 포함하는 제 2 말단 캡핑기를 가진다(예를 들어, 제 2 화합물은 말단 캡핑기 Z_2 를 가지고, Z_2 는 Z_1 을 포함한다).

제 1 실시태양의 변형태양에서, 제 1 말단 캡핑기 또는 제 2 말단 캡핑기는 다른 잔기 중에는 없는 치환기를 가진다. 다른 변형태양에서는, 제 1 말단 캡핑기 및 제 2 말단 캡핑기는 동일한 유형의 치환기(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 또는 이들의 조합)를 가지지만, 치환기 중의 탄소 원자의 수는 다르다.

제 2 실시태양에서, 제 1 화합물은 화학식 I에 따른 화합물이고, 제 1 방향족 코어를 가진다 (예를 들어, 제 1 화합물은, 예를 들어 A_1 이 방향족 코어이고 Z가 2개의 동일한 말단 캡핑기인 화학식 $Z-A_1-Z$ 로 나타낼 수 있다). 제 2 화합물은 중합체성 또는 소분자일 수 있고, 제 방향족 1 코어를 포함하는 라디칼을 함유한다 (예를 들어, 제 2 화합물은 라디칼 A_2 를 함유하고, A_2 는 A_1 을 포함한다).

제 2 실시태양의 변형태양에서, 제 1 방향족 코어 또는 제 2 화합물의 상응하는 라디칼은 다른 잔기에는 없는 치환기를 가진다. 다른 변형태양에서, 제 1 방향족 코어 및 제 2 화합물 중의 상응하는 라디칼은 동일한 유형의 치환기(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 또는 이들의 조합)을 가지지만, 치환기 중의 탄소 원자의 수는 다르다.

제 3 실시태양에서, 제 1 화합물은 화학식 I에 따른 화합물이고, 제 1 말단 캡핑기를 가진다 (예를 들어, 제 1 화합물은 예를 들어 A가 방향족 코어이고 Z_1 이 2개의 동일한 말단 캡핑기인 화학식 Z_1-A-Z_1 로 나타낼 수 있다). 제 2 화합물은 소분자이고, 제 1 말단 캡핑기를 포함하는 제 2 말단 캡핑기를 가진다 (예를 들어, 제 2 화합물은 예를 들어 B가 방향족 코어이고, Z_2 가 2개의 동일한 제 2 말단 캡핑기들인 화학식 Z_2-B-Z_2 로 나타낼 수 있고; Z_2 는 Z_1 을 포함한다). 그러한 조성물은 예를 들어 활성(즉, 전기활성 또는 전계발광) 방향족 코어를 갖는 2개의 소분자를 포함하는 필름을 제조하는데 사용될 수 있다. 유사한 말단 캡핑기는 2개의 소분자의 상용성을 증진시키는데 사용될 수 있다.

제 3 실시태양의 변형태양에서, 제 1 말단 캡핑기 또는 제 2 말단 캡핑기는 다른 말단 캡핑기에는 없는 치환기를 함유할 수 있다. 다른 변형태양에서, 제 1 및 제 2 말단 캡핑기 둘다 동일한 유형의 치환기(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 또는 이들의 조합)를 가질 수 있으나, 상기 치환기는 다른 수의 탄소 원자를 함유할 수 있다.

제 4 실시태양에서, 조성물은 화학식 I의 제 1 화합물, 소분자인 제 2 화합물, 및 발광 중합체인 제 3 화합물을 포함한다. 제 1 화합물은 제 1 말단 캡핑기를 가지고 (예를 들어, 제 1 화합물은 예를 들어 A가 방향족 코어이고 Z_1 이 2개의 동일한 말단 캡핑기인 화학식 Z_1-A-Z_1 로 나타낼 수 있다), 제 2 화합물은 제 1 말단 캡핑기를 포함하는 제 2 말단 캡핑기를 가진다 (예를 들어, 제 2 화합물은 예를 들어 B가 코어이고, Z_2 가 2개의 동일한 제 2 말단 캡핑기들인 화학식 Z_2-B-Z_2 로 나타낼 수 있고; Z_2 는 Z_1 을 포함한다). 그러한 조성물은, 예를 들어 발광 중합체와 블렌딩된 소분자를 포함하는 필름을 제조하는데 사용될 수 있으며, 여기서 제 1 및 제 2 화합물의 말단 캡핑기가 전체 조성물의 상용성을 증진시킬 수 있다. 소분자는 활성 방향족 코어를 포함할 수 있다.

제 4 실시태양의 변형태양에서, 제 1 말단 캡핑기 또는 제 2 말단 캡핑기는 다른 말단 캡핑기에는 없는 치환기를 함유할 수 있다. 다른 변형태양에서, 제 1 및 제 2 말단 캡핑기는 둘다 동일한 유형의 치환기(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 또는 이들의 조합)를 가질 수 있지만, 상기 치환기는 다른 수의 탄소 원자를 함유할 수 있다.

제 5 실시태양에서, 조성물은 화학식 I에 따른 제 1 화합물, 소분자인 제 2 화합물, 및 전기활성 중합체인 제 3 화합물을 포함한다. 제 1 화합물은 제 1 말단 캡핑기를 가지며(예를 들어, 제 1 화합물은 예를 들어 A가 방향족 코어이고 Z_1 이 2개의 동일한 말단 캡핑기인 화학식 Z_1-A-Z_1 로 나타낼 수 있다), 제 2 화합물은 제 1 말단 캡핑기를 포함하는 제 2 말단 캡핑기를 가진다(예를 들어, 제 2 화합물은 예를 들어 B가 방향족 코어이고, Z_2 가 2개의 동일한 제 2 말단 캡핑기들인 화학식

Z_2 -B- Z_2 로 나타낼 수 있고; Z_2 는 Z_1 을 포함한다). 그러한 조성물은, 예를 들어 전기활성 중합체와 블렌딩되는 소분자를 포함하는 필름을 제조하는데 사용될 수 있으며, 여기서 제 1 및 제 2 화합물의 말단 캡핑기는 전체 조성물의 상용성을 증진시킬 수 있다. 소분자는 활성 방향족 코어를 포함할 수 있다.

제 5 실시태양의 변형태양에서, 제 1 말단 캡핑기 또는 제 2 말단 캡핑기는 다른 말단 캡핑기에는 없는 치환기를 함유할 수 있다. 다른 변형태양에서, 제 1 및 제 2 말단 캡핑기 둘다는 동일한 유형의 치환기(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 또는 이들의 조합)를 가질 수 있지만, 상기 치환기는 다른 수의 탄소 원자를 함유할 수 있다.

제 6 실시태양에서, 조성물은 화학식 I에 따른 제 1 화합물, 소분자인 제 2 화합물 및 비활성 중합체인 제 3 화합물을 포함한다. 본원에서 사용된 용어 "비활성 중합체"는 전기활성이 아니고, 발광 중합체가 아닌 중합체를 지칭한다. 비활성 중합체는 예를 들어 제 1 화합물 및 제 2 화합물의 매트릭스로서 작용할 수 있다. 제 1 화합물은 제 1 말단 캡핑기를 가지고(예를 들어, 제 1 화합물은 예를 들어 A가 방향족 코어이고 Z_1 이 2개의 동일한 제 1 말단 캡핑기인 화학식 Z_1 -A- Z_1 로 나타낼 수 있다), 제 2 화합물은 제 1 말단 캡핑기를 포함하는 제 2 말단 캡핑기를 가진다(예를 들어, 제 2 화합물은 예를 들어 B가 방향족 코어이고, Z_2 가 2개의 동일한 제 2 말단 캡핑기들인 화학식 Z_2 -B- Z_2 로 나타낼 수 있고; Z_2 는 Z_1 을 포함한다). 그러한 조성물은 예를 들어 비활성 중합체 매트릭스 중의 소분자 블렌드를 포함하는 필름을 제조하는데 사용될 수 있고, 여기서 제 1 및 제 2 화합물의 말단 캡핑기는 전체 조성물의 상용성을 증진시킬 수 있다. 소분자는 활성 방향족 코어를 포함할 수 있다.

제 6 실시태양의 변형태양에서, 제 1 말단 캡핑기 또는 제 2 말단 캡핑기는 다른 말단 캡핑기에는 없는 치환기를 함유할 수 있다. 다른 변형태양에서, 제 1 및 제 2 말단 캡핑기 둘다는 동일한 유형의 치환기(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 또는 이들의 조합)를 가질 수 있으나, 상기 치환기는 다른 수의 탄소 원자를 함유할 수 있다.

제 7 실시태양에서, 조성물은 화학식 I에 따른 제 1 화합물 및 소분자인 제 2 화합물을 포함한다. 제 1 화합물은 제 1 방향족 코어를 가지고(예를 들어, 제 1 화합물은 예를 들어 A_1 이 제 1 방향족 코어이고 Z가 2개의 동일한 제 1 말단 캡핑기인 화학식 Z- A_1 -Z로 나타낼 수 있다), 제 2 화합물은 제 1 코어를 포함하는 상응하는 라디칼을 함유한다(예를 들어, 제 2 화합물은 예를 들어, A_2 가 제 2 방향족 코어이고, Y가 2개의 동일한 말단 캡핑기인 화학식 Y- A_2 -Y으로 나타낼 수 있고; A_2 는 A_1 을 포함한다). 그러한 조성물은 예를 들어 활성 (즉, 전기활성 또는 전계발광) 말단 캡핑기를 갖는 2개의 소분자를 포함하는 필름을 제조하기 위해 사용될 수 있다. 유사한 방향족 코어를 예를 들어 2개의 소분자의 상용성을 증진시키는데 사용할 수 있다.

제 7 실시태양의 변형태양에서, 제 1 방향족 코어 또는 제 2 화합물의 상응하는 라디칼은 다른 잔기에는 없는 치환기를 함유한다. 다른 변형태양에서, 제 1 방향족 코어 및 제 2 화합물의 상응하는 라디칼은 동일한 유형의 치환기(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 및 이들의 조합)을 가지지만, 상기 치환기는 다른 수의 탄소 원자를 함유할 수 있다.

제 8 실시태양에서, 조성물은 화학식 I에 따른 제 1 화합물, 소분자인 제 2 화합물, 및 발광 중합체인 제 3 화합물을 포함한다. 제 1 화합물은 제 1 방향족 코어를 가지며(예를 들어, 제 1 화합물은, 예를 들어 화학식 Z- A_1 -Z(이때, A_1 은 제 1 방향족 코어이고, Z는 2개의 동일한 말단 캡핑기이다)로 나타낼 수 있다), 제 2 화합물은 상기 제 1 방향족 코어를 포함하는 상응하는 라디칼을 함유한다(예를 들어, 제 2 화합물은, 예를 들어 화학식 Y- A_2 -Y(이때, A_2 는 제 2 방향족 코어이고 A_1 을 포함하며, Y는 2개의 동일한 말단 캡핑기이다)로 나타낼 수 있다). 이러한 조성물은, 예를 들어 발광 중합체와의 소분자 블렌드를 포함하는 필름을 제조하는데 사용될 수 있고, 이때 제 1 및 제 2 화합물의 방향족 코어들은 전체 조성물의 상용성을 증진시킬 수 있다. 소분자는, 예를 들어 활성 말단 캡핑기를 포함할 수 있다.

제 8 실시태양의 변형태양에서, 제 1 방향족 코어 또는 제 2 화합물중의 상응하는 라디칼은 다른 잔기에는 없는 치환기를 함유할 수 있다. 또다른 변형태양에서는, 제 1 방향족 코어 및 제 2 화합물중의 상응하는 라디칼이 둘다 동일한 유형의 치환기들(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 또는 이들의 조합)을 가질 수 있지만, 상기 치환기들은 상이한 수의 탄소 원자들을 함유할 수 있다.

제 9 실시태양에서, 조성물은 화학식 I에 따른 제 1 화합물, 소분자인 제 2 화합물, 및 전기활성 중합체인 제 3 화합물을 포함한다. 제 1 화합물은 제 1 방향족 코어를 가지며(예를 들어, 제 1 화합물은, 예를 들어 화학식 $Z-A_1-Z$ (이때, A_1 은 제 1 방향족 코어이고, Z 는 2개의 동일한 말단 캡핑기이다)로 나타낼 수 있다), 제 2 화합물은 상기 제 1 방향족 코어를 포함하는 상응하는 라디칼을 함유한다(예를 들어, 제 2 화합물은, 예를 들어 화학식 $Y-A_2-Y$ (이때, A_2 는 제 2 방향족 코어이고 A_1 을 포함하며, Y 는 2개의 동일한 말단 캡핑기이다)로 나타낼 수 있다). 이러한 조성물은, 예를 들어 전기활성 중합체와의 소분자 블렌드를 포함하는 필름을 제조하는데 사용될 수 있고, 이때 제 1 및 제 2 화합물의 방향족 코어들은 전체 조성물의 상용성을 증진시킬 수 있다. 소분자는, 예를 들어 활성 말단 캡핑기를 포함할 수 있다.

제 9 실시태양의 변형태양에서, 제 1 방향족 코어 또는 제 2 화합물중의 상응하는 라디칼은 다른 잔기에는 없는 치환기를 함유할 수 있다. 또다른 변형태양에서는, 제 1 방향족 코어 및 제 2 화합물중의 상응하는 라디칼이 둘다 동일한 유형의 치환기들(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 또는 이들의 조합)을 가질 수 있지만, 상기 치환기들은 상이한 수의 탄소 원자들을 함유할 수 있다.

제 10 실시태양에서, 조성물은 화학식 I에 따른 제 1 화합물, 소분자인 제 2 화합물, 및 비활성 중합체인 제 3 화합물을 포함한다. 제 1 화합물은 제 1 방향족 코어를 가지며(예를 들어, 제 1 화합물은, 예를 들어 화학식 $Z-A_1-Z$ (이때, A_1 은 제 1 방향족 코어이고, Z 는 2개의 동일한 말단 캡핑기이다)로 나타낼 수 있다), 제 2 화합물은 상기 제 1 방향족 코어를 포함하는 상응하는 라디칼을 함유한다(예를 들어, 제 2 화합물은, 예를 들어 화학식 $Y-A_2-Y$ (이때, A_2 는 제 2 방향족 코어이고 A_1 을 포함하며, Y 는 2개의 동일한 말단 캡핑기이다)로 나타낼 수 있다). 이러한 조성물은, 예를 들어 비활성 중합체와의 소분자 블렌드를 포함하는 필름을 제조하는데 사용될 수 있고, 이때 제 1 및 제 2 화합물의 방향족 코어들은 전체 조성물의 상용성을 증진시킬 수 있다. 소분자는, 예를 들어 활성 말단 캡핑기를 포함할 수 있다.

제 10 실시태양의 변형태양에서, 제 1 방향족 코어 또는 제 2 화합물중의 상응하는 라디칼은 다른 잔기에는 없는 치환기를 함유할 수 있다. 또다른 변형태양에서는, 제 1 방향족 코어 및 제 2 화합물중의 상응하는 라디칼이 둘다 동일한 유형의 치환기들(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 또는 이들의 조합)을 가질 수 있지만, 상기 치환기들은 상이한 수의 탄소 원자들을 함유할 수 있다.

제 11 실시태양에서, 조성물은 화학식 I에 따른 제 1 화합물 및 중합체인 제 2 화합물을 포함한다. 제 1 화합물은 제 1 방향족 코어를 가진다(예를 들어, 제 1 화합물은, 예를 들어 화학식 $Z-A_1-Z$ (이때, A_1 은 제 1 방향족 코어이고, Z 는 2개의 동일한 말단 캡핑기이다)로 나타낼 수 있다). 상기 중합체는 제 1 방향족 코어를 포함하는 라디칼을 함유하는 제 1 단량체(예를 들어, 제 1 단량체는 라디칼 A_2 를 함유하고, A_2 는 A_1 을 포함한다)를 포함하는 단량체 혼합물의 반응 생성물이다. 이러한 조성물은, 예를 들어 중합체와 공통된 기를 갖는 소분자를 포함하는 필름을 제조하는데 사용될 수 있다. 공통기들은 조성물에서 화합물들의 상용성을 증진시킬 수 있다.

제 11 실시태양의 변형태양에서, 제 1 방향족 코어 또는 제 2 화합물중의 상응하는 라디칼은 다른 잔기에는 없는 치환기를 함유할 수 있다. 또다른 변형태양에서는, 제 1 방향족 코어 및 제 2 화합물중의 상응하는 라디칼이 둘다 동일한 유형의 치환기들(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 또는 이들의 조합)을 가질 수 있지만, 상기 치환기들은 상이한 수의 탄소 원자들을 함유할 수 있다.

제 12 실시태양에서, 조성물은 화학식 I에 따른 제 1 화합물 및 중합체인 제 2 화합물을 포함한다. 제 1 화합물은 제 1 말단 캡핑기를 갖는다(예를 들어, 제 1 화합물은, 예를 들어 화학식 Z_1-A-Z_1 (이때, A 는 방향족 코어이고, Z_1 은 2개의 동일한 제 1 말단 캡핑기이다)로 나타낼 수 있다). 상기 중합체는 제 1 말단 캡핑기의 2가 라디칼을 포함하는 2가 라디칼을 함유하는 제 1 단량체(예를 들어, 제 1 단량체는 Z_2 를 함유하고, Z_2 는 Z_1 의 라디칼을 포함한다)를 포함하는 단량체 혼합물의 반응 생성물이다. 이러한 조성물은, 예를 들어 중합체와 공통된 기를 갖는 소분자를 포함하는 필름을 제조하는데 사용될 수 있다. 제 1 및 제 2 화합물 둘중의 유사한 기들은 조성물에서 화합물의 상용성을 증진시킬 수 있다.

제 12 실시태양의 변형태양에서, 제 1 말단 캡핑기 또는 제 2 말단 캡핑기는 다른 말단 캡핑기에는 없는 치환기를 함유할 수 있다. 또다른 변형태양에서는, 양 말단 캡핑기들은 동일한 유형의 치환기들(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 또는 이들의 조합)을 가질 수 있지만, 상기 치환기들은 상이한 수의 탄소 원자들을 함유할 수 있다.

제 13 실시태양에서, 조성물은 화학식 I에 따른 제 1 화합물, 소분자인 제 2 화합물, 및 중합체를 포함한다. 제 1 화합물은 제 1 말단 캡핑기 및 제 1 방향족 코어를 갖는다(예를 들어, 제 1 화합물은, 예를 들어 화학식 Z_1-A-Z_1 (이때, A는 제 1 방향족 코어이고, Z_1 은 2개의 동일한 제 1 말단 캡핑기이다)로 나타낼 수 있다). 제 2 화합물은 제 1 말단 캡핑기 Z_1 을 포함하는 제 2 말단 캡핑기, 및 제 1 방향족 코어와는 다른 제 2 방향족 코어를 갖는다(예를 들어, 제 2 화합물은, 예를 들어 화학식 Z_2-B-Z_2 (이때, B는 제 2 방향족 코어이고, Z_2 는 2개의 동일한 제 2 말단 캡핑기이며, Z_1 은 Z_2 를 포함하고, B는 A를 포함하지 않는다)에 의해 나타낼 수 있다). 상기 중합체는 제 1 방향족 코어를 포함하는 라디칼을 함유하는 제 1 단량체, 및 제 2 방향족 코어를 포함하는 라디칼을 함유하는 제 2 단량체를 포함하는 단량체 혼합물의 반응 생성물이다(예를 들어, 제 1 단량체는 라디칼 A_3 을 함유하고, 제 2 단량체는 라디칼 B_3 을 함유하며, A_3 는 A를 포함하고, B_3 는 B를 포함한다). 이러한 조성물은, 예를 들어 단량체 혼합물을 반응시켜 형성된 중합체와 공통된 기를 갖는 소분자를 포함하는 필름을 제조하는데 사용될 수 있다. 양 소분자들 사이의 유사한 기들 및 소분자와 중합체 사이의 유사한 기들은 조성물에서 화합물의 상용성을 증진시킬 수 있다.

제 13 실시태양의 제 1 변형태양에서, 제 1 말단 캡핑기 또는 제 2 말단 캡핑기는 다른 말단 캡핑기에는 없는 치환기를 함유할 수 있다. 제 2 변형태양에서, 양 말단 캡핑기들은 동일한 유형의 치환기들(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 또는 이들의 조합)을 가질 수 있지만, 상기 치환기들은 상이한 수의 탄소 원자들을 함유할 수 있다. 제 3 변형태양에서, 제 1 방향족 코어 또는 중합체중의 상응하는 라디칼은 다른 잔기에는 없는 치환기를 함유할 수 있다. 제 4 변형태양에서, 제 1 방향족 코어 및 중합체중의 상응하는 라디칼 둘다는 동일한 유형의 치환기들(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 또는 이들의 조합)을 가질 수 있지만, 상기 치환기들은 상이한 수의 탄소 원자들을 함유할 수 있다. 제 5 변형태양에서, 제 2 방향족 코어 또는 중합체중의 상응하는 라디칼은 다른 잔기에는 없는 치환기를 함유할 수 있다. 또다른 변형태양에서, 제 2 방향족 코어 및 중합체중의 상응하는 라디칼은 동일한 유형의 치환기들(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 또는 이들의 조합)을 가질 수 있지만, 상기 치환기들은 상이한 수의 탄소 원자들을 함유할 수 있다.

제 14 실시태양에서, 조성물은 화학식 I에 따른 제 1 화합물, 소분자인 제 2 화합물, 및 중합체를 포함한다. 제 1 화합물은 제 1 말단 캡핑기 및 제 1 방향족 코어를 갖는다(예를 들어, 제 1 화합물은, 예를 들어 화학식 $Z-A_1-Z$ (이때, A_1 은 제 1 방향족 코어이고, Z는 2개의 동일한 제 1 말단 캡핑기이다)로 나타낼 수 있다). 제 2 화합물은 제 1 방향족 코어를 포함하는 제 2 방향족 코어, 및 제 1 말단 캡핑기와는 다른 제 2 말단 캡핑기를 갖는다(예를 들어, 제 2 화합물은, 예를 들어 화학식 $Y-A_2-Y$ (이때, A_2 는 제 2 방향족 코어이고, Y는 2개의 동일한 제 2 말단 캡핑기이며, A_2 는 A_1 을 포함한다)에 의해 나타낼 수 있다). 상기 중합체는 제 1 말단 캡핑기의 2가 라디칼을 함유하는 제 1 단량체, 및 제 2 말단 캡핑기의 2가 라디칼을 함유하는 제 2 단량체를 포함하는 단량체 혼합물의 반응 생성물이다(예를 들어, 제 1 단량체는 라디칼 Z_3 를 함유할 수 있고, 제 2 단량체는 라디칼 Y_3 를 함유할 수 있으며, Z_3 는 Z의 라디칼 포함하고, Y_3 는 Y의 라디칼을 포함한다). 이러한 조성물은, 예를 들어 단량체 혼합물을 반응시켜 형성된 중합체와 공통된 기를 갖는 소분자를 포함하는 필름을 제조하는데 사용될 수 있다. 양 소분자들 사이의 유사한 기들 및 소분자와 중합체 사이의 유사한 기들은 조성물에서 화합물의 상용성을 증진시킬 수 있다.

제 14 실시태양의 제 1 변형태양에서, 제 1 방향족 코어 또는 제 2 화합물중의 라디칼은 다른 잔기에는 없는 치환기를 함유할 수 있다. 제 2 변형태양에서, 제 1 방향족 코어 및 제 2 화합물중의 상응하는 라디칼 둘다는 동일한 유형의 치환기들(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 또는 이들의 조합)을 가질 수 있지만, 상기 치환기들은 상이한 수의 탄소 원자들을 함유할 수 있다. 제 3 변형태양에서, 제 1 말단 캡핑기 또는 단량체 혼합물의 제 1 단량체중의 상응하는 1가 라디칼은 다른 잔기에는 없는 치환기를 함유할 수 있다. 제 4 변형태양에서, 제 1 말단 캡핑기 및 제 1 단량체중의 상응하는 1가 라디칼 둘다는 동일한 유형의 치환기들(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 또는 이들의 조합)을 가질 수 있지만, 상기 치환기들은 상이한 수의 탄소 원자들을 함유할 수 있다. 제 5 변형태양에서, 제 2 말단 캡핑기 또는 단량체 혼합물의 제 2 단량체중의 상응하는 1가 라디칼은 다른 잔기에는 없는 치환기를 함유할 수 있다. 또다른 변형태양에서, 제 2 말단 캡핑기 및 제 2 단량체중의 상응하는 1가 라디칼은 동일한 유형의 치환기들(예를 들어, 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 또는 이들의 조합)을 가질 수 있지만, 상기 치환기들은 상이한 수의 탄소 원자들을 함유할 수 있다.

상기 실시태양들은 제 1 화합물이 동일한 말단 캡핑기들을 갖는 예를 제공한다. 유사한 예는 제 1 화합물이 동일하지 않은 말단 캡핑기들을 가지고, 제 2 화합물이 하나 이상의 상기 말단 캡핑기들과 구조적 유사성을 갖는 것들을 포함한다.

상기 실시태양들은 제 2 화합물이 2개의 말단 캡핑 기들을 갖는 예를 제공한다. 유사한 예는 제 2 화합물이 단지 1개 또는 2개 이상의 말단 캡핑기를 갖는 것들을 포함한다.

상기 실시태양들은 제 2 화합물이 동일한 말단 캡핑기들을 갖는 예를 제공한다. 제 2 화합물의 말단 캡핑기들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 유사한 예는 하나 이상의 말단 캡핑기들이 제 1 화합물과 구조적 유사성을 갖는 것들을 포함한다.

유기 전자 장치

또다른 양태에서, 본 발명은 화학식 I의 화합물 또는 화학식 I의 화합물을 포함하는 조성물을 포함하는 유기 전자 장치를 제공한다. 유기 전자 장치는 유기 물질층들을 포함하는 제품으로, 상기 유기 물질층들 중 하나 이상은 전류를 통과시킬 수 있다. 본 발명의 화합물 또는 조성물을 사용하여 제조될 수 있는 유기 전자 장치의 예로는 유기 트랜지스터 및 다이오드, 광발전(photovoltaic) 장치, 유기 전계발광(OEL) 장치, 예를 들어 유기 발광 다이오드(OLED) 등이 포함된다.

유기 전자 장치는 유기 전계발광 디스플레이 또는 장치일 수 있다. 본원에서 사용된 바와 같이, "유기 전계발광(OEL) 디스플레이 또는 장치"는 애노드 및 캐소드 사이에 끼워진 유기 발광 물질을 포함하는 디스플레이 또는 장치를 지칭한다. 발광 물질은 소분자(SM) 방출제, SM 도핑된 중합체, 발광 중합체(LEP), 도핑된 LEP, 블렌딩된 LEP, 또는 단독으로 또는 OEL 디스플레이 또는 장치에서 기능적이거나 비기능적인 임의의 다른 유기 또는 무기 물질과 조합되어 제공될 수 있는 또다른 유기 방출 물질일 수 있다. 유기 전계발광 디스플레이 또는 장치는 그래픽, 화소형 디스플레이 및 대형 방출 그래픽의 배경 조명과 같은 응용분야에서 잠재적인 용도를 갖는다.

문헌[R. H. Friend 등, "Electroluminescence in Conjugated Polymers," *Nature*, **397**, 121 (1999)]에는 "한 전극으로부터 전자의 주입 및 다른 전극으로부터의 정공의 주입, 반대 전하를 띠는 캐리어(carrier)들의 포획(소위 재조합), 및 이 재조합 방법에 의해 생산되는 여기된 전자-정공 상태(엑시톤)의 방출 붕괴"를 포함하는 것과 같은 전계발광의 한 기작이 기재되어 있다.

유기 전계발광 장치는 유기 방출 소자를 포함한다. 유기 방출 소자는 캐소드 및 애노드 사이에 끼워진 하나 이상의 적합한 유기 물질들의 박층 또는 박층들을 포함한다. 유기 방출 소자는 전형적으로 발광 뿐만 아니라 전자 수송 및 정공 수송도 제공한다. 활성화된 경우, 전자들은 캐소드로부터 유기 방출 소자로 주입되고, 정공들은 애노드로부터 유기 방출 소자로 주입된다. 전자들은 라디칼 음이온으로서 유기 방출 소자에 체류하며, 정공은 라디칼 양이온으로서 체류한다. 주입된 전하가 반대 전하를 띠는 전극을 향해 이동함에 따라, 이들은 재조합되어 전형적으로 엑시톤으로 지칭되는 전자-정공 쌍들을 형성할 수 있다. 엑시톤들이 일반적으로 형성되는 장치의 영역은 재조합 대역으로 지칭될 수 있다. 이들 엑시톤들 또는 여기된 상태의 화학종들은 이들이 기저 상태로 다시 붕괴될 때까지 광 형태의 에너지를 방출할 수 있다.

유기 방출 소자는 전형적으로 발광층을 포함한다. 발광층은 발광 중합체 또는 발광 소분자와 같은 발광 물질을 포함한다. 발광층은 임의적으로 다른 물질들, 예를 들어 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 결합제, 중합체성 결합제, 도파성(wave guiding) 입자, 인광 화합물 및 색상 전환 물질을 포함한다. 일부 실시태양에서, 발광층은 화학식 I에 따른 화합물을 포함한다. 예를 들어, 발광층은 화학식 I에 따른 화합물 뿐만 아니라, 발광 물질, 전하 수송 물질, 전하 차단 물질, 색상 전환 물질, 중합체성 결합제 또는 이들의 조합인 제 2 화합물을 포함할 수 있다.

정공 수송층, 전자 수송층, 정공 주입층, 전자 주입층, 정공 차단층, 전자 차단층, 완충층 등과 같은 다른 층들도 또한 유기 방출 소자에 존재할 수 있다. 또한, 광발광 물질이 OEL 장치에서 발광층 또는 다른 층들에 존재하여, 예를 들어 전계발광 물질에 의해 방출된 광의 색상을 또다른 색상으로 전환시킬 수 있다. 적층 OEL 장치의 전자 특성 및 거동을 변경 또는 조절하기 위해, 예를 들어 원하는 전류/전압 반응, 원하는 장치 효율, 원하는 색상, 원하는 휘도(brightness) 등을 달성하기 위해 상기한 바와 같은 이들 및 다른 층들 및 물질들을 사용할 수 있다. 일부 실시태양에서, 화학식 I에 따른 화합물은 발광 소자의 이러한 다른 층들에 포함될 수 있다. 다른 실시태양에서, 하나 이상의 이러한 다른 층들은 화학식 I에 따른 화합물 뿐만 아니라, 발광 물질, 전하 수송 물질, 전하 차단 물질, 색상 전환 물질, 중합체성 결합제 또는 이들의 조합인 제 2 화합물을 포함할 수 있다. 예를 들어, 본 발명의 화합물 또는 조성물은 전자 수송층, 정공 수송층 또는 이들의 조합에 포함될 수 있다.

일부 실시태양에서, 유기 전계발광 장치의 유기 방출 소자에 포함되는 발광 분자는 전하를 운반하고(하거나) 방출하는 화학종이 중합체 매트릭스에 분산되어 있는 분자적으로 도핑된 중합체(문헌[J. Kido, "Organic Electroluminescent devices Based on Polymeric Materials," *Trends in Polymer Science*, **2**, 350-355 (1994)] 참조); 폴리(페닐렌비닐렌)과 같은 중합체 층들이 전하 운반 및 방출 화학종으로 작용하는 공액된 중합체 또는 발광 중합체(LEP)(문헌[J. J. M. Halls, D. R. Baigent, F. Cacialli, N. C. Greenham, R. H. Friend, S. C. Moratti, 및 A. B. Holmes, "Light-emitting and Photoconductive Diodes Fabricated with Conjugated Polymers," *Thin Solid Films*, **276**, 13-20 (1996)] 참조); 증착된 소분자 헤테로구조체(참고로 인용된 미국 특허 제5,061,569호, 및 문헌[C. H. Chen, J. Shi, 및 C. W. Tang, "Recent Developments in molecular Organic Electroluminescent Materials," *Macromolecular Symposia*, **125**, 1-48 (1997)] 참조); 또는 이들 소자들의 다양한 조합들일 수 있다.

OLED의 다른 예는 발광 전기화학 전지(문헌[Q. Pei, Y. Yang, G. Yu, C. Zang, 및 A. J. Heeger, "Polymer Light-Emitting Electrochemical Cells: In Situ Formation of Light-Emitting p-n Junction," *Journal of the American Chemical Society*, **118**, 3922-3929 (1996)] 참조) 및 다중 파장의 광을 방출할 수 있는 수직 적층된 유기 발광 다이오드(참고로 인용된 미국 특허 제5,707,745호, 및 문헌[Z. Shen, P. E. Burrows, V. Bulovic, S. R. Forrest, 및 M. E. Thompson, "Three-Color, Tunable, Organic Light-Emitting Devices," *Science*, **276**, 2009-2011 (1997)] 참조)를 포함한다.

유기 전계발광 장치에 전형적인 애노드는 플라스틱 또는 유리와 같은 투명 기관상에 스퍼터링(sputtering)된 인듐-주석-산화물(ITO)이다. 적합한 기관은, 예를 들어 유리, 투명 플라스틱(예를 들어, 폴리올레핀, 폴리에테르술폰, 폴리카보네이트, 폴리에스테르, 폴리아릴레이트), 및 중합체성 다층 필름, ITO 코팅된 차단 필름(예를 들어, 3M 옵티칼 시스템즈 디비전(Optical Systems Division)으로부터 구입가능한 플라스틱 필름 컨덕터(Plastic Film Conductor)), 표면 처리된 필름, 및 선택된 폴리이미드를 포함한다. 일부 실시태양에서, 기관은 보호(또는 상대 전극) 필름과 일치하는 차단 특성을 갖는다. 가요성 유리 롤(roll)도 사용할 수 있다. 이러한 물질은 더 양호한 구조적 일체성을 위해 중합체 캐리어에 적층될 수 있다.

기관을 코팅하는 애노드 물질은 전기전도성이며, 광학적으로 투과성이거나 반-투과성일 수 있다. ITO 이외에, 적합한 애노드 물질은 산화인듐, 불소 주석 산화물(FTO), 산화아연, 산화바나듐, 아연-주석 산화물, 금, 백금, 팔라듐, 은, 그밖의 일함수가 높은 금속들, 및 이들의 조합을 포함한다. 실시예에 있어서, 애노드는 표면의 평탄화를 보조하고 애노드의 효율적인 일함수를 변형시키기 위해 임의적으로 PEDT 또는 PANI와 같은 이온성 중합체 10 내지 200Å로 코팅된다.

전형적인 캐소드는 일함수가 낮은 금속들, 예를 들어 알루미늄, 바륨, 칼슘, 스마륨, 마그네슘, 은, 마그네슘/은 합금, 리튬, 불화리튬, 이테르븀, 및 칼슘과 마그네슘의 합금을 포함한다.

장치 구조의 한 예로, 도 1은 장치 층(110)과 기관(120)을 포함하는 OEL 디스플레이 또는 장치(100)를 도시한다. 임의의 다른 적합한 디스플레이 부품도 디스플레이(100)에 포함될 수 있다. 임의로, 전자 디스플레이, 장치 또는 램프에 사용하기에 적합한 추가의 광학 소자들 또는 다른 장치들은 임의의 소자(130)로 나타낸 바와 같이 디스플레이(100)와 뷰어(viewer) 위치(140) 사이에 제공될 수 있다.

도시된 바와 같은 일부 실시태양에서, 장치 층(110)은 뷰어 위치(140)를 향해 기관을 통해 광을 방출하는 하나 이상의 OEL 장치를 포함한다. 뷰어 위치(140)는 방출된 광의 정해진 목적지가 실제 사람 관찰자인지, 스크린인지, 광학 부품인지 또는 전자 장치인지 등을 나타내기 위해 일반적으로 사용된다. 다른 실시태양에서(도시되지 않음), 장치 층(110)은 기관(120)과 뷰어 위치(140) 사이에 위치된다. 도 1에 도시된 장치 배열("저부 방출성"으로 지칭됨)은 기관(120)이 장치 층(110)에 의해 방출된 광에 투과성이고 투과 전도성 전극이 장치의 발광층과 기관 사이에서 장치에 배치되는 경우에 사용할 수 있다. 역전된 배열("상부 방출성"으로 지칭됨)은 기관(120)이 장치 층에 의해 방출된 광을 투과시키거나 투과시키지 않고 장치의 기관과 발광층 사이에 배치된 전극이 상기 장치에 의해 방출된 광을 투과시키지 않는 경우에 사용할 수 있다.

장치 층(110)은 임의의 적합한 방식으로 정렬된 하나 이상의 OEL 장치를 포함할 수 있다. 예를 들어, 램프 응용분야(예를 들어, 액정 디스플레이(LCD) 모듈용 배경 조명)에서, 장치 층(110)은 정해진 전체 배경 조명 면적에 걸친 단일 OEL 장치를 구성할 수 있다. 또 다르게는, 다른 램프 응용분야에서, 장치 층(110)은 동시에 활성화될 수 있는 다수의 가깝게 이격된 장치들을 구성할 수 있다. 예를 들어, 비교적 작고 가깝게 이격된 적색광, 녹색광 및 청색광 방출자들을 통상의 전극들 사이에서 패터닝시켜 방출자들이 활성화될 때 장치 층(110)이 백색광을 방출하는 것 같이 할 수 있다. 배경 조명 응용분야의 다른 정렬방식도 또한 고려할 수 있다.

직시형(direct view) 또는 다른 디스플레이 응용분야에서는, 장치 층(110)이 동일하거나 상이한 색상을 방출하는 다수의 독립 어드레스블(addressable) OEL 장치 또는 소자들을 포함하는 것이 바람직할 수 있다. 각각의 장치는 개별 화소, 화소형 디스플레이(예를 들어, 고해상도 디스플레이)의 개별 하위-화소, 분할형(segmented) 디스플레이(예를 들어, 저 정보밀도 디스플레이)의 개별 세그먼트(segment) 또는 하위-세그먼트, 또는 개별 아이콘(icon), 아이콘의 일부, 또는 아이콘용 램프(예를 들어, 지시자 응용분야)를 나타낼 수 있다.

다시 도 1을 참조하면, 장치 층(110)은 기판(120)상에 배치된다. 기판(120)은 OEL 장치 및 디스플레이 응용분야에 적합한 임의의 기판일 수 있다. 예를 들어, 기판(120)은 유리, 투명 플라스틱, 또는 실질적으로 가시광에 투과성인 다른 적합한 물질(들)을 포함할 수 있다. 기판(120)은 또한 가시광에 불투과성일 수 있으며, 예를 들어, 스테인레스 강, 결정질 규소, 폴리-실리콘 등일 수 있다. OEL 장치에서 일부 물질은 산소 또는 물에의 노출로 인해 특히 손상받기 쉬울 수 있기 때문에, 기판(120)에는 바람직하게 적절한 환경 차단제가 제공되거나, 또는 적절한 환경 차단제를 제공하는 하나 이상의 층들, 코팅물 또는 적층물들이 공급된다.

기판(120)은 또한 OEL 장치 및 디스플레이에 적합한 임의의 수의 장치들 또는 부품들, 예를 들어 트랜지스터 어레이 및 다른 전자 장치들; 색 필터, 편광기, 파장판, 확산기 및 다른 광학 장치들; 절연기, 차단 릿(rib), 흑색 매트릭스, 반도체배치 설계(mask work) 및 이러한 다른 부품들 등을 포함할 수 있다. 일반적으로, 하나 이상의 전극은 장치 층(110)의 OEL 장치 또는 장치들의 잔존층 또는 층들을 형성하기 전에 코팅되거나, 침착되거나, 패터닝되거나 또는 다르게는 기판(120)상에 배치될 것이다. 투광성 기판(120)을 사용하고 OEL 장치 또는 장치들이 저부 방출성인 경우, 기판(120)과 방출 물질(들) 사이에 배치된 전극 또는 전극들은 바람직하게는 실질적으로 광에 투과성이며, 예를 들어 인듐 주석 산화물(ITO) 또는 다수의 투과 전도성 산화물들중 임의의 것과 같은 투과 전도성 전극이다.

소자(130)는 OEL 디스플레이 또는 장치(100)에서 사용하기에 적합한 임의의 소자 또는 소자들의 조합일 수 있다. 예를 들어, 장치(100)가 배경 조명인 경우, 소자(130)는 LCD 모듈일 수 있다. 하나 이상의 편광기 또는 다른 소자들은 LCD 모듈과 배경 조명 장치(100), 예를 들어 흡수형 또는 반사형 클린-업(clean-up) 편광기 사이에 제공될 수 있다. 또 다르게는, 장치(100) 자체가 정보 디스플레이인 경우, 소자(130)는 하나 이상의 편광기, 파장판, 터치 패널(touch panel), 반사방지 코팅물, 오염방지 코팅물, 영사 스크린(projection screen), 휘도 증진 필름, 또는 다른 광학 부품, 코팅물, 사용자 인터페이스 장치 등을 포함할 수 있다.

도 4A 내지 4D는 본 발명의 다른 OEL 장치(예를 들어, 유기 발광 다이오드) 배열의 예를 도시한다. 각 구조는 기판(250), 애노드(252), 캐소드(254) 및 발광층(256)을 포함한다. 발광층(256)은 화학식 I의 화합물, 또는 전자 수송 물질, 전자 차단 물질, 발광 물질, 색상 전환 물질, 중합체성 결합제 또는 이들의 조합인 제 2 화합물과 조합하여 화학식 I의 화합물을 함유하는 조성물을 포함할 수 있다. 도 4C 및 4D의 배열들은 또한 정공 수송층(258)을 포함하며, 도 4B 및 4D의 배열들은 전자 수송층(260)을 포함한다. 이들 층들은 각각 애노드로부터 정공을 또는 캐소드로부터 전자를 전도시킨다. 본 발명의 화합물 및 조성물은 이들 층들을 하나 또는 둘다 포함할 수 있다. 일부 실시태양에서, 도 4B 내지 4D의 OEL 장치들은 발광층(256) 및 전자 수송층(260) 중 하나 또는 둘다에서 본 발명의 화합물 또는 조성물을 포함한다.

애노드(252) 및 캐소드(254)은 전형적으로 금속, 합금, 금속성 화합물, 금속 산화물, 전도성 세라믹, 전도성 분산액 및 전도성 중합체와 같은 전도성 물질, 예를 들어, 금, 백금, 팔라듐, 알루미늄, 칼슘, 티탄, 질화티탄, 인듐 주석 산화물(ITO), 불소 주석 산화물(FTO) 및 폴리아닐린을 사용하여 형성된다. 애노드(252) 및 캐소드(254)는 전도성 물질의 단층일 수 있거나, 이들은 다층을 포함할 수 있다. 예를 들어, 애노드 또는 캐소드는 알루미늄층 및 금층을 포함하거나, 칼슘층 및 알루미늄층을 포함하거나, 알루미늄층 및 불화리튬층을 포함하거나, 또는 금속층 및 전도성 유기층을 포함할 수 있다.

정공 수송층(258)은 애노드로부터 장치로의 정공의 주입 및 그의 재조합 대역으로의 이동을 촉진시킨다. 정공 수송층(258)은 또한 애노드(252)로의 전자의 통과에 대해 차단자로서 작용할 수 있다. 일부 예로서, 정공 수송층(258)은, 예를 들어 디아민 유도체(예를 들어, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)벤지딘(또한 TPD로도 공지됨) 또는 N,N'-비스(1-나프틸)-N,N'-비스(페닐)벤지딘(NPB)), 또는 트리아릴아민 유도체(예를 들어, 4,4',4"-트리스(N,N-디페닐아미노)트리페닐아민(TDATA) 또는 4,4',4"-트리스(N-3-메틸페닐-N-페닐아미노)-트리페닐아민(mTDATA))을 포함할 수 있다. 정공 수송층에 존재할 수 있는 물질들의 다른 예에는 구리 프탈로시아닌(CuPC); 1,3,5-트리스(4-디페닐아미노페닐)벤젠(TDAPB); 및 다른 화합물들, 예를 들어 문헌[H. Fujikawa, 등, *Synthetic Metals*, **91**, 161 (1997)] 및 문헌[J. V. Grazulevicius, P. Strohriegl, "Charge-Transporting Polymers and molecular Glasses", Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials and Devices, H. S. Nalwa (ed.), 10, 233-274 (2001)]에 기재된 것들이 포함된다.

전자 수송층(260)은 전자의 주입 및 그의 재조합 대역으로의 이동을 촉진시킨다. 전자 수송층(260)은 또한 바람직한 경우 캐소드(254)로의 정공의 통과에 대해 차단제로서 작용할 수 있다. 일부 예로서, 전자 수송층(260)은 유기금속 화합물 트리스(8-히드록시퀴놀라토)알루미늄(Alq_3)을 사용하여 형성될 수 있다. 전자 수송층(260)에 유용한 전자 수송 물질의 다른 예에는 1,3-비스[5-(4-(1,1-디메틸에틸)페닐)-1,3,4-옥사디아졸-2-일]벤젠, 2-(바이페닐-4-일)-5-(4-(1,1-디메틸에틸)페닐)-1,3,4-옥사디아졸(tBuPBD), 및 문헌[C. H. Chen 등, *Macromol. Symp.*, **125**, 1 (1997)] 및 문헌[J. V. Grazulevicius 등, "Charge-Transporting Polymers and molecular Glasses", *Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials and Devices*, H. S. Nalwa (ed.), 10, 233 (2001)]에 기재된 다른 화합물들이 포함된다.

본 발명은 화학식 I에 따른 화합물, 또는 화학식 I에 따른 화합물에 대하여 전하 수송 물질, 전하 차단 물질, 발광 물질, 색상 전환 물질, 중합체성 결합제 또는 이들의 조합인 제 2 화합물을 포함하는 조성물을 포함하는 발광 OEL 디스플레이 및 장치를 고려한다. 한 실시태양에서는, 발광하면서 다른 색상의 광을 방출할 수 있는 인접한 장치들 또는 소자들을 갖는 OEL 디스플레이를 제조할 수 있다. 예를 들어, 도 3은 서로 인접해 있고 기판(320)상에 배치되어 있는 다수의 OEL 소자들(310)을 포함하는 OEL 디스플레이(300)를 보여준다. 2개 이상의 인접 소자들(310)은 다른 색상의 광, 예를 들어 적색광, 녹색광 및 청색광을 방출하기 위해 제조될 수 있다. 1개 이상의 소자들(310)은 본 발명의 화합물 또는 조성물을 포함한다.

소자들(310) 사이에 도시된 분리는 단지 예시 목적으로 도시되었다. 인접 장치들은 디스플레이 기판상의 1가지보다 많은 방향에서 접촉하거나 중첩되는 등, 또는 이들의 상이한 조합들에 의해 분리될 수 있다. 예를 들어, 투과 전도성 애노드의 평행한 스트라이프 패턴(striped pattern)을 기판상에 형성시킨 후, 정공 수송 물질의 스트라이프 패턴 및 적색광, 녹색광 및 청색광 방출 LEP 층들의 반복 스트라이프 패턴을 형성시킨 다음, 캐소드 스트립(strip)이 애노드 스트립에 수직 배향되도록 캐소드의 스트라이프 패턴을 형성시킨다. 이러한 구성은 수동 매트릭스 디스플레이를 형성하는데 적합할 수 있다. 다른 실시태양에서는, 투과 전도성 애노드 패드가 기판상에 2차원 패턴으로 제공되고, 능동 매트릭스 디스플레이를 제조하는데 적합한 바와 같은 하나 이상의 트랜지스터, 커패시터 등과 같은 어드레싱(addressing) 전자 부품들과 조합될 수 있다. 그다음 발광층(들)을 포함하는 다른 층들이 단층으로서 코팅 또는 침착되거나, 애노드 또는 전자 장치들상에 패턴화(예를 들어, 평행 스트립, 애노드과 조화된 2차원 패턴 등)될 수 있다. 임의의 다른 적합한 구성도 또한 본 발명에 의해 고려된다.

한 실시태양에서, 디스플레이(300)는 다색 디스플레이일 수 있다. 예시적인 실시태양에서, 소자들(310) 각각은 발광한다. 도 3에 도시된 일반적인 구성에 포함되는 많은 디스플레이 및 장치들이 있다. 이들 구성의 일부는 이하에서 논의한다.

OEL 배경 조명의 구성은 미가공 또는 회로화된 기판, 애노드, 캐소드, 정공 수송층, 전자 수송층, 정공 주입층, 전자 주입층, 방출층, 색상 전환층, 및 OEL 장치에 적합한 다른 층들 및 물질들을 포함할 수 있다. 상기 구성은 또한 편광기, 확산기, 도광로(light guide), 렌즈, 색상 제어 필름, 휘도 증진 필름 등을 포함할 수 있다. 응용분야는, 예를 들어 방출 물질이 열 스탬프(stamp) 전달, 적층 전달, 저항 헤드(head) 열 프린팅(printing) 등에 의해 제공되는 백색 또는 단색 대면적 단일 화소 램프; 레이저 유도 열 전달에 의해 패턴화된 다수의 가깝게 이격된 방출층들을 갖는 백색 또는 단색 대면적 단일 전극쌍 램프; 및 조율가능한 색상 다중 전극 대면적 램프를 포함한다.

저해상도 OEL 디스플레이의 구성은 미가공 또는 회로화된 기판, 애노드, 캐소드, 정공 수송층, 전자 수송층, 정공 주입층, 전자 주입층, 방출층, 색상 전환층, 및 OEL 장치에 적합한 다른 층들 및 물질들을 포함할 수 있다. 상기 구성은 또한 편광기, 확산기, 도광로, 렌즈, 광 제어 필름, 휘도 증진 필름 등을 포함할 수 있다. 응용분야는 그래픽 지시 램프(예를 들어, 아이콘); 분할형 문자 및 숫자 디스플레이(예를 들어, 기기상의 시간 지시자); 소형 단색광 수동 또는 능동 매트릭스 디스플레이; 소형 단색광 수동 또는 능동 매트릭스 디스플레이 + 집적 디스플레이(예를 들어, 휴대폰 디스플레이)의 일부로서의 그래픽 지시자 램프; 야외에서 사용되는 디스플레이에 적합할 수 있는 것과 같은 대면적 화소 디스플레이 타일(tile)(예를 들어, 각각 비교적 소수의 화소들을 갖는 다수의 모듈 또는 타일); 및 경비용 디스플레이 응용분야를 포함한다.

고 해상도 OEL 디스플레이의 구성은 미가공 또는 회로화된 기판, 애노드, 캐소드, 정공 수송층, 전자 수송층, 정공 주입층, 전자 주입층, 방출층, 색상 전환층, 및 OEL 장치에 적합한 다른 층들 및 물질들을 포함할 수 있다. 상기 구성은 또한 편광기, 확산기, 도광로, 렌즈, 광 제어 필름, 휘도 증진 필름 등을 포함할 수 있다. 응용분야는 능동 또는 수동 매트릭스 다색 또는 전색(full color) 디스플레이; 능동 또는 수동 매트릭스 다색 또는 전색 디스플레이 + 분할형 또는 그래픽 지시자 램프(예를 들어, 동일 기판상의 고해상도 장치의 레이저 유도 전달 + 아이콘의 고열 스탬프); 및 경비용 디스플레이 응용분야를 포함한다. 이러한 유형의 열 패턴화 구성 실시태양에 특히 유용한 것은 통상의 기판상에 적색광, 녹색광 및 청색광을 방출하는 방출층들을 고해상도로 전달하는 것을 포함한다. 고해상도 전달은 전달된 물질의 rms(root mean square) 가장자리 조도가 5 마이크로미터 이하임을 의미한다.

OEL 층의 제작 방법

본 발명의 또다른 양태는 유기 전계발광 장치의 제조 방법을 제공하는 것이다. 상기 장치는 화학식 I의 화합물, 또는 화학식 I의 화합물에 더하여 발광 물질, 전하 수송 물질, 전하 차단 물질, 색상 전환 물질, 중합체성 결합제 또는 이들의 조합인 제 2 화합물을 포함하는 조성물을 포함하는 유기 발광 구조를 포함한다.

특정 응용분야에서는, 예를 들어 발광형 디스플레이를 제작하기 위해 기판상에 1층 이상의 유기 전자 장치를 패터닝시키는 것이 바람직할 수 있다. 패터닝 방법은 선택적 전달, 예를 들어 레이저 열 전달, 사진식판 패터닝, 잉크젯 프린팅, 스크린 프린팅 등을 포함한다.

본 발명의 한 양태는 유기 전자 장치의 제조 방법을 제공한다. 전달층을 갖는 공여자 시트를 제조한다. 전달층은 화학식 I에 따른 화합물, 또는 화학식 I에 따른 화합물과 발광 물질, 전하 수송 물질, 전하 차단 물질, 색상 전환 물질, 중합체성 결합제 또는 이들의 조합인 제 2 화합물을 함유하는 조성물을 포함한다. 유기 전자 장치의 제조 방법은 전달층을 갖는 공여자 시트를 제조하는 것 및 공여자층으로부터 수용자 시트로 전달층을 전달하는 것을 포함한다.

본 발명의 유기 전자 장치, 예를 들어 유기 전계발광 장치를 형성하는 특히 유용한 방법은 레이저 열 패터닝에 의해 1층 이상의 전달층을 전달하는 것을 포함한다. 이 방법은, 예를 들어 미국 특허 제6,358,664호; 동 제6,284,425호; 동 제6,242,152호; 동 제6,228,555호; 동 제6,228,543호; 동 제6,221,553호; 동 제6,221,543호; 동 제6,214,520호; 동 제6,194,119호; 동 제6,114,088호; 동 제5,998,085호; 동 제5,725,989호; 동 제5,710,097호; 동 제5,695,907호; 및 동 제5,693,446호, 및 공동양도된 미국 특허원 제09/853,062호; 동 제09/844,695호; 동 제09/844,100호; 동 제09/662,980호; 동 제09/451,984호; 동 제09/931,598호; 및 동 제10/004,706호에 기재되어 있다. 패터닝 방법의 효율은 전달층의 물리적 성질에 의존할 수 있다.

1가지 파라미터는 전달층의 응집성 또는 필름 강도이다. 화상화 동안, 전달층은 바람직하게는 화상 영역과 비화상 영역을 구분짓는 선을 따라 반듯하게 깨져 패턴의 가장자리를 형성한다. 연장된 쇠 배좌에 존재하는 고도로 공역된 중합체, 예를 들어 폴리페닐렌비닐렌은 폴리아라미드 섬유에 필적하는 고 인장 강도 및 탄성 계수를 가질 수 있다. 실시예 있어서는, 발광 중합체의 레이저 열 화상화 동안 반듯한 가장자리 형성이 시도될 수 있다. 열악한 가장자리 형성의 바람직하지 않은 결과는 전달된 패턴상의 거칠거나, 찢어지거나 또는 너덜해진 가장자리이다. 또다른 파라미터는 전달층 및 수용자 표면 사이에 형성되는 결합 강도이다. 이러한 강도는 전달층과 수용자 표면의 용해도 파라미터 상용성에 의해 영향을 받을 수 있다.

일부 예에서는, 열 전달 방법 또는 다른 패터닝 방법을 개선시키거나 심지어 가능하게 하기 위해 용해도 파라미터가 상용적이라도 기판 표면상의 물질과 전달될 물질(예를 들어, 본 발명의 화합물 또는 조성물)을 선택하는 것이 바람직할 수 있다. 일례로서, 상기 물질은 이들의 용해도 파라미터 차이가 문헌 [Properties of Polymers; Their Correlation with Chemical Structure; Their Numerical Estimation and Prediction from Additive Group Contributions, third edition, edited by D. W. Van Krevelen; Elsevier Science Publishers B. V., 1990; Chapter 7, pp 189-225]에 따라 측정시 $4 \text{ J}^{1/2}\text{cm}^{-3/2}$ 및 바람직하게는 $2 \text{ J}^{1/2}\text{cm}^{-3/2}$ 이하이도록 선택할 수 있다.

물질의 용해도 파라미터는 용해도 파라미터가 상이한 일정 범위의 용매에서 물질의 평형 팽윤 정도를 측정함으로써 결정될 수 있다. 용매 자체의 용해도 파라미터는 그의 증발열로부터 측정될 수 있다. 용해도 파라미터 δ 는 하기 수학적 식 1에 따라 응집 에너지 E_{coh} 및 비체적 V 와 관련되어 있다:

$$\delta = (E_{\text{coh}}/V)^{1/2}$$

저분자량의 용매의 경우, 응집 에너지는 하기 수학적 식 2에 따라 몰 증발열 ΔH_{vap} 에 밀접하게 관련되어 있다:

$$E_{\text{coh}} = \Delta H_{\text{vap}} - p\Delta V = \Delta H_{\text{vap}} - RT$$

따라서, E_{coh} 및 δ 는 용매의 증발열로부터 계산되거나 또는 온도 함수로서의 증기압 행로로부터 계산될 수 있다.

중합체와 같은 일부 물질들은 증발하지 않을 수 있기 때문에, 이들의 용해도 파라미터를 결정하기 위해서는 간접 방법을 사용하여야 한다. 중합체의 용해도 파라미터를 결정하기 위해서는, 상이한 δ 를 갖는 다양한 용매중에서 중합체의 평형 팽

운을 측정하고, 중합체의 평형 팽윤 대 용매의 용해도 파라미터의 곡선을 그린다. 중합체의 용해도 파라미터는 최대 팽윤이 수득되는 상기 곡선상의 지점으로 정의된다. 팽윤은 중합체의 용해도 파라미터보다 더 낮거나 더 높은 용해도 파라미터를 갖는 용매에서는 더 낮을 것이다. 상기 참고문헌들에서 약속한 바와 같이 중합체에 존재하는 작용기의 추가적인 기여에 기초하여 중합체의 용해도 파라미터를 이론적으로 평가하는 몇몇 방법들이 있다.

본 발명의 화합물 또는 조성물을 함유하는 유기 전자 장치들은 적어도 부분적으로는 열 전달 공여자 시트로부터 원하는 수용자 기관으로 상기 화합물 또는 조성물을 선택적으로 열 전달함으로써 제조될 수 있다. 예를 들어, 디스플레이 및 램프는 공여자 시트상에 발광층을 코팅한 후, 발광층을 단독으로 또는 다른 장치 층들 또는 물질들과 함께 디스플레이(수용자) 기관으로 선택적으로 전달함으로써 제조될 수 있다.

도 2는 본 발명에서 사용하기에 적합한 열 전달 공여자 시트(200)의 일례를 보여준다. 공여자 소자(200)는 기저 기관(210), 임의적인 하부층(212), 임의적인 열로의 광 전환층(LTHC 층)(214), 임의적인 중간층(216), 및 화학식 I에 따른 화합물, 또는 화학식 I에 따른 화합물에 더하여 전하 수송 물질, 전하 차단 물질, 발광 물질, 색상 전환 물질, 중합체성 결합체 또는 이들의 조합인 제 2 화합물을 포함하는 전달층(218)을 포함한다. 다른 화합물들, 조성물들 또는 층들도 또한 존재할 수 있다. 적합한 공여자들 또는 공여자 층들의 예는 미국 특허 제6,358,664호; 동 제6,284,425호; 동 제6,242,152호; 동 제6,228,555호; 동 제6,228,543호; 동 제6,221,553호; 동 제6,221,543호; 동 제6,214,520호; 동 제6,194,119호; 동 제6,114,088호; 동 제5,998,085호; 동 제5,725,989호; 동 제5,710,097호; 동 제5,695,907호; 및 동 제5,693,446호, 및 공동양도된 미국 특허원 제09/853,062호; 동 제09/844,695호; 동 제09/844,100호; 동 제09/662,980호; 동 제09/451,984호; 동 제09/931,598호; 및 동 제10/004,706호에 개시되어 있다.

본 발명의 화합물 또는 조성물을 포함하는 발광성 유기 물질, 예를 들어 LEP 또는 분자적으로 도핑된 중합체 필름은 공여자 소자의 전달층을 수용자에 인접하게 위치시키고 공여자 소자를 선택적으로 가열함으로써 공여자 시트로부터 수용자 기관으로 전달되거나 또는 전달층내에서 선택적으로 전달될 수 있다. 전달 또는 선택적 전달 방법은, 예를 들어 미국 특허 제6,242,152호에 기재되어 있다. 전달층은 또한 전달층을 선택적으로 전달하지 않고 공여자 시트로부터 전달될 수 있다. 예를 들어, 전달층은 전달층을 전형적으로 열 또는 압력을 적용하여 수용자 기관과 접촉시킨 후에 이형시킬 수 있는 일시적인 라이너(liner)로서 본질적으로 작용하는 공여자 기관상에 형성될 수 있다. 적층 전달이라고 지칭되는 이러한 방법을 사용하여 전체 전달층 또는 그의 대부분을 수용자에게 전달할 수 있다.

개별 공여자 시트로부터 유래한 물질은 수용자상의 다른 물질에 인접하게 전달되어 인접 장치들, 인접 장치의 부분들 또는 동일 장치의 상이한 부분들을 형성할 수 있다. 또 다르게는, 개별 공여자 시트로부터 유래한 물질은 열 전달 또는 몇몇 다른 방법(예를 들어, 사진석판술, 차폐 마스크를 통한 침착 등)에 의해 수용자상에 미리 패턴화된 다른 층들 또는 물질들의 상부에 또는 부분적으로는 이들과의 부분적인 중복 기록상에 직접 전달될 수 있다. 2개 이상의 공여자 시트의 다양한 다른 조합들을 사용하여 각각의 공여자 시트가 장치의 하나 이상의 위치를 형성하는 장치를 형성할 수 있다. 이들 장치들의 다른 부분, 또는 수용자상의 다른 장치들은 통상적으로 사용되던 새로 개발되던 상관없이 사진석판술, 잉크젯 방법 및 다양한 다른 프린팅 또는 마스크-기재 방법들을 비롯한 임의의 적합한 방법에 의해 전체적으로 또는 부분적으로 형성될 수 있다.

도 2에서, 공여자 기관(210)은 중합체 필름일 수 있다. 적합한 필름은 미국 특허 제6,242,152호 및 동 제6,228,555호에 기재되어 있다.

도 2에서, 임의적인 하부층(212)은, 예를 들어 화상화 동안 기관과 LTHC 층 사이에서 열 유동을 제어하거나 보관, 취급, 공여자 가공 또는 화상화를 위해 공여자 소자에 기계적 안정성을 제공하기 위해서, 코팅되거나 또는 아니면 공여자 기관과 LTHC 층 사이에 배치될 수 있다. 적합한 하부층 및 하부층 제공 방법의 예는 미국 특허 제6,228,555호 및 공동양도된 미국 특허원 제09/743,114호에 개시되어 있다.

하부층은 공여자 소자에 원하는 기계적 또는 열적 성질을 부여하는 물질들을 포함할 수 있다. 예를 들어, 하부층은 공여자 기관에 비해 낮은 비열 × 밀도 또는 낮은 열 전도성을 나타내는 물질을 포함할 수 있다. 이러한 하부층을 전달층으로의 열 유동을 증가시키기 위해, 예를 들어 공여자의 화상 감도를 개선시키기 위해 사용할 수 있다.

하부층은 또한 그의 기계적 성질 또는 기관과 LTHC 사이의 접촉성을 위한 물질을 포함할 수 있다. 기관과 LTHC 층 사이의 접촉성을 개선시키는 하부층을 사용하면 전달된 화상에서 일그러짐 현상이 적을 수 있다. 일례로서, 일부 경우에는 공여자 매체의 화상화 동안 나타날 수 있는 LTHC 층의 박리 또는 분리를 감소시키거나 제거하는 하부층을 사용할 수 있다. 이는 전달층의 전달된 부분에 의해 나타나는 물리적인 일그러짐 현상의 양을 감소시킬 수 있다. 그러나, 다른 경우에는, 예를 들어 화상화 동안 열 절연 기능을 제공할 수 있는 층들간의 공기 갭(gap)을 생성하기 위해, 화상화 동안 층들간 또는 층

들 사이에서 적어도 어느 정도의 분리를 촉진시키는 하부층을 사용하는 것이 바람직할 수 있다. 화상화 동안의 분리는 또한 화상화 동안 LTHC 층을 가열함으로써 생성될 수 있는 기체 방출용 채널(channel)을 제공할 수 있다. 이러한 채널을 제공하는 것은 화상상의 결합을 더욱 줄일 수 있다.

하부층은 실질적으로 화상 과정에서 투과성거나 또는 화상 광선을 적어도 부분적으로 흡수하거나 반사할 수 있다. 하부층에 의한 화상 광선의 감쇠 또는 반사는 화상화 동안의 열 발생을 제어하기 위해 사용할 수 있다.

도 2에서, LTHC 층(214)은 공여자 시트로 조사 에너지를 커플링시키기 위해 본 발명의 공여자 시트에 포함될 수 있다. LTHC 층은 바람직하게는 입사 광선(예를 들어, 레이저 광)을 흡수하여 공여자 시트로부터 수용자로 전달층을 전달할 수 있게 하기 위해 입사 광선의 적어도 일부를 열로 전환시키는 광선 흡수기를 포함한다. 적합한 LTHC 층은, 예를 들어 미국 특허 제6,242,152호 및 제6,228,555호에 기재되어 있다.

도 2에서, 임의적인 중간층(216)은 LTHC 층(214) 및 전달층(218) 사이에 배치될 수 있다. 중간층은, 예를 들어 전달층의 전달된 부분의 손상과 오염을 최소화시키기 위해 사용될 수 있으며, 또한 전달층의 전달된 부분에서 일그러짐 현상을 감소시킬 수 있다. 중간층은 또한 공여자 시트의 나머지에 대한 전달층의 접촉성에 영향을 미칠 수 있다. 전형적으로, 중간층은 높은 내열성을 갖는다. 바람직하게는, 중간층은 화상화 조건하에, 특히 전달된 화상이 기능을 발휘할 수 없게 되는 수준으로 뒤틀리거나 화학적으로 분해되지 않는다. 중간층은 전형적으로 전달 방법 동안 LTHC 층과의 접촉을 유지하며 실질적으로 전달층과 함께 전달되지 않는다. 적합한 전달층은, 예를 들어 미국 특허 제6,242,152호 및 동 제6,228,555호에 기재되어 있다.

도 2에서, 열 전달층(218)은 공여자 시트(200)에 포함된다. 전달층(218)은 본 발명의 화합물 또는 조성물을 포함하며, 1층 이상에 배치된 임의의 다른 적합한 물질 또는 물질들을 단독으로 또는 다른 물질들과 조합하여 포함할 수 있다. 전달층(218)은 공여자 소자가 직접 열에 노출되거나 또는 열로의 광 전환기 물질에 의해 흡수되어 열로 전환될 수 있는 화상 광선에 노출되는 경우, 임의의 적합한 전달 기작에 의해 한 단위로 또는 부분적으로 선택적으로 전달될 수 있다.

본 발명은 추가로 화학식 I의 화합물, 또는 화학식 I의 화합물에 더하여 발광 물질, 전하 수송 물질, 전하 차단 물질, 색상 전환 물질, 중합체성 결합제 또는 이들의 조합인 제 2 화합물을 포함하는 조성물을 포함하는 발광 전달층을 제공한다. 전달층을 제공하는 1가지 방식은 공여자 기관, 또는 전술한 층들중 임의의 층, 즉 하부층, 중간층, 열로의 광 전환층상에 발광 물질을 용액 코팅시키는 것이다. 이 방법에서, 발광 물질은 적합한 상용성 용매를 첨가하여 가용화되고, 스핀-코팅(spin-coating), 그라비아 코팅, 마이어 로드(Mayer rod) 코팅, 나이프 코팅 등에 의해 공여자 기관 또는 상기 층들중 임의의 한 층상에 코팅될 수 있다. 선택된 용매는 바람직하게는 공여자 시트에 이미 존재하는 층들중 어느 것보다 바람직하지 않은 상호작용(예를 들어, 팽윤 또는 용해)을 하지 않는다. 그다음 코팅물은 어닐링(annealing)될 수 있고, 용매는 증발되어 전달층을 제공한다.

그다음 전달층은 생성된 공여자 시트 또는 소자로부터 근접하게 위치하는 수용자 기관으로 선택적으로 열 전달될 수 있다. 바람직한 경우, 단일 공여자 시트를 사용하여 다층 구성이 전달되도록 하나보다 많은 전달층이 존재할 수 있다. 적합한 수용자 기관은, 예를 들어 미국 특허 제6,242,152호 및 동 제6,228,555호에 기재되어 있다.

수용자 기관은 전극, 트랜지스터, 커패시터, 절연 릫, 이격자(spacer), 색 필터, 흑색 매트릭스, 정공 수송층, 전자 수송층, 및 전자 디스플레이 또는 다른 장치에 유용한 다른 소자들중 임의의 하나 이상으로 예비 패터닝될 수 있다.

본 발명은 하기 실시예에 의해 추가로 기술되지만, 하기 실시예는 단지 예시 목적으로 제공된 것이지 어떠한 방식으로든 한정하고자 함이 아니다.

실시예

실시예 1 내지 23은 본 발명의 화합물 및 이를 제조하는데 사용되는 중간체의 합성을 기술한다. 모든 시약들은 달리 지시하지 않는 한 알드리치 케미칼 캠페니(Aldrich Chemical Company)로부터 구입하였다. 모든 화합물들은 $^1\text{H-NMR}$ 에 의해 특성분석하였으며, 이하에 도시된 구조에 상응함이 밝혀졌다.

용어

CBP - 정공 수송제, 4,4'-비스(카르바졸-9-일)바이페닐, 미국 플로리다주 주피터 소재 H. W. 샌즈(Sands)로부터 구입함.

C80 - 2-(2,5-디클로로페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸의 중합으로부터 유도된 페닐 말단 캡핑된 중합체. 2-(2,5-디클로로페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸의 합성은 하기 실시예 1에 기재되어 있다. 이 물질은 다음과 같이 중합되고 말단 캡핑되었다.

마개 및 질소 퍼지(purge)가 장착된 플라스크에, 실시예 1의 2-(2,5-디클로로페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸 4.10 g (9.77 mmol), 트리페닐포스핀 2.85 g (10.89 mmol), 및 무수 니켈(II) 브로미드 0.31 g (1.421 mmol)을 도입시켰다. 여기에 75 ml의 무수 DMF 및 25 ml의 무수 톨루엔을 첨가하였다. 이를 딘-스타크(Dean-Stark) 응축기를 사용하여 공비증류시킨 후, 대부분의 톨루엔을 유거시켰다. 냉각된 반응 용액에 강한 질소 퍼지하에 추가로 0.31 g (1.421 mmol)의 무수 니켈(II) 브로미드를 첨가하였다. 이를 80°C에서 30분간 가열한 후, 말단-캡핑제로서 1.0 g의 클로로벤젠을 첨가하였다. 반응을 8시간 동안 80°C에서 진행하였다. 냉각된 반응 혼합물을 약 500 ml의 아세톤에 붓고 여과하였다. 고체박을 메틸렌 클로리드에 용해시키고 1N HCl을 첨가한 후, 2상 시스템을 약 1시간 동안 교반하였다. 생성된 고체를 여거시키고 여액을 분리 깔때기로 옮겼다. 하부 유기층을 분리하고 과량의 메탄올에 부었다. 고체를 수집하고, 메탄올로 세척한 후, 건조시켜 2.8 g의 중합체를 수득하였다.

GPC 분석 결과, 1.7×10^5 의 중량 평균 분자량(Mw), 4.9×10^4 의 수 평균 분자량(Mn), 및 3.55의 다분산도(PD)를 나타내었다.

Ir(ppy)₃ - 분자 방출제, 트리스(2-페닐피리딘)이리듐(III), 미국 플로리다주 주피터 소재 H. W. 샌즈로부터 구입함.

PBD - 전자 수송제, 2-(4-바이페닐)-5-(4-t-부틸페닐)-1,3,4-옥사디아졸, 미국 플로리다주 주피터 소재 H. W. 샌즈로부터 구입함.

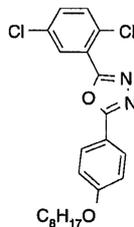
PEDT/PSS - 공중합체 (폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리스티렌 술포네이트), 독일 레버쿠젠 소재의 바이엘 아게 (Bayer AG)로부터 바이트론(Baytron)TM P4083으로 구입함.

PVK - 정공 수송제, 폴리(9-비닐카르바졸), 미국 위스콘신주 밀워키 소재의 알드리치로부터 구입함.

테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)은 미국 매사추세츠주 뉴베리포트 소재의 스트렘 케미칼(Strem Chemical)로부터 구입하였다.

TPD - 정공 수송제, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)벤지딘, 미국 플로리다주 주피터 소재 H. W. 샌즈로부터 구입함.

실시예 1: 2-(2,5-디클로로페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸의 합성



A부: 메틸 4-옥톡시벤조에이트의 합성

플라스크에 251.0 g (1.65 mol)의 메틸 4-히드록시벤조에이트, 276.37 g (1.99 mol)의 탄산칼륨 및 1200 g의 아세톤을 도입시켰다. 이를 45분간 환류시킨 후, 1시간에 걸쳐 386.17 g (1.99 mol)의 1-옥틸브로미드를 적가하였다. 반응 혼합물을 2일에 걸쳐 환류시켰다. 냉각된 반응 혼합물을 여과하고 여액을 증발시켜 오일을 수득하였다. 이를 에틸 아세테이트에

녹이고 5% NaOH (2 × 100 ml) 이후 물 (2 × 100 ml)로 추출하였다. 유기층을 건조시키고(MgSO₄), 농축시킨 후, 1L 3구 플라스크로 옮겼다. 플라스크의 내용물을 고진공 증류시켜 과량의 1-옥틸브로미드를 제거하였다. 포트(pot) 잔류물은 본질적으로 순수한 메틸 4-옥톡시벤조에이트 (376g, 86%)이었다.

B부: 4-옥톡시벤조일 히드라지드의 합성

A부로부터의 플라스크의 내용물에 387.14 g의 98% 히드라진을 첨가하였다. 이를 5시간 동안 환류시켰다(106℃). 냉각된 용액을 3L의 물에 붓고 침전된 고체를 여과한 후, 다량의 물로 세척하고, 진공에서 건조시켜 4-옥틸벤조일 히드라지드를 수득하였다(343 g, 91% 수율, mp 90℃).

C부: 2,4-디클로로벤조일 클로리드의 합성

환류 응축기 및 자석 교반 막대가 장착된 2L 플라스크에 150 g (0.785 mol)의 2,5-디클로로벤조산 및 575 ml (7.85 mol)의 티오닐 클로리드를 도입시켰다. 혼합물을 8시간 동안 환류시켰다. 대부분의 티오닐 클로리드를 유거시킨 후, 나머지를 회전 증발시켜 제거하였다. 증류시켜 130 g (79% 수율)의 2,4-디클로로벤조일 클로리드를 수득하였다(포트 온도 110℃; 증류 온도 70℃/0.70 mmHg).

D부: 2,5-디클로로-N'-[4-(옥틸옥시)벤조일]벤조히드라지드의 합성

질소 블랭킷(blanket)하에, 8.8 g (0.087 mol)의 2,4-디클로로벤조일 클로리드를 348 ml의 무수 클로로포름중의 23.0 g (0.087 mol)의 4-옥톡시벤조일 히드라진 및 12.13 ml (8.8 g, 0.087 mol)의 새로 증류된 트리에틸아민의 용액에 첨가하였다. 약 1시간 동안 교반한 후에, 요구되는 생성물의 조밀한 백색 침전물이 형성되었다. 다음날까지 계속 교반하였다. 생성물을 여과하여 수집하고 에탄올/물로부터 재결정화시켜 백색 고체로서 31 g (81.5% 수율)의 2,5-디클로로-N'-[4-(옥틸옥시)벤조일]벤조히드라지드를 수득하였다.

E부: 2-(2,5-디클로로페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸의 합성

기계식 교반기 및 온도계가 장착된 250 ml의 플라스크에 30 g (0.0686 mol)의 2,5-디클로로-N'-[4-(옥틸옥시)벤조일]벤조히드라지드 및 181 ml의 인 옥시클로리드를 도입시켰다. 이를 환류시키고 8시간 동안 교반하였다. 약 100 ml의 인 옥시클로리드를 감압하에 유거시켰다. 냉각된 잔류물을 수동 교반하에 물 및 분쇄 얼음상에 붓고, 얼음이 녹을 때까지 정치시켰다. 침전된 백색 고체를 여과하여 수집하고, 건조시키고 에탄올로부터 재결정화시켰다. 25.7 g (89% 수율, mp 86℃)의 2-(2,5-디클로로페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸이 수득되었다. 구조를 1D 및 2D NMR 기술로 명확하게 확인하였고, 다음을 얻었다:

¹H-NMR (500

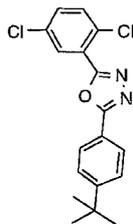
MHz, CDCl₃) 0.89 (3H, t), 1.31 (8H, m), 1.46 (2H, q), 1.79 (2H, q), 6.97 (2H, d), 7.38

(1H, dd), 7.44 (1H, d), 8.01 (2H, d), 8.06 (1H, d); ¹³C-NMR (500 MHz, CDCl₃)

13.90, 22.44, 25.79, 28.91, 29.01, 29.13, 31.59, 68.08, 114.78, 115.37, 124.27, 128.58,

130.23, 130.87, 131.75, 132.20, 132.87, 161.03, 161.98, 164.95.

실시예 2: 2-(4-3급-부틸페닐)-5-(2,5-디클로로페닐)-1,3,4-옥사디아졸의 합성



A부: N-(4-3급-부틸벤조일)-2,5-디클로로벤조히드라지드의 합성

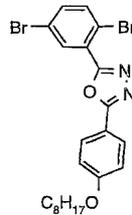
4-3급-부틸벤조일 히드라지드 (185 g, 0.96 mol) 및 수소화칼슘으로부터 새로이 증류된 트리에틸아민 (97.37 g, 0.96 mol)을 10L의 플라스크중의 4L의 디클로로메탄에 첨가하였다. 여기에 기계식 교반하에 201.5 g의 2,4-디클로로벤조일 클로리드를 첨가하였다. 3시간 후에 생성물은 전혀 침전하지 않았으며, 반응을 실온에서 다음날까지 교반하였다. 생성물을 4L의 hexan을 첨가하여 침전시켰다. 여과, hexan 세척 및 강제형 공기 오븐내 80°C에서의 가열에 의해 생성물을 99% 수율로 수득하였다.

B부: 2-(4-3급-부틸페닐)-5-(2,5-디클로로페닐)-1,3,4-옥사디아졸의 합성

2L의 플라스크에 200 g의 N-(4-3급-부틸벤조일)-2,5-디클로로벤조히드라지드 (0.55 mol) 및 1378 ml의 인 옥시클로리드 (2267 g, 14.78 mol)를 도입시켰다. 이를 8시간 동안 환류시킨 후, 용매를 약한 진공하에서 증발시켰다. 잔류물을 분쇄 얼음상에 붓고, 다음날까지 정치시켰다. 여과하여 끈적한 덩어리를 수득하였고, 이를 메탄올에 용해시킨 후, 소량의 물을 첨가하여 고체 물질을 수득하였다. 여과 및 건조에 의해 백색 결정질 고체로서 112 g의 생성물을 수득하였다(59 % 수율).

실시예 3: 2-(2,5-디브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]1,3,4-옥사디아졸의 합성

본 실시예는 2-(2,5-디브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]1,3,4-옥사디아졸의 합성을 기술하며, 또한 스즈키(Suzuki coupling) 반응에 유용한 일정 범위의 아릴 옥사디아졸 디브로미드 중간체의 일반적인 제조 방법을 제공한다.



A부: 2,5-디브로모벤조일 클로리드의 합성

실시예 1의 C부의 일반적인 방법에 의해, 50.0 g (0.1786 mol)의 2,5-디브로모벤조산을 150 mL의 티오닐 클로리드와 반응시키고 증류시킨 후에 40 g의 2,5-디브로모벤조일 클로리드를 수득하였다.

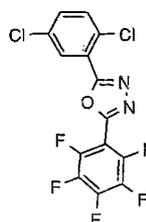
B부: 2,5-디브로모-N'-[4-(옥틸옥시)벤조일]벤조히드라지드의 합성

실시예 2의 A부의 일반적인 방법에 의해, 2,5-디브로모벤조일 클로리드 (57.43 g, 0.11925 mol), 4-옥톡시벤조일 히드라지드 (50.88 g, 0.1925 mol), 및 트리에틸아민 (27 ml, 19.48 g, 0.1925 mol)을 800 ml의 메틸렌 클로리드중에서 반응시켜 생성물을 수득하였다. DMF/물로부터 생성물을 재결정화시켜 79.38 g (78% 수율)의 2,5-디브로모-N'-[4-(옥틸옥시)벤조일]벤조히드라지드를 수득하였다.

C부: 2-(2,5-디브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]1,3,4-옥사디아졸의 합성

실시예 2의 B부의 일반적인 방법에 의해, 39.1 g (0.0743 mol)의 N-(2,5-디브로모벤조일)-4-(옥틸옥시)벤조히드라지드를 203 ml의 인 옥시클로리드와 8시간 동안 축합환화시키고, EtOH/물로부터 재결정화시킨 후에, 33.6 g (89% 수율)의 2-(2,5-디브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]1,3,4-옥사디아졸을 수득하였다.

실시예 4: 2-(2,5-디클로로페닐)-5-(펜타플루오로페닐)-1,3,4-옥사디아졸의 합성



A부: 2,5-디클로로벤조히드라이드의 합성

플라스크에 30 g (0.1463 mol)의 메틸 2,5-디클로로벤조에이트 및 46.89 g (1.463 mol)의 히드라진을 도입시켰다. 이를 5시간 동안 환류시켰다. 냉각된 반응 혼합물을 과량에 물에 부어 회백색 고체를 침전시켰다. 여과 및 진공 건조에 의해 30 g의 고체를 수득하였다. ¹H-NMR 결과, 물질이 매우 순수한 2,5-디클로로벤조히드라이드임이 확인되었고, 따라서 추가로 정제하지 않고 사용하였다.

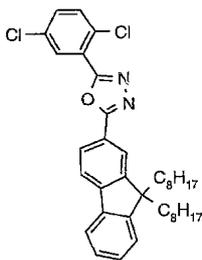
B부: 2,5-디클로로-N'-(펜타플루오로벤조일)벤조히드라이드의 합성

실시에 2의 A부의 일반적인 방법에 의해, 21.0 g (0.1024 mol)의 2,5-디클로로벤조히드라이드를 메틸렌 클로리드/DMF (1L, 1:1)중의 23.6 g (0.1024 mol)의 펜타플루오로벤조일 클로리드 및 14.3 ml (0.1026 mol)의 트리에틸아민과 반응시켜, DMF/물로부터 재결정화시킨 후에, 22.51 g (55% 수율, mp 227-232°C)의 2,5-디클로로-N'-(펜타플루오로벤조일)벤조히드라이드를 수득하였다.

C부: 2-(2,5-디클로로페닐)-5-(펜타플루오로페닐)-1,3,4-옥사디아졸의 합성

실시에 2의 B부의 일반적인 방법에 의해, POCl₃중에서 21.0 g (0.05377 mol)의 2,5-디클로로-N'-(펜타플루오로벤조일)벤조히드라이드를 반응시키고, 에탄올/물로부터 재결정화시켜 16.59 g (81% 수율)의 2-(2,5-디클로로페닐)-5-(펜타플루오로페닐)-1,3,4-옥사디아졸을 수득하였다.

실시에 5: 2-(2,5-디클로로페닐)-5-(9,9-디옥틸-9H-플루오렌-2-일)-1,3,4-옥사디아졸의 합성



A부: 2-브로모-9,9-디옥틸플루오렌의 합성

기계식 교반기가 장착된 3L 플라스크에 2-브로모플루오렌 (45 g, 183.6 mmol) 및 150 mL의 DMSO를 충전시켰다. N₂ 분위기하에 80 mL의 50% NaOH 수용액 및 2.72 g의 벤질트리에틸암모늄 클로리드 (2.72 g, 11.98 mmol)를 첨가하였다. 이를 실온에서 2시간 동안 교반하였다. 격렬하게 기계식 교반하면서, n-옥틸브로마이드 (84.96 g, 440 mmol)를 적하 깔때기를 통해 첨가하였다(발열반응). 2시간 동안 계속 교반하였다. 반응 혼합물에 물/에테르의 1:1 혼합물 500 mL를 첨가하고, 유기층을 분리한 후, 염수 및 이어서 물로 연속적으로 세척하였다. 황산마그네슘상에서 건조시키고 용매를 증발시켜 오일을 수득하였다. 칼럼 크로마토그래피(실리카겔; 이동상으로서 헥산)에 의해 정제하여 옅은 오일로서 67 g (78% 수율)의 2-브로모-9,9-디옥틸플루오렌을 수득하였다.

B부: 9,9-디옥틸-9H-플루오렌-2-카르복실산의 제조

질소 유입구 및 고무 마개가 장착된 플라스크에 2-브로모-9,9-디옥틸플루오렌 (34.18 g, 72.8 mmol) 및 무수 테트라히드로푸란 (300 mL)을 도입시켰다. 용액을 -60°C로 냉각시키고, n-부틸 리튬 (29.1 mL, 헥산중 2.5M, 72.8 mmol)을 주사기를 통해 첨가하였다. 반응 혼합물이 적색으로 변하는 것을 관찰하였다. -60°C에서 1시간 동안 교반한 후, 반응 혼합물을 분말상 드라이아이스에 붓고, 하룻밤 동안 정치시켰다. 이 혼합물을 1M HCl로 산성화시키고, 클로로포름으로 추출하였다. 클로로포름 추출물을 물로 희석하고, 황산마그네슘상에서 건조시킨 후, 농축시켜 오일로서 산을 수득하였다.

C부: 9,9-디옥틸-9H-플루오렌-2-카르보닐 클로리드의 합성

9,9-디옥틸-9H-플루오렌-2-카르복실산 (32.36 g, 74.5 mmol)을 티오닐 클로리드 (93 g, 782 mmol)중에서 8시간 동안 환류시켰다. 미반응 티오닐 클로리드를 유거시키고, 잔류물을 추가로 정제하지 않고 사용하였다.

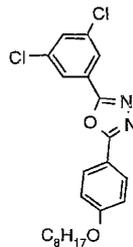
D부: 2,5-디클로로-N'-[(9,9-디옥틸-9H-플루오렌-2-일)카르보닐]벤조히드라지드의 합성

2,5-디클로로벤조히드라지드 (1당량) 및 트리에틸아민 (1당량)을 고체 물질이 용해될 때까지 500 mL의 1,2-디클로로에탄에서 가온시켰다. 냉각시켰을 때, 9,9-디옥틸-9H-플루오렌-2-카르보닐 클로리드 (1당량)를 첨가하고, 혼합물을 실온에서 2일간 교반하였다. 불용성 물질을 여거시키고, 여액을 증발시켜 오일을 수득하였다. 이를 헵탄에 녹이고, 침전된 고체를 여거시켰다. 잔류 용액을 건조시키고(MgSO₄) 농축시켜 원하는 중간체를 수득하였다.

E부: 2-(2,5-디클로로페닐)-5-(9,9-디옥틸-9H-플루오렌-2-일)-1,3,4-옥사디아졸의 합성

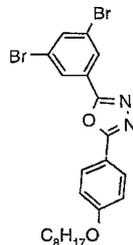
2,5-디클로로-N'-[(9,9-디옥틸-9H-플루오렌-2-일)카르보닐]벤조히드라지드 (20.0 g, 32.17 mmol) 및 인 옥시클로리드 (91 mL)를 8시간 동안 환류시켰다. 반응을 부피의 약 절반이 남아있을 때까지 증류시켰다. 포트 분획물을 냉각시키고, 계속 교반하면서 얼음/물 혼합물에 부었다. 형성된 끈적한 페이스트를 헥산으로 추출하고, 헥산 추출물을 건조시킨 후 농축시켰다. 칼럼 크로마토그래피 (헥산중 5% 에틸 아세테이트)에 의해 14.98 g (77% 수율)의 원하는 화합물을 오일로서 수득하였다.

실시예 6: 2-(3,5-디클로로페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸의 합성



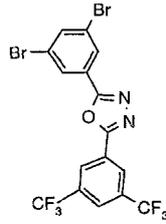
실시예 3에서의 2-(2,5-디브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸의 합성에 대한 일반적인 방법에 의해, 3,5-디클로로벤조일 클로리드 (20.0 g, 0.010 mol)를 4-옥톡시벤조일 히드라지드 (25.24 g, 0.010 mol)와 반응시켜 중간체인 3,5-디클로로-N'-[4-(옥틸옥시)벤조일]벤조히드라지드 (25 g, 60% 수율)를 수득하였다. 중간체인 3,5-디클로로-N'-[4-(옥틸옥시)벤조일]-벤조히드라지드 (16.0 g)를 POCl₃ (83 mL)와 축합환화시켜 2-(3,5-디클로로페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸 (11.16 g, 73% 수율)을 수득하였다.

실시예 7: 2-(3,5-디브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸의 합성



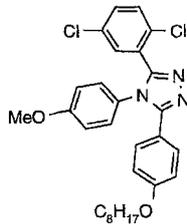
실시예 3에서의 2-(2,5-디브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸의 합성에 대한 일반적인 방법에 의해, 3,5-디브로모벤조일 클로리드 (20.13 g, 0.06747 mol)를 4-옥톡시벤조일 히드라지드 (17 g, 0.06747 mol)와 반응시켜 중간체인 3,5-디브로모-N'-[4-(옥틸옥시)벤조일]벤조히드라지드 (12.87 g, 36% 수율)를 수득하였다. 중간체인 3,5-디브로모-N'-[4-(옥틸옥시)벤조일]-벤조히드라지드 (12.17 g)를 POCl₃ (63 mL)으로 축합환화시켜 2-(3,5-디브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸 (6.12 g, 52% 수율)을 수득하였다.

실시예 8: 2-(3,5-디브로모페닐)-5-[3,5-비스(트리플루오로메틸)페닐]-1,3,4-옥사디아졸의 합성



실시에 1의 B부의 일반적인 방법에 의해, 메틸-3,5-비스(트리플루오로메틸)벤조에이트를 98% 히드라진과 반응시켜 중간체인 3,5-비스(트리플루오로메틸)벤조일 히드라지드를 수득하였다. 실시에 2의 A부의 일반적인 방법에 의해, 3,5-디브로모벤조일 클로리드를 3,5-비스(트리플루오로메틸)벤조일 히드라지드와 트리에틸아민의 존재하에 반응시켜 중간체인 3,5-디브로모-N'-[3,5-비스(트리플루오로메틸)벤조일]벤조히드라지드를 수득하였다. 실시에 2의 B부의 일반적인 방법에 의해, 상기 중간체를 POCl₃로 축합환화시켜 2-(3,5-디브로모페닐)-5-[3,5-비스(트리플루오로메틸)페닐]-1,3,4-옥사디아졸을 수득하였다.

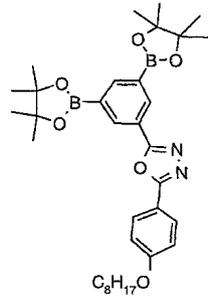
실시에 9: 3-(2,5-디클로로페닐)-4-(4-메톡시페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-4H-1,2,4-트리아졸의 합성



기계식 교반기, 환류 응축기 및 질소 유입구가 장착된 1L 환저 플라스크에 2,5-디클로로-N'-[4-(옥틸옥시)벤조일]벤조히드라지드 (40 g, 0.09146 mol, 1당량), p-아니시딘 (67.60 g, 0.5487 mol, 6당량) 및 300 mL의 1,2-디클로로벤젠을 도입시켰다. 기계식 교반시켜 고체를 부분적으로 용매화시켰다. 인 트리클로리드 (12.56 g, 0.0146 mol, 1당량)를 첨가하고, 플라스크의 내용물을 12시간 동안 180℃에서 가열하였다. 용매를 약한 진공하에 제거시키고, 잔류물을 1:1 아세톤/헵탄 혼합물 1L와 함께 2L 플라스크에 옮겼다. 고체 물질을 제거시키고, 아세톤에 용해시켰다. 충분한 헵탄을 첨가하여 자주색 오일성 슬러지(sludge)를 침전시켰다. 아세톤/헵탄 층의 시험 샘플을 헵탄에 희석시켜 오일성 슬러지가 완전히 침전되었음을 보장하였다. 아세톤/헵탄 층을 따라내고, 추가로 많은 과량의 헵탄으로 희석시켜 백색 고체를 침전시켰다. 이를 제거시키고, 아세톤에 용해시킨 후, 헵탄에 재침전시켰다. 여과 및 건조에 의해 3-(2,5-디클로로페닐)-4-(4-메톡시페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-4H-1,2,4-트리아졸 (16.25 g, 34% 수율)을 수득하였다.

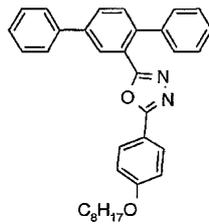
실시에 10: 2-(3,5-비스(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸의 합성

본 실시예는 2-(3,5-비스(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸을 기술하며, 또한 일정 범위의 유용한 아릴 옥사디아졸, 트리아졸 및 티아디아졸 디보론산 중간체의 일반적인 제조 방법을 제공한다. 문헌[Ranger 등, *Chem. Commun.* 1597-1598 (1997)]에서 보고된 바와 같은 아릴보론산 에스테르 합성의 일반적인 절차는 상기 고리 시스템에서는 부틸 리튬과 옥사디아졸의 부반응으로 인해 잘 작용하지 않는다. 양호한 전환율은 문헌[Ishiyama, Murata, 및 Miyaura, *J. Org. Chem.* 1995, **60**, 7508-7510]에 기재된 바와 같이 아릴보론산 에스테르를 제조하기 위한 일반적인 절차를 사용하여 수득할 수 있다.



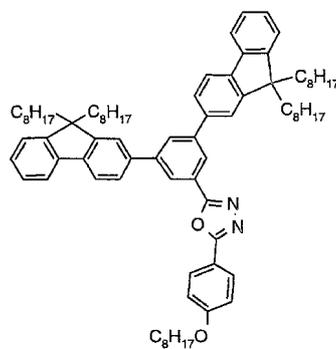
상기 일반적인 절차에 따라, 2-(3,5-디브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸, 비스(피나콜라토)디보론, 아세트산칼륨 및 [1,1'-비스(디페닐포스포노)페로센]디클로로팔라듐(II) (디클로로메탄과 1:1로 착물화됨-알드리치, 0.089 g, 0.1 mmol)을 질소하에 DMSO에서 80°C에서 18시간 동안 반응시켰다. 냉각시킨 후에, 반응 혼합물을 얼음 물에 붓고, 수층을 메틸렌 클로리드로 3회 세척한 후, 합친 유기 분획물을 염수로 세척하고, 황산 마그네슘상에서 건조시킨 후, 얇은 실리카층을 통해 여과하고 회전증발시켜 원하는 2-(3,5-비스(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸을 수득하였다. 이들 일반적인 방법을 사용하여 화학식 I의 화합물을 제조 하는데 유용한 광범위의 아릴렌 옥사디아졸, 트리아졸 및 티아디아졸 디보론산 에스테르 중간체들을 제조할 수 있다.

실시예 11: 2-(4-옥틸옥시-페닐)-5-[1,1',4',1''터페닐-2'-일]-[1,3,4]옥사디아졸의 합성



실시예 3의 2-(2,5-디브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]1,3,4-옥사디아졸 (3.0 g), 페닐 보론산 (2.2 g), 및 NaHCO₃ (3.4 g)을 에틸렌 글리콜 디메틸 에테르 60 mL 및 물 60 mL와 함께 혼합하였다. 혼합물을 1시간 동안 질소로 퍼징한 후, 0.35 g의 (Ph₃P)₄Pd를 첨가하고, 반응을 질소하에 20시간 동안 환류시켰다. 반응을 냉각시킨 후, 수층을 유기층으로부터 분리하고 톨루엔으로 세척하였다. 합친 유기층을 물로 2회 세척한 후, Na₂SO₄로 건조시켰다. 건조제를 여과한 후, 유기층을 증발시켜 건조시켰다. 잔류물을 에탄올로부터 3회 재결정화시켜 생성물로서 회색 고체(2.0 g, 67% 수율)를 수득하였다.

실시예 12: 2-[3,5-비스-(9,9-디옥틸-9H-플루오렌-2-일)-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸의 합성



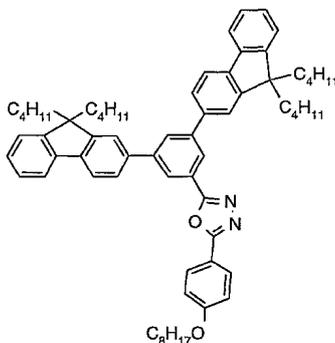
A부: 2-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-디옥틸플루오렌의 합성

2-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-디옥틸플루오렌을 문헌[Ranger 등, *Chem. Commun.* 1597-1598 (1997)]에 보고되고 실시예 19에 기재된 바와 같이 아틸보론산 에스테르 합성의 일반적인 절차에 의해 2-브로모-9,9-디옥틸-플루오렌 (실시에 5의 A부)으로부터 합성하였다.

B부: 2-[3,5-비스-(9,9-디옥틸-9H-플루오렌-2-일)-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸의 합성

플라스크에 2.8 mL의 톨루엔, 2-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-디옥틸플루오렌 (0.80 g, 1.5 mmol), 실시예 7의 2-(3,5-디브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸 (0.375 g, 0.7 mmol), 알리콤파트 (Aliquat)TM 336 (0.15 g, 0.4 mmol) 및 1.4 mL의 수성 2M Na₂CO₃를 도입시켰다. 이를 1시간 동안 N₂로 퍼징시켰다. 플라스크를 약 80°C로 가열한 후, 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐(0) (12 mg, 0.01 mmol)을 질소 퍼징하에 첨가하였다. 플라스크의 내용물을 21시간 동안 환류시켰다. 반응 플라스크를 실온으로 냉각시키고, 약 5 mL의 물을 첨가한 후, 유기층을 분리하였다. 수층을 3 × 15 mL 에테르로 추출하였다. 유기층을 수거하고, 포화 NaCl로 연속적으로 2회 세척한 후, MgSO₄상에서 건조시켰다. 농축시켜 오일을 수득하고, 이를 플래쉬 크로마토그래피 (용출액: 헥산중 10% 에틸 아세테이트)로 정제하고 진공하에 오일로서 30분간 건조시켜 0.59 g의 2-[3,5-비스-(9,9-디옥틸-9H-플루오렌-2-일)-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸을 수득하였다.

실시에 13: 2-[3,5-비스-(9,9-디부틸-9H-플루오렌-2-일)-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸의 합성



A부: 2-브로모-9,9-디부틸플루오렌의 합성

2-브로모-9,9-디부틸플루오렌을 실시예 5의 A부에 약술된 일반적인 절차에 따라 2-브로모플루오렌 및 1-브로모부탄으로부터 합성하였다.

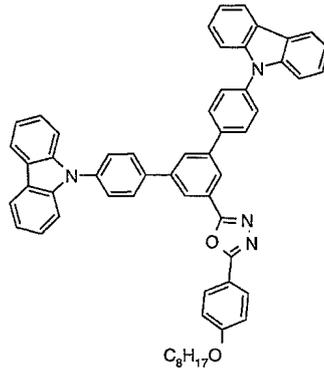
B부: 2-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-디부틸플루오렌의 합성

2-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-디부틸플루오렌을 실시예 12의 A부에 기재된 방법에 의해 2-브로모-9,9-디부틸플루오렌으로부터 합성하였다.

C부: 2-[3,5-비스-(9,9-디부틸-9H-플루오렌-2-일)-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸의 합성

실시에 12의 B부에 약술된 절차들을 사용하여, 2-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-디부틸플루오렌 (1.88 g, 4.6 mmol) 및 실시예 7의 2-(3,5-디브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸 (1.13 g, 2.2 mmol)을 반응시켜 상응하는 2-[3,5-비스-(9,9-디부틸-9H-플루오렌-2-일)-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸을 수득하였다.

실시에 14: 2-[3,5-비스-(페닐-4-일-9H-카르바졸)-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸의 합성



A부: 4-브로모페닐-9H-카르바졸의 합성

본원에 참고로 인용된 문헌[Goodbrand 및 Hu, *J. Org. Chem.* 1999, **64**, 670-674]에 의해 기재된 바와 같이 울만(Ullmann) 축합 반응의 리간드 가속화 촉매 작용에 대해 일반적인 절차에 따라, 카르바졸 (14.77 g, 88.4 mmol), 1-브로모-4-요오도벤젠 (25.00 g, 88.4 mmol), 1,10-페난트롤린 (0.6365 g, 3.3145 mmol), 염화제1구리 (0.3128 g, 3.2145 mmol) 및 탄산칼륨 (95.38 g, 691.12 mmol)을 70 mL의 무수 톨루엔과 함께 혼합하였다. 용액을 질소로 퍼징시키고, 질소하에 82시간 동안 환류 가열한 후, 실온으로 냉각시키고, 이어서 물로 세척하고, 여과하고, 황산마그네슘상에서 건조시킨 후, 증발시켜 건조시켰다. 에틸아세테이트로부터 재결정화시켜 4-브로모페닐카르바졸 및 4-요오도페닐카르바졸의 70:30 혼합물 18.5 g을 수득하였고, 이를 추가로 정제하지 않고 사용하였다.

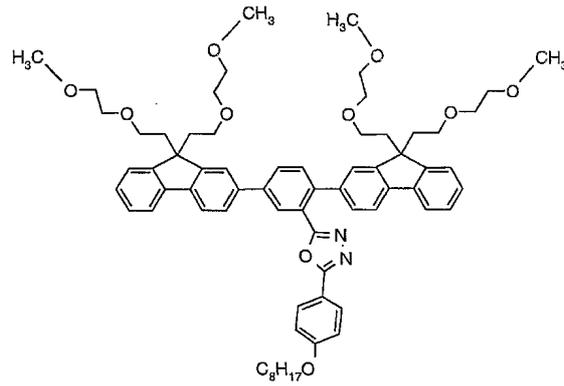
B부: 4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-페닐-9H-카르바졸의 합성

문헌[Ishiyama, Murata 및 Miyaura, *J. Org. Chem.* 1995, **60**, 7508-7510]에 기재된 바와 같이 아릴보론산 에스테르를 제조하는 일반적인 절차에 따라, 4-브로모페닐-9H-카르바졸 (1.089 g, 3.3 mmol), 비스(피나콜라토)디보론 (0.922 g, 3.6 mmol), 아세트산칼륨 (1.062 g, 11.0 mmol), 및 [1,1'-비스(디페닐포스피노)-페로센]디클로로팔라듐(II) (디클로로메탄으로 1:1 착물화됨-알드리치, 0.089 g, 0.1 mmol)을 20 mL의 DMSO중에서 혼합하였다. 용액을 질소로 퍼징시키고, 질소하에 80°C에서 18시간 동안 가열하였다. 냉각 후에, 반응 혼합물을 얼음 물에 붓고, 수층을 메틸렌 클로리드로 3회 추출한 후, 합친 유기 분획물을 염수로 세척하고, 황산마그네슘상에서 건조시킨 다음, 얇은 실리카층을 통해 여과하고 회전 증발시켜 1.02 g의 4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-페닐-9H-카르바졸 (84% 수율)을 수득하였다.

C부: 2-[3,5-비스-(페닐-4-일-9H-카르바졸)-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸의 합성

플라스크에 10 mL의 톨루엔, 4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-N-페닐카르바졸 (2.0 g, 5.4 mmol), 실시예 7의 2-(3,5-디브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸 (1.31 g, 2.6 mmol), 알리콤파트™ 336 (0.521 g, 1.3 mmol) 및 5 mL의 수성 2M Na₂CO₃을 도입시켰다. 이를 1시간 동안 N₂로 퍼징시켰다. 플라스크를 약 80°C로 가열한 후, 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐(0) (94 mg, 0.081 mmol)을 질소 퍼징하에 첨가하였다. 플라스크의 내용물을 21시간 동안 환류시켰다. 반응 플라스크를 실온으로 냉각시키고, 약 20 mL의 물을 첨가한 후, 유기층을 분리하였다. 수층을 6 × 10 mL의 메틸렌 클로리드로 추출하였다. 유기층을 수거하고 포화 NaCl로 2회 연속적으로 세척한 후, MgSO₄ 상에서 건조시켰다. 농축시켜 고체를 수득하였고, 이를 50:50의 메틸렌 클로리드:헥산으로부터 재결정화시켜 1.3g의 2-[3,5-비스-(페닐-4-일-9H-카르바졸)-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸을 수득하였다.

실시예 15: 2-[2,5-비스-{9,9-비스-(3,6-디옥사헵틸)-9H-플루오렌-2-일}-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸의 합성



A부: 2-브로모-9,9-비스(3,6-디옥사헥틸)-플루오렌의 합성

2-브로모-9,9-비스(3,6-디옥사헥틸)-플루오렌을 실시예 5의 A부에 기재된 방법에 의해 브로모-2-(2-메톡시에톡시)에탄 및 2-브로모플루오렌으로부터 합성하였다.

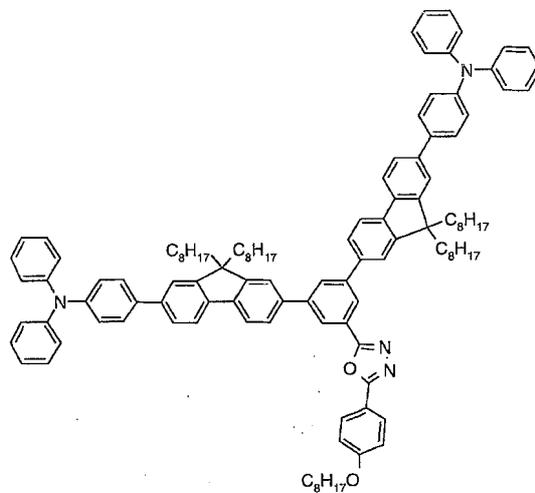
B부: 2-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-비스(3,6-디옥사헥틸)-플루오렌의 합성

2-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9,9-비스(3,6-디옥사헥틸)-플루오렌을 실시예 12의 A부에 기재된 방법에 의해 2-브로모-9,9-비스(3,6-디옥사헥틸)-플루오렌으로부터 합성하였다.

C부: 2-[2,5-비스-{9,9-비스(3,6-디옥사헥틸)-9H-플루오렌-2-일}-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸의 합성

실시예 12의 B부의 일반적인 절차에 따라, 2-브로모-9,9-비스(3,6-디옥사헥틸)-플루오렌을 실시예 3의 2-(2,5-디브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸과 반응시켜 2-[2,5-비스-{9,9-비스(3,6-디옥사헥틸)-9H-플루오렌-2-일}-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸을 제조하였다. 생성된 생성물은 광발광을 일으키고 PEDT(폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)); 독일 레버쿠젠 소재 바이엘 아게로부터의 CH-8000)와 같은 이온 전도성 중합체 필름으로 열 전달될 수 있는 필름을 형성하는 것으로 밝혀졌다.

실시예 16: 2-[3,5-비스-{9,9-디옥틸-7-(페닐-4-아미노-N,N-디페닐)-9H-플루오렌-2-일}-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸의 합성



A부: 2,7-디브로모-9,9-디옥틸-플루오렌의 합성

2,7-디브로모-9,9-디옥틸-플루오렌을 문헌[Ranger 등, *Can. J. Chem.*, 1571-1577(1998)]에 기재된 바와 같이 제조하였다.

B부: 2-[9,9-디옥틸-7-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9H-플루오렌-2-일]-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란의 합성

2-[9,9-디옥틸-7-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9H-플루오렌-2-일]-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란을 문헌[Ranger 등, *Chem. Commun.* 1597-1598 (1997)]에 기재된 바와 같이 2,7-디브로모-9,9-디옥틸-플루오렌으로부터 제조하였다.

C부: 4-브로모-N,N-디페닐아닐린의 합성

4-브로모-N,N-디페닐아닐린을 문헌[Creason 등, *J. Org. Chem.* **37**, 4440-4446 (1972)]에 기재된 바와 같이 제조하였다.

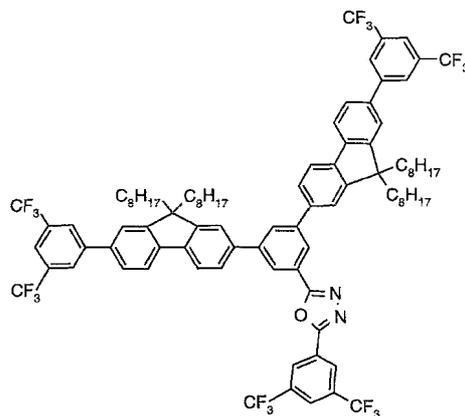
D부: 4-[9,9-디옥틸-7-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9H-플루오렌-2-일]-N,N-디페닐아닐린의 합성

4-브로모-N,N-디페닐아닐린 (19.44 g, 60 mmol), 2-[9,9-디옥틸-7-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9H-플루오렌-2-일]-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 (76.9 g, 120 mmol), 알리콴트™ 336 (트리카프릴릴메틸암모늄 클로리드) (6 g, 15 mmol) 및 2M 탄산나트륨 용액 (75 mL, 150 mmol)을 600 mL의 톨루엔에 첨가하였다. 이를 질소 스트림으로 약 30분간 퍼징시켰다. 질소 퍼지하에, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (348 mg, 0.30 mmol)을 첨가하였다. 그다음 반응 혼합물을 16시간 동안 환류시켰다. 반응을 실온으로 냉각시키고, 물을 첨가하였다. 유기층을 분리하고, 물로 세척한 후, 염수로 세척하였다. 유기층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 용매를 증발시켜 밝은 황색 고체를 수득하였다. 이를 아세톤에 현탁시키고, 혼합물을 환류시킨 후, 실온에서 하룻밤 동안 정지시켰다. 고체를 여과하고 여액을 농축시켜 고체를 수득한 후, 이를 칼럼 크로마토그래피 (톨루엔:헥산 3:7)하여 4-[9,9-디옥틸-7-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9H-플루오렌-2-일]-N,N-디페닐아닐린을 수득하였다.

E부: 2-[3,5-비스-{9,9-디옥틸-7-(페닐-4-아미노-N,N-디페닐)-9H-플루오렌-2-일}-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸의 합성

4-[9,9-디옥틸-7-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9H-플루오렌-2-일]-N,N-디페닐아닐린을 실시예 7의 2-(3,5-디브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸 (2.2 mmol)과 실시예 12의 B부에 약술된 바와 같은 조건하에서 반응시켜 2-[3,5-비스-{9,9-디옥틸-7-(페닐-4-아미노-N,N-디페닐)-9H-플루오렌-2-일}-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸을 제조하였다. 생성된 생성물은 광발광을 일으키고, OLED 조성물에서 정공 및 전자 둘다의 수송을 지지하는 필름을 형성하는 것으로 밝혀졌다.

실시예 17: 2-[3,5-비스-{9,9-디옥틸-7-(3,5-비스-트리플루오로메틸-페닐)-9H-플루오렌-2-일}-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸의 합성



A부: 2-(7-[3,5-비스(트리플루오로메틸)페닐]-9,9-디옥틸-9H-플루오렌-2-일)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 및 2,7-비스[3,5-비스(트리플루오로메틸)페닐]-9,9-디옥틸-9H-플루오렌의 합성

3,5-비스(트리플루오로메틸)브로모벤젠 (0.293 g, 1 mmol), 2-[9,9-디옥틸-7-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9H-플루오렌-2-일]-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 (1.28 g, 2 mmol), 알리콴트™ 336 (트리카프틸메틸암모늄 클로리드) (0.15 g, 0.375 mmol) 및 2M 탄산나트륨 용액 (1.25 mL, 2.5 mmol)을 10 mL의 톨루엔에 첨가하였다. 이를 질소 스트림으로 30분간 퍼징시켰다. 질소 퍼지하에, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (14 mg, 0.012 mmol)을 첨가하였다. 그다음 반응 혼합물을 16시간 동안 환류시켰다. 반응을 실온으로 냉각시키고, 물을 첨가하였다. 유기층을 분리하고, 물로 세척한 후, 염수로 세척하였다. 유기층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 용매를 증발시켜 밝은 황색 고체를 수득하였다. 이 고체를 에테르에 용해시키고, 소량을 실리카 박층 크로마토그래피(TLC) 평판에 적용하였다. TLC 평판을 1:1의 톨루엔:헥산으로 용출시켜 3개의 구별되는 밴드(band)들을 수득하였다. 중간 밴드를 수거하고 이 물질이 밝은 황색 오일(28 mg)로서 2-(7-[3,5-비스(트리플루오로메틸)페닐]-9,9-디옥틸-9H-플루오렌-2-일)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란인 것으로 판단하였다.

¹H NMR: δ 0.53-0.69 (m, 4H), 0.78 (t, 6H), 0.96-1.29 (m, 20H), 1.40 (s, 12H), 1.97-2.11 (m, 4H), 7.52, (s, 1H), 7.56 (d, 1H), 7.72-7.80 (m, 2H), 7.80-7.88 (m, 3H), 8.05 (s, 2H).

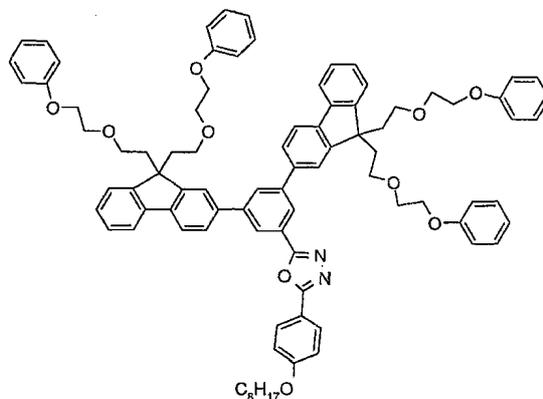
가장 긴 용출 거리를 갖는 밴드를 수거하고 이 물질이 밝은 황색 오일(8 mg)로서 부산물인 2,7-비스[3,5-비스(트리플루오로메틸)페닐]-9,9-디옥틸-9H-플루오렌인 것으로 판단하였다.

¹H NMR: δ 0.51-0.65 (m, 4H), 0.70 (t, 6H), 0.91-1.26 (m, 20H), 1.98-2.11 (m, 4H), 7.49, (s, 2H), 7.56 (d, 2H), 7.80 (d, 4H), 8.00 (s, 4H).

B부: 2-[3,5-비스-{9,9-디옥틸-7-(3,5-비스-트리플루오로메틸-페닐)-9H-플루오렌-2-일}-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸의 합성

2-(7-[3,5-비스(트리플루오로메틸)페닐]-9,9-디옥틸-9H-플루오렌-2-일)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란을 2-(3,5-디브로모페닐)-5-[3,5-비스(트리플루오로메틸)페닐]-1,3,4-옥사디아졸과 실시예 12의 B부에 약술된 조건 하에 반응시켜 2-[3,5-비스-{9,9-디옥틸-7-(3,5-비스-트리플루오로메틸-페닐)-9H-플루오렌-2-일}-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸을 제조하였다.

실시예 18: 2-[3,5-비스-{9,9-비스-(3,6-디옥사헥실페닐)-9H-플루오렌-2-일}-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸의 합성



A부: PhO(CH₂)₂O(CH₂)₂I의 합성

PhO(CH₂)₂O(CH₂)₂I를 문헌[Otera 등, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 2964-2967 (1981)]에 기재된 바와 같이 제조하였다.

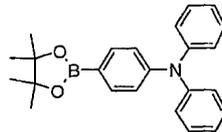
B부: 2-브로모-9,9-비스(3,6-디옥사헥실페닐)-플루오렌의 합성

2-브로모-9,9-비스(3,6-디옥사헥실페닐)-플루오렌을 실시예 5의 A부에 약술된 일반적인 절차에 따라 PhO(CH₂)₂O(CH₂)₂I 및 2-브로모플루오렌으로부터 합성하였다.

C부: 2-[3,5-비스-{9,9-비스-(3,6-디옥사헥실페닐)-9H-플루오렌-2-일}-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸의 합성

실시에 12의 B부에 일반적인 절차에 따라, 2-브로모-9,9-비스(3,6-디옥사헥실페닐)-플루오렌을 실시예 3의 2-(3,5-디브로모페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸과 반응시켜 2-[3,5-비스-{9,9-비스-(3,6-디옥사헥실페닐)-9H-플루오렌-2-일}-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸을 제조하였다. 생성된 생성물은 광발광을 일으키고 PEDT(폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)); 독일 레버쿠젠 소재 바이엘 아게로부터의 CH-8000)와 같은 이온 전도성 중합체 필름으로 열 전달될 수 있는 필름을 형성하는 것으로 밝혀졌다.

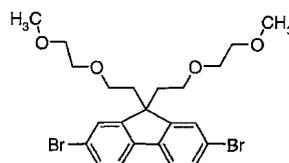
실시에 19: N,N-디페닐-4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)아닐린의 합성 및 유용성



문헌[Ranger 등, *Chem. Commun.* 1597-1598 (1997)]에 보고된 바와 같은 아릴보론산 에스테르 합성의 일반적인 절차에 따라, n-부틸리튬을 주사기를 통해 175 ml의 무수 THF중의 4-브로모-N,N-디페닐아닐린 (24 g, 0.074 mol)의 -78°C(아세톤-드라이아이스 냉각조)에 적가하였다. -78°C에서 1시간 동안 계속 교반한 후, -50°C에서 1시간 동안 교반하였다. 혼합물을 -78°C로 냉각시키고 2-이소프로폭시-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 (17.22 g, 0.0925 mol)을 한번에 주사기를 통해 첨가하였다. 온도를 3시간 동안 -78°C로 유지하였다. 냉각조를 제거하고, 반응을 12시간 동안 정치하면서 실온으로 가온되도록 놓아두었다. 반응 혼합물을 포화 아세트산암모늄에 붓고 에테르로 추출하였다. 에테르층을 황산마그네슘상에서 건조시키고 농축시켜 점성의 오일을 수득하였다. 칼럼 크로마토그래피(100% 헥산에서 40% 헥산으로 증가하는 구배의 헥산:톨루엔 혼합물로 용출시키는 실리카겔)하여 N,N-디페닐-4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)아닐린을 오일(19.9 g, 72.8% 수율)로서 수득하였고, 이를 정치시켜 천천히 고체로 결정화시켰다.

이 화합물은 아릴렌 옥사디아졸 디브로미드 코어에 직접 교차 커플링시킴으로써 정공 수송 기능을 말단 캡핑기에 도입시키기 위해 사용할 수 있다. 또다르게는, 이 화합물은, 예를 들어 실시예 16에 교시된 화합물 2-[3,5-비스-{9,9-디옥틸-7-(페닐-4-아미노-N,N-디페닐)-9H-플루오렌-2-일}-페닐]-5-(4-옥틸옥시-페닐)-[1,3,4]옥사디아졸로의 또다른 합성 경로에서 사용할 수 있다. 이는 N,N-디페닐-4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)아닐린을 과량의 2,7-디브로모-9,9-디옥틸플루오렌과 반응시켜 4-[9,9-디옥틸-7-브로모-9H-플루오렌-2-일]-N,N-디페닐아닐린을 생성함으로써 수득될 수 있는데, 이를 실시예 10의 2-(3,5-비스(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)-5-[4-(옥틸옥시)페닐]-1,3,4-옥사디아졸과 스즈키 커플링 조건하에서 반응시키면 실시예 16의 최종 화합물이 수득될 것이다.

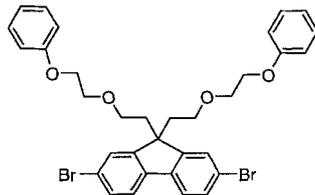
실시에 20: 2,7-디브로모-9,9-비스(3,6-디옥사헥틸)-플루오렌의 합성 및 유용성



벤질트리에틸암모늄 클로리드 (3.19g, 14 mmol, 0.077당량) 및 2,7-디브로모플루오렌 (59g, 182 mmol, 1당량)을 178 mL의 DMSO에 현탁시켰다. 50% 수성 NaOH 80 mL를 첨가하였다. 1-브로모-2-(2-메톡시에톡시)에탄 (80g, 437 mmol, 2.4당량)을 이어서 소량씩 첨가하였다. 반응을 2시간 동안 실온에서 교반한 후, 정지시키고, 수층을 에테르로 추출하였다. 합친 에테르층을 물로 5회 세척하고, Na₂SO₄상에서 건조시켰다. 유기층을 여과하고, 증발시켜 건조시킨 후, 잔류물을 실리카겔 칼럼상에서 플래쉬 크로마토그래피하여 86%의 수율로 순수한 화합물 (73 g)을 수득하였다.

이 화합물은, 예를 들어 실시예 16의 화합물의 용해도 파라미터를 변형시키기 위해 사용할 수 있다. 이를 위해, 2,7-디브로모-9,9-비스(3,6-디옥사헵틸)-플루오렌을 실시예 16에서 2,7-디브로모-9,9-디옥틸 플루오렌 대신 사용한다.

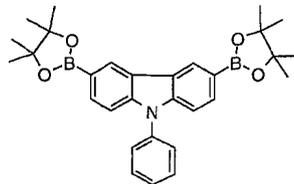
실시예 21: 2,7-디브로모-9,9-비스(3,6-디옥사헥실-6-페닐)-플루오렌의 합성 및 유용성



PhO(CH₂)₂O(CH₂)₂I를 먼저 문헌[J. Otera, T. Shiomi, K. Murakami 및 Y. Kawasaki, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 1981, 2964-2967]에 기재된 방법에 따라 합성하였다. 2,7-디브로모-9,9-비스(3,6-디옥사헥실-6-페닐)-플루오렌을 그다음 PhO(CH₂)₂O(CH₂)₂I 및 2,9-디브로모플루오렌으로부터 실시예 5의 A부에 약술된 일반적인 절차에 따라 합성하였다.

이 화합물은, 예를 들어 실시예 16의 화합물의 용해도 파라미터를 변형시키기 위해 사용할 수 있다. 이를 위해, 2,7-디브로모-9,9-비스(3,6-디옥사헥실페닐)-플루오렌을 실시예 16에서 2,7-디브로모-9,9-디옥틸 플루오렌 대신 사용한다.

실시예 22: 9-페닐-3,6-비스(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9H-카르바졸의 합성 및 유용성



A부: 3,6-디브로모-9-페닐카르바졸의 합성

3,6-디브로모-9-페닐카르바졸을 문헌[Park 등, *Tetrahedron*, **42**, 12707-12714 (1998)]에 기재된 바와 같이 제조하였다.

B부: 9-페닐-3,6-비스(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9H-카르바졸의 합성

2L 플라스크에 600 mL의 무수 THF 및 3,6-디브로모-9-페닐카르바졸 (60 g, 0.15 mol)을 충전시켰다. 이를 아세톤-드라이아이스조로 -78°C로 냉각시켰다. n-부틸리튬 (헥산중의 2.5M 용액 138 mL, 0.34 mol)을 주사기를 통해 적가하였다. 반응을 20분간 교반한 후, -50°C로 가온시켰다. 온도를 -78°C로 낮추고 2-이소프로폭시-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 (64 g, 0.34 mol)을 온도가 -60°C 미만으로 유지되는 속도로 주사기를 통해 첨가하였다. 온도를 2시간 동안 -78°C에서 유지한 후, 아세트산암모늄 수용액 (2100 mL의 물중의 90 g)에 부었다. 층들을 상분리하고, 수성상을 메틸-t-부틸 에테르 (2 × 200 mL)로 추출하였다. 합친 유기상 및 추출물을 염수 (2 × 200 mL)로 세척하고 황산마그네슘상에서 건조시켰다. 농축 및 아세톤으로부터 수득된 고체의 재결정화에 의해 순수한 9-페닐-3,6-비스(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9H-카르바졸을 수득하였다.

이 화합물을, 예를 들어 실시예 17의 화합물의 정공 수송성을 변형시키기 위해 사용할 수 있다. 이를 위해, 9-페닐-3,6-비스(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9H-카르바졸을 실시예 17에서 2-[9,9-디옥틸-7-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9H-플루오렌-2-일]-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 대신 사용한다.

실시예 23: 4,7-디브로모-2,1,3-벤조티아디아졸, 3,9-디브로모-페릴렌 및 3,10-디브로모-페릴렌의 합성 및 유용성

4,7-디브로모-2,1,3-벤조티아디아졸을 문헌[Pilgram 등, *J. Heterocycl. Chem.*, **7**, 629-633 (1970)]에 기재된 바와 같이 제조하였다.

3,9-디브로모-페릴렌 및 3,10-디브로모-페릴렌을 문헌[Zinke 등, *Chem. Ber.* **74**, 107-112 (1941)]에 기재된 바와 같이 제조하였다. 이들 화합물을, 예를 들어 실시예 16 또는 17의 화합물의 발광성을 변형시키기 위해 사용할 수 있다. 이는 실시예 16 또는 실시예 17에 기재된 제조 방법에서 2,7-디브로모-9,9-디옥틸 플루오렌 대신 이들 화합물중 하나로 치환함으로써 달성될 수 있다.

실시예 24 내지 31: 전기활성 조성물 및 유기 전계발광 장치

전기활성 조성물을 다음과 같이 제조하였다: 실시예 11 내지 14의 전자 수송 화합물(ETA's)을 독립적으로 1 내지 3 중량/중량%로 디클로로에탄 또는 톨루엔 (미국 위스콘신주 밀워키 소재의 알드리치 케미칼로부터 구입한 HPLC 등급)에 용해시켰다. TPD, CBP 및 PVK로부터 선택된 정공 수송제(HTA)를 ETA/HTA=10:3; 일부 경우에는 10:10 또는 10:1의 비율로 첨가하였다. 분자 방출제 Ir(ppy)₃을 디클로로에탄(DCE)중의 상기 방출제 10mM 용액의 소적을 첨가함으로써 0.01 내지 0.5 중량/중량%의 양으로 도입시켰다. 각 코팅 용액을 적용하기 전에 0.2 μm의 나일론 주사기를 통해 여과하였다.

유기 전계발광 장치를 다음과 같이 구성하였다: 한면에 인듐 주석 산화물(ITO)의 코팅물이 증착되어 있는 2 cm × 2 cm의 유리 스퀘어(square)들을 틴 필름 디바이스(Thin Film Devices) (미국 캘리포니아주 아나하임 소재)로부터 구입하였다. ITO 코팅된 측면을 메탄올로 세정하고, O₂ 플라즈마 에칭(plasma etch) (50 W 및 200 mTorr에서 4분)으로 처리한 후, PEDT/PSS 공중합체의 수용액으로 스핀 코팅 (2500 rpm에서 30초간)에 의해 처리하고, 질소 퍼지하에 115°C에서 건조시켰다. 다음으로, 전술한 바와 같이 제조한 코팅 용액을 PEDT/PSS 코팅된 기관의 상부에서 각각 스핀 코팅시켰다 (2000 rpm에서 30초간). 그다음 유리 스퀘어들을 알루미늄 프레임에 탑재시키고, 진공 챔버 챔버내로 도입시킨 후, 약 1 시간 동안 10⁻⁶ torr로 펌핑(pumping)시켰다. 캐소드를 약 10Å의 LiF 및 약 2000Å의 알루미늄을 증착시킴으로써 적용하였다.

생성된 유기 전계발광 램프를 20 mA/cm²의 구동 전류에서 작동하는 청색, 녹색 및 적색 램프에 대해 구동 전압 (V), 외부 양자 효율 백분율 (% Q.E.), 발광 강도 (cd/m²), 및 최대 방출 (λ_{max} nm)을 평가하였다.

하기 표 1에 전기활성 조성물 및 각 램프의 평가 결과들을 요약하였다. 전기활성 조성물중의 물질은 하기 표 1에서 램프를 제조하는데 사용되는 스핀 코팅 용액을 제조하기 위해 1000부(1000p)의 DCE에 첨가된 중량부(p)의 수로 기록하였다.

[표 1]

전기활성 조성물 및 램프 평가 결과

실시에	p ETA/ 1000 p DCE (ETA)	p HTA/ 1000 p DCE (HTA)	p 방출제/ 1000 p DCE (방출제)	전계발광
				λnm
24	10 (Ex. 11)	3 (TPD)	0.085 (Ir(ppy) ₃)	513
비교예 25	10 (C8O)	3 (CBP)	0.085 (Ir(ppy) ₃)	508
26	10 (C8O)	3 (Ex. 14)	0.085 (Ir(ppy) ₃)	510
27	10 (Ex. 12)	3 (CBP)	0.085 (Ir(ppy) ₃)	508
28	10 (Ex. 12)	3 (Ex. 14)	0.085 (Ir(ppy) ₃)	508
29	10 (Ex. 12)	3 (PVK)	0.085 (Ir(ppy) ₃)	508
30	10 (Ex. 11)	3 (PVK)	0.085 (Ir(ppy) ₃)	505
31	10 (Ex. 12)	3 (PVK)	0.085 (Ir(ppy) ₃)	508

(Ex. 11)은 실시예 11의 화합물을 의미한다.

(Ex. 12)는 실시예 12의 화합물을 의미한다.

(Ex. 14)은 실시예 14의 화합물을 의미한다.

실시예 32: 공여자 시트의 제조

열전달 공여자 시트를 하기 방식으로 제조하였다. 하기 표 2에 기재된 LTHC 용액을 0.1 mm 두께의 폴리에틸렌 테레프탈레이트 (PET) 필름 기관 (일본 오사카 소재 테이진 (Teijin)으로부터 구입한 M7)상에 코팅시켰다. 코팅은 1인치당 150개의 나선 셀 (cell)을 갖는 마이크로그라비어 롤 (microgravure roll)을 사용하는 야스이 세이키 랩 코터 (Yasui Seiki Lab Coater), 모델 CAG-150을 사용하여 수행하였다. LTHC 코팅물을 인라인 (in-line)으로 80°C에서 건조시키고 자외선 (UV)을 조사하여 경화시켰다.

[표 2]

LTHC 용액		
성분	상표명	중량부
카본블랙 안료	레이븐 760 울트라(Raven 760 Ultra) ⁽¹⁾	3.88
폴리비닐 부티랄 수지	부트바르(Butvar) B-98 ⁽²⁾	0.69
아크릴계 수지	존크릴(Joncryl) 67 ⁽³⁾	2.07
분산제	디스퍼비크(Disperbyk) 161 ⁽⁴⁾	0.34
플루오로 계면활성제	FC-430 ⁽⁵⁾	0.01
에폭시 노블락 아크릴레이트	에베크릴(Ebecryl) 629 ⁽⁶⁾	13.18
아크릴계 수지	엘바사이트(Elvacite) 2669 ⁽⁷⁾	8.79
2-벤질-2-(디메틸아미노)-1-(4-(모르폴리닐)페닐)부탄논	어가큐어(Irgacure) 369 ⁽⁸⁾	0.89
1-히드록시시클로헥실 페닐 케톤	어가큐어 184 ⁽⁸⁾	0.13
2-부탄논		43.75
1,2-프로판디올 모노메틸 에테르 아세테이트		26.25

(1) 미국 조지아주 아틀란타 소재 콜럼비안 케미칼즈 캄파니(Columbian Chemicals Co.)
 (2) 미국 미주리주 세인트 루이스 소재 솔루티아 인코포레이티드(Solutia Inc.)
 (3) 미국 위스콘신주 라신 소재 S. C. 존슨 & 선, 인코포레이티드(Johnson & Son, Inc.)
 (4) 미국 코네티컷주 월링포드 소재 비크-케미 USA(byk-Chemie USA)
 (5) 미국 미네소타주 세인트 폴 소재 쓰리엠 캄파니(3M Co.)
 (6) 미국 사우스 캐롤라이나주 N. 오거스타 소재 UCB 라드큐어 인코포레이티드(Radcure Inc.)
 (7) 미국 테네시주 멤피스 소재 ICI 아크릴릭스 인코포레이티드(Acrylics Inc.)
 (8) 미국 뉴욕주 테리타운 소재 시바-가이키 코포레이션(Ciba-Geigi Corp.)

다음으로, 하기 표 3에 제공된 중간층 용액을 1인치당 180개의 나선 셀을 갖는 마이크로그래피어 롤을 사용하는 야스이 셰이키 랩 코터, 모델 CAG-150을 사용하여 회전그래피어 코팅 방법으로 경화된 LTHC 층상에 코팅하였다. 이 코팅물을 인라인으로 60°C에서 건조시키고 자외선(UV)을 조사하여 경화시켰다.

[표 3]

중간층 코팅 용액

성분	중량부
SR 351 HP (트리메틸올프로판 트리아크릴레이트 에스테르, 미국 펜실베이니아주 엑스톤 소재 사르토머 (Sartomer) 로부터 구입함)	14.85
부트바르 B-98	0.93
존크릴 67	2.78
어가큐어 369	1.25
어가큐어 184	0.19
2-부탄논	48.00
1-메톡시-2-프로판올	32.00

다음으로, 전달층을 공여자 시트의 중간층상에 형성시켰다. 실시예 26 또는 27의 분자적으로 도핑된 중합체 조성물을 약 30초간 약 2000 내지 2500 rpm에서 스피닝(spinning)시킴으로써(헤드웨이 리서치 스피너코터(Headway Research spincoater)) 전달층을 공여자 시트상에 배치시켜 대략 50 nm의 필름 두께를 수득하였다.

실시예 33: 전달층의 레이저 유도된 열 화상화

A부: 수용자 기관의 제조

PEDT (탈이온수로 1:1로 희석된 폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜) 용액 (독일 레버쿠젠 소재 바이엘 아게로부터 구입한 바이트론 P 4083))를 왓만 푸라디스크(WHATMAN PURADISC) 0.2 μm 나일론 주사기 필터를 통해 여과하였다.

패턴화되지 않은 ITO (인듐 주석 산화물) 유리 (미국 미네소타주 스틸워터 소재 델타 테크놀로지스(Delta Technologies), 100 Ω/스퀘어 미만, 1.1 mm 두께)를 데코넥스(Deconex) 12NS 세제 (스위스 추흐빌 소재 보러 케미 아게(Borer Chemie AG))의 3% 고온 용액에서 초음파 세정하였다. 그다음 기판을 하기 조건하에서 표면 처리를 위해 플라즈마 사이언스 (Plasma Science) 플라즈마 처리기에 놓았다: 시간: 2분; 전력: 500watt (165 W/cm²); 및 산소 유동: 100 Torr.

플라즈마 처리 직후, PEDT 용액을 ITO 기판상에서 와트만 푸라디스크 0.2 μm 나일론 주사기 필터를 통해 여과하고 분배 시켰다. 기판을 이어서 30초간 2000rpm에서 스피닝(헤드웨이 리서치 스피너)하여 40 nm의 PEDT 필름 두께를 수득하였다. 모든 기판을 질소하에 5분간 200℃로 가열하였다.

B부: 공여자 시트로부터 전달층의 레이저 유도된 열 화상화

실시에 33의 공여자 시트를 수용자 기판과 접촉시켰다. 그다음, 공여자 시트를 2개의 단일 모드 Nd:YAG 레이저들을 사용하여 화상화시켰다. 원중심에 가까운 배열(near telecentric configuration)의 일부로서 f-세타 스캔 렌즈를 사용하여 레이저 광선들을 합쳐 화상판상에 초점을 맞추면서 선형 검류계 시스템을 사용하여 스캐닝(scanning)을 수행하였다. 레이저 에너지 밀도는 0.4 내지 0.8 J/cm²이었다. I/e² 강도로 측정되는 레이저 스폿(spot)의 크기는 30 마이크로미터 × 350 마이크로미터이었다. 선형 레이저 스폿 속도는 화상판에서 측정시 1초당 10 내지 30 미터로 조정할 수 있다. 레이저 스폿을 주요 배치 방향에 수직으로 약 100 마이크로미터 고도로 디더링(dithering)시켰다. 전달층을 수용자 기판상에 선으로 전달하였고, 선들의 의도된 폭은 약 100 마이크로미터였다. 레이저 유도된 열 화상화를 11.4 내지 20.0 m/s의 스캔 속도 및 하기 조건에서 수행하였다: 조사량 0.4-0.7 J/cm²; 스캔 속도 20-11.4 m/s; 선 폭 90 μm; 및 피치(pitch) 225 μm.

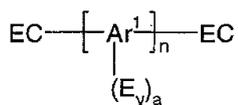
생성된 레이저 유도된 열 화상화 패턴의 디지털(digital) 화상은 화상화된 영역에서 수용자 표면에 전기활성 조성물이 전달 되었음을 보여주며, 화상화되지 않은 수용자 표면은 전기활성 조성물이 없는 영역임을 보여주었다.

(57) 청구의 범위

청구항 1.

방향족 코어(core) 및 이 방향족 코어에 공액된 2개의 말단 캡핑기들(end capping group)을 포함하는 하기 화학식 I의 화합물.

<화학식 I>



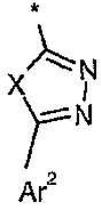
상기 식에서,

각각의 Ar¹은 독립적으로 비치환 또는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, 페닐렌 기 아릴렌 또는 나프탈렌 기 아릴렌이고;

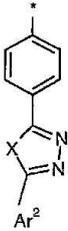
각각의 a는 독립적으로 1 또는 2이고;

각각의 E_y는 독립적으로 하기 화학식 II 또는 화학식 III의 구조이고:

<화학식 II>



<화학식 III>



[상기 식들에서,

각각의 X는 독립적으로 O, S 또는 NR¹이고, 이때 R¹은 알킬, 아릴, 헤테로아릴, 헤테로알킬 또는 이들의 조합이며;

각각의 Ar²는 독립적으로 비치환 또는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴, 알킬 옥사디아졸릴, 아릴 옥사디아졸릴, 알킬 트리아졸릴, 아릴 트리아졸릴, 디아릴아미노, 아릴디아릴아미노 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된 카르보시클릭 아릴 기이고;

각각의 별표(-*)는 화합물중의 또다른 기에 대한 결합 위치를 나타낸다];

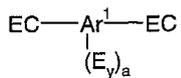
n은 1 또는 2의 정수이고;

각각의 말단 캡핑기(EC)는 독립적으로 비치환 또는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, 카르보시클릭 아릴, 헤테로아릴 또는 3급 아미노 아릴 기이고, 이때 상기 말단 캡핑기는 아릴렌 방향족 코어에 공액되며, 단지 1개의 EC만이 화학식 II 또는 화학식 III의 기이다.

청구항 2.

제1항에 있어서, 하기 화학식 IV인 화합물.

<화학식 IV>

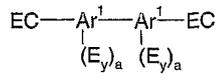


상기 식에서, EC, Ar¹, E_y 및 a는 각각 제1항에서 정의된 바와 같다.

청구항 3.

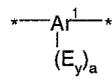
제1항에 있어서, 하기 화학식 V인 화합물.

<화학식 V>

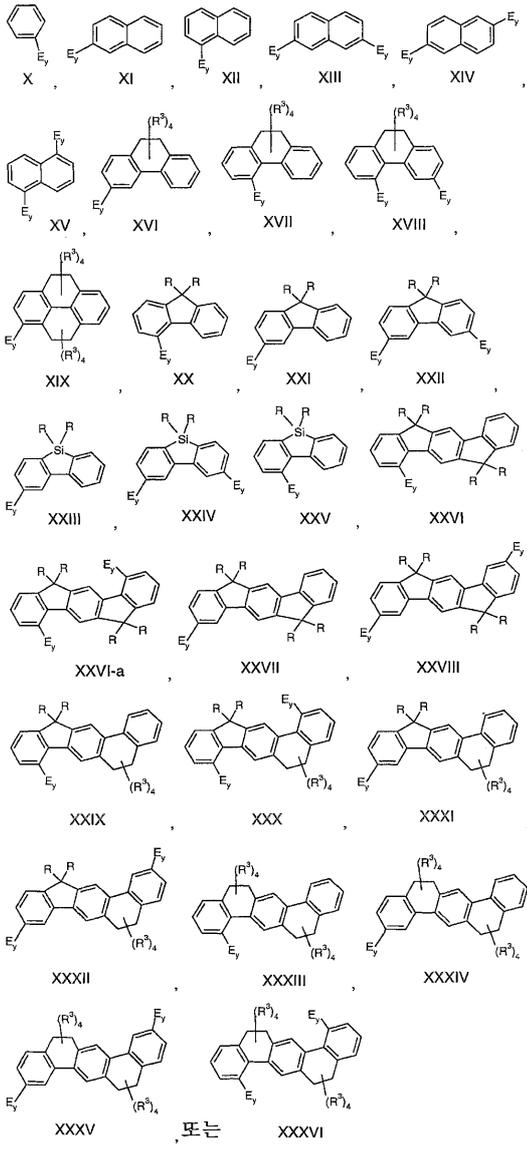


상기 식에서, EC, Ar¹, E_y 및 a는 각각 제1항에서 정의된 바와 같다.

청구항 4.



제1항에 있어서, 화학식 I중 각각의 잔기가 독립적으로 비치환 또는 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된 하기 화학식 X 내지 XXXVI의 2가 라디칼이고:



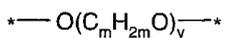
각각의 R이 독립적으로 C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₃₀ 아릴, C₆₋₃₀ 아릴옥시, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 또는 이들의 조합이고;

각각의 R³이 독립적으로 수소, C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₃₀ 아릴, C₆₋₃₀ 아릴옥시, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 및 이들의 조합으로부터 선택되는 것인 화합물.

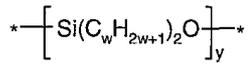
청구항 5.

제4항에 있어서, R 및 R³중 하나 이상이 하기 화학식 VI의 2가 폴리(옥시알킬렌) 부분 또는 하기 화학식 VII의 2가 폴리(디알킬실록산) 부분을 포함하는 연질 부분(soft segment)을 포함하는 것인 화합물.

<화학식 VI>



<화학식 VII>



상기 식들에서, m은 1 내지 6의 정수이고;

y는 2 내지 20의 정수이고;

w는 1 내지 10의 정수이다.

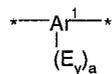
청구항 6.

제4항에 있어서, R 및 R³중 하나 이상이 플루오로, 플루오로알킬 또는 퍼플루오로알킬 기를 포함하는 것인 화합물.

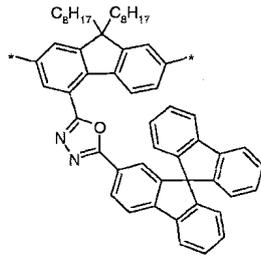
청구항 7.

제1항에 있어서, Ar²가 비치환 또는 하나 이상의 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴, C₃₋₃₀ 알킬 옥사디아졸릴, C₃₋₃₀ 아릴 옥사디아졸릴, C₃₋₂₀ 알킬 트리아졸릴, C₃₋₃₀ 아릴 트리아졸릴, C₃₋₃₀ 디아릴아미노, C₃₋₃₀ 디아릴아미노아릴 또는 이들의 조합으로 치환된, 페닐, 바이페닐, 터페닐, 안트릴, 나프틸, 아세나프틸, 페난트릴, 디히드로페난트레닐, 안트라세닐, 플루오레닐, 9-실라플루오레닐, 테트라히드로피레닐, 페릴레닐, 스피로비스플루오레닐, 플루오란테닐, 피레닐, 디히드로피레닐, 테트라히드로피레닐, 루브레닐, 크리세닐, 5,6,12,13-테트라히드로디벤조[a,h]안트라세닐, 6,12-디히드로인덴노[1,2-b]플루오레닐, 5,12-디히드로-6H-인덴노[1,2-b]페난트레닐, 디히드로페난트레닐 및 벤조[g,h,i]페릴레닐로부터 선택된 아릴 기인 화합물.

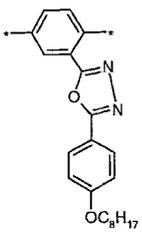
청구항 8.



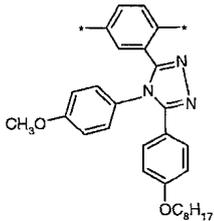
제1항에 있어서, 화학식 I중 하나 이상의 라디칼이



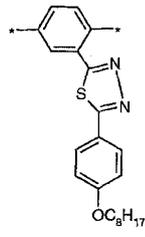
LXXI



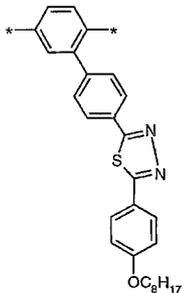
LXXII



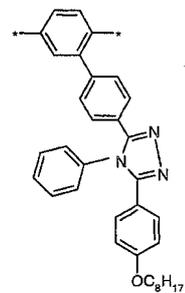
LXXIII



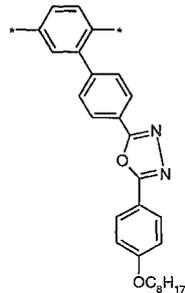
LXXIV



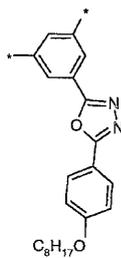
LXXV



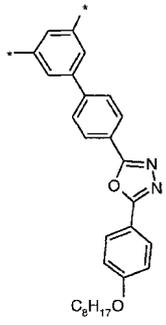
LXXVI



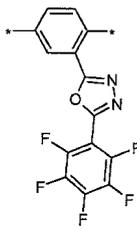
LXXVII



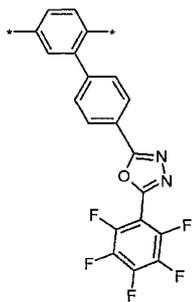
LXXVIII



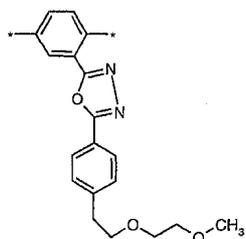
LXXIX



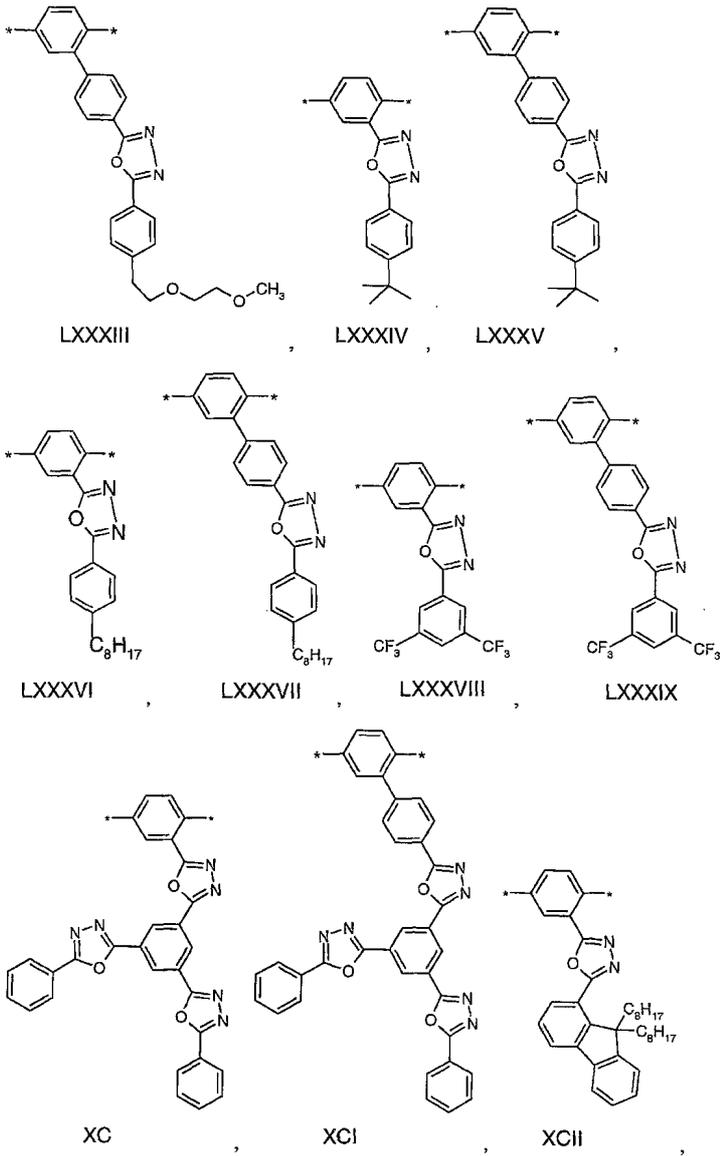
LXXX

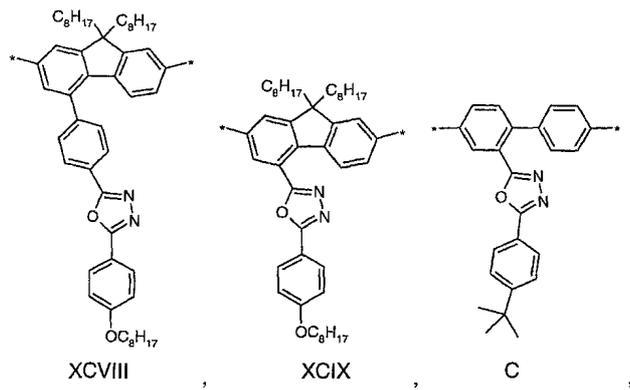
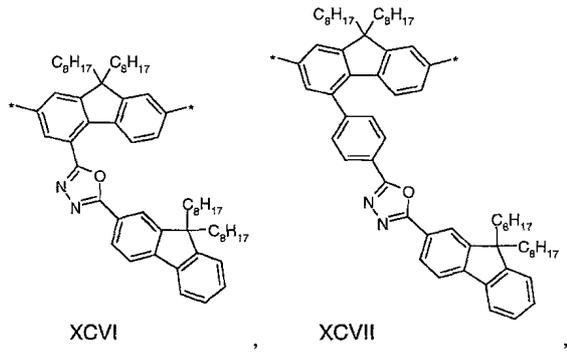
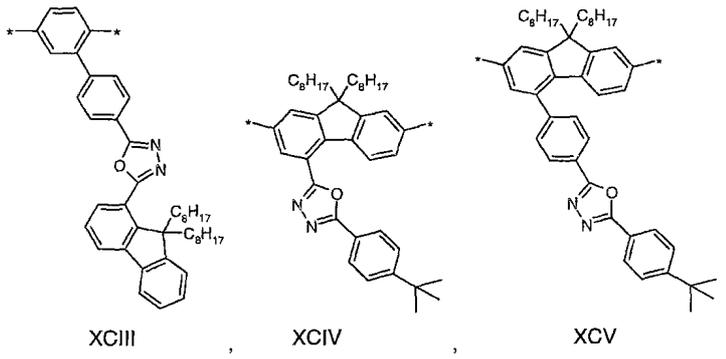


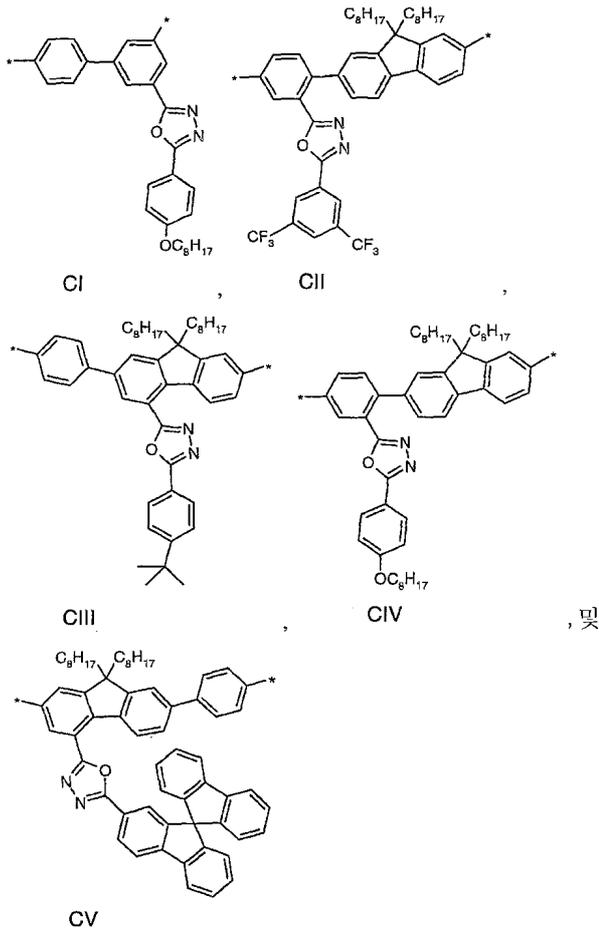
LXXXI



LXXXII







로부터 선택된 것인 화합물.

청구항 9.

제1항에 있어서, 말단 캡핑기들중 하나 이상이 비치환 또는 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, 페닐, 바이페닐, 터페닐, 안트릴, 나프틸, 아세나프틸, 페난트릴, 디히드로페난트레닐, 안트라세닐, 플루오레닐, 9-실라플루오레닐, 테트라히드로피레닐, 페릴레닐, 스피로비스플루오레닐, 플루오란테닐, 피레닐, 디히드로피레닐, 테트라히드로피레닐, 루브레닐, 크리세닐, 벤조[g,h,i]페릴레닐 또는 이들의 라디칼을 포함하는 C₆₋₄₀ 카르보시클릭 아릴을 포함하는 것인 화합물.

청구항 10.

제1항에 있어서, 말단 캡핑기들중 하나 이상이 비치환 또는 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, 푸라닐, 티오페닐, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 티아졸릴, 옥사졸릴, 이속사졸릴, 옥사디아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 피리디닐, 피리다지닐, 피라지닐, 피리미디닐, 퀴놀리닐, 이소퀴놀리닐, 벤조푸라닐, 벤조티오페닐, 인돌릴, 카르바졸릴, 벤족사졸릴, 벤조티아졸레일, 벤즈이미다졸릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 프탈라지닐, 벤조티아디아졸릴, 벤조트리아지닐, 펜아지닐, 페난트리디닐, 아크리디닐, 인다졸릴, 실올 또는 이들의 라디칼을 포함하는 C₃₋₄₀ 헤테로아릴 또는 헤테로아릴렌을 포함하는 것인 화합물.

청구항 11.

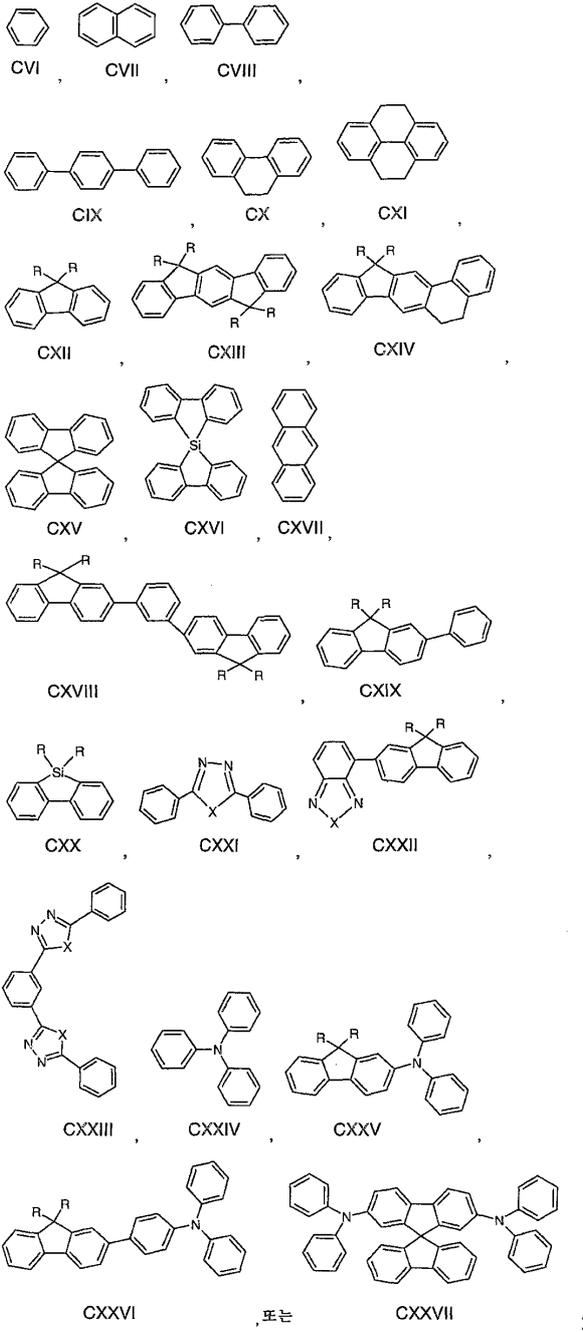
제1항에 있어서, 말단 캡핑기들중 하나 이상이 비치환 또는 C_{1-20} 알킬, C_{2-20} 알케닐, C_{1-20} 알콕시, C_{6-20} 아릴, C_{6-20} 아릴옥시, 플루오로, C_{1-20} 플루오로알킬, C_{1-20} 퍼플루오로알킬, C_{1-20} 헤테로알킬, C_{3-20} 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, 디아릴아닐린, 알킬카르바졸, 아릴카르바졸, 테트라아릴디아민, 스타르버스트(starburst) 아민, 퍼아릴트리아민, 덴드리틱(dendritic) 아민 또는 스피로아민의 라디칼을 포함하는 C_{12-60} 3급 아미노 방향족 아릴을 포함하는 것인 화합물.

청구항 12.

제1항에 있어서, 말단 캡핑기들중 하나 이상이 비치환 또는 C_{1-20} 알킬, C_{2-20} 알케닐, C_{1-20} 알콕시, C_{6-20} 아릴, C_{6-20} 아릴옥시, 플루오로, C_{1-20} 플루오로알킬, C_{1-20} 퍼플루오로알킬, C_{1-20} 헤테로알킬, C_{3-20} 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, N,N,N',N'-테트라아릴벤지딘, N,N,N',N'-테트라아릴-1,4-페닐렌디아민, N,N,N',N'-테트라아릴-2,7-디아미노플루오렌, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-비스(페닐)벤지딘, N,N'-비스(1-나프틸)-N,N'-비스(페닐)벤지딘, 1,4-비스(카르바졸릴)바이페닐, 4,4',4''-트리스(N,N-디아릴아미노)트리페닐아민, 1,3,5-트리스(4-디아릴아미노페닐)벤젠, 4,4',4''-트리스(N,N-디페닐아미노)트리페닐아민, 4,4',4''-트리스(N-3-메틸페닐-N-페닐아미노)트리페닐아민 또는 1,3,5-트리스(4-디페닐아미노페닐)벤젠의 라디칼을 포함하는 C_{12-60} 3급 아미노 방향족 아릴을 포함하는 것인 화합물.

청구항 13.

제1항에 있어서, 하나 이상의 말단 캡핑기가 비치환 또는 C_{1-20} 알킬, C_{2-20} 알케닐, C_{1-20} 알콕시, C_{6-20} 아릴, C_{6-20} 아릴옥시, 플루오로, C_{1-20} 플루오로알킬, C_{1-20} 퍼플루오로알킬, C_{1-20} 헤테로알킬, C_{3-20} 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된 하기 화학식 CVI 내지 CXXVII의 1가 라디칼이고:

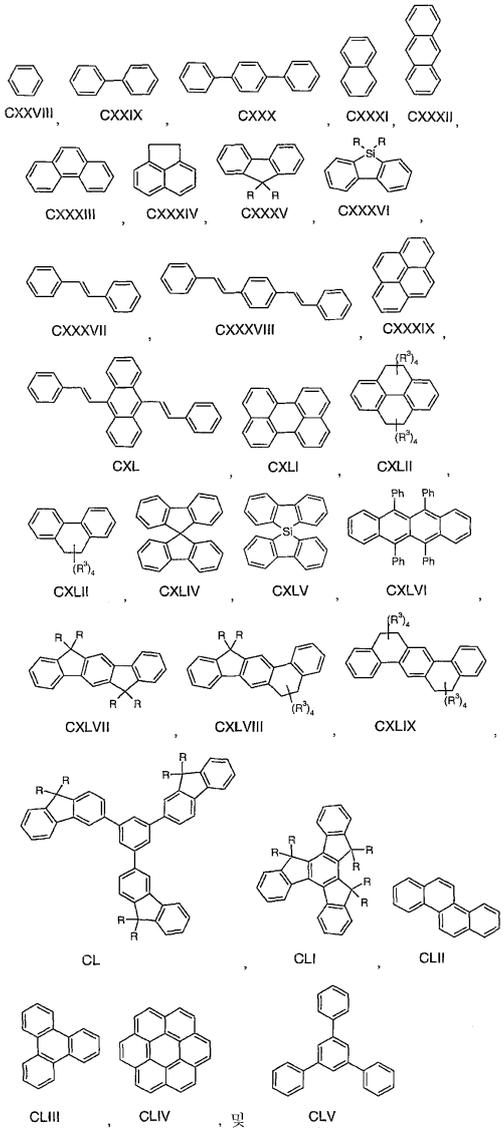


각각의 R이 C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, C₃₋₂₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 및 이들의 조합으로부터 독립적으로 선택되고;

각각의 X가 독립적으로 O, S 또는 NR¹이고, 이때 R¹이 C₁₋₃₀ 알킬, C₆₋₂₀ 아릴, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 또는 이들의 조합인 화합물.

청구항 14.

제13항에 있어서, 말단 캡핑기가 화학식 CVI 내지 CXXVII의 기에 공역된 잔기를 추가로 포함하고, 이때 상기 잔기가 비치환 또는 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된 하기 화학식 CXXVIII 내지 CLV의 2가 라디칼들로부터 선택되며:

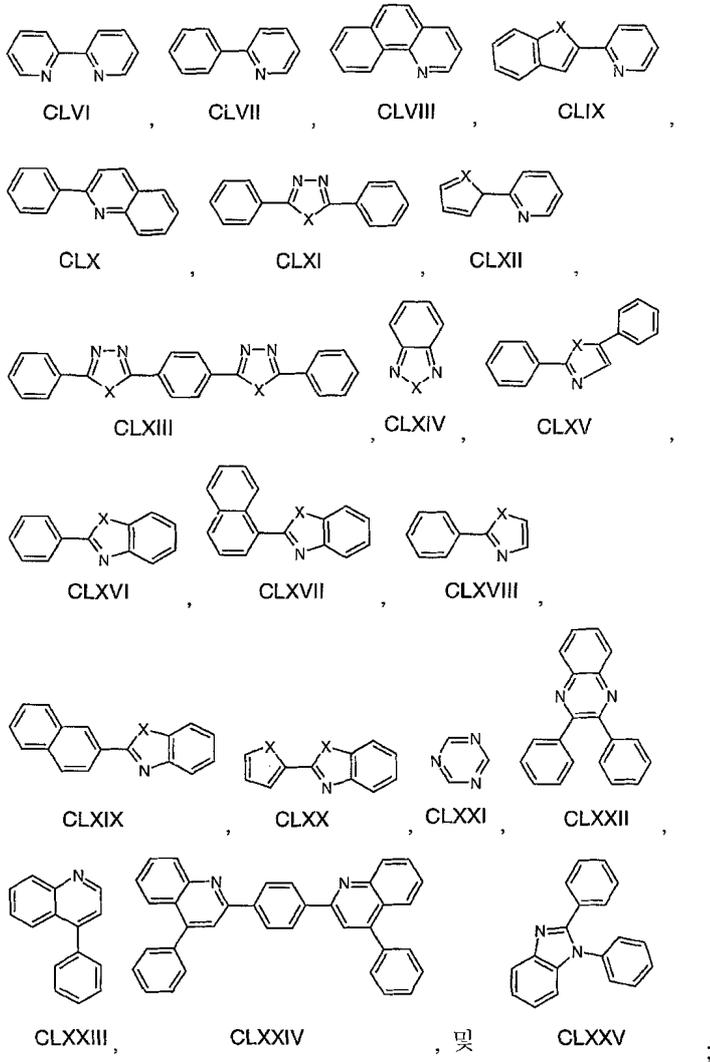


각각의 R이 C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₃₀ 아릴, C₆₋₃₀ 아릴옥시, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 및 이들의 조합으로부터 독립적으로 선택되고;

각각의 R³이 수소, C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₃₀ 아릴, C₆₋₃₀ 아릴옥시, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 및 이들의 조합으로부터 독립적으로 선택되는 것인 화합물.

청구항 15.

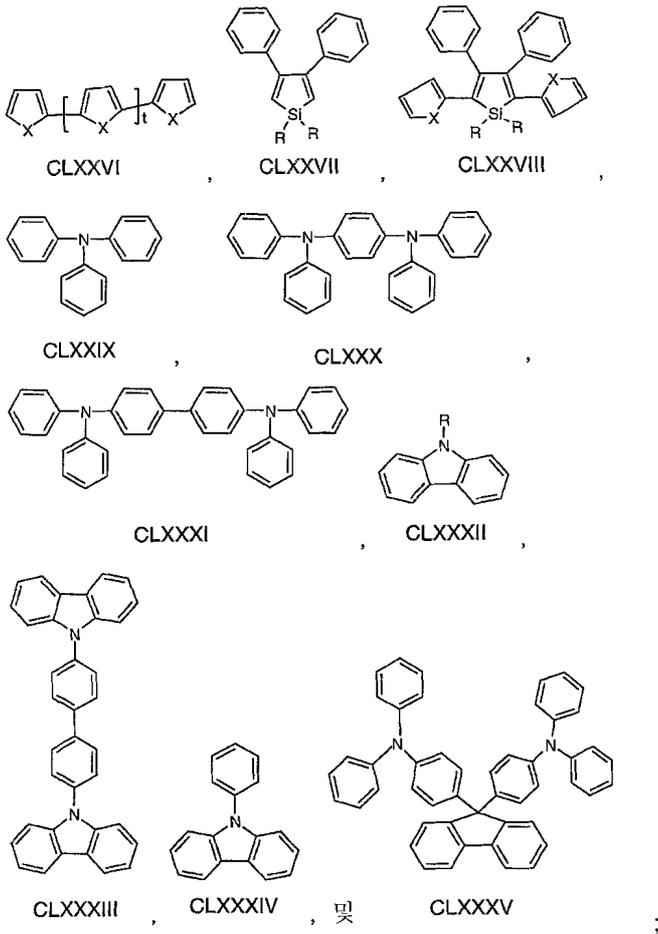
제13항에 있어서, 말단 캡핑기가 화학식 CVI 내지 CXXVII의 기에 공역된 잔기를 추가로 포함하고, 이때 상기 잔기가 비치환 또는 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된 하기 화학식 CLVI 내지 CLXXV의 2가 라디칼들로부터 선택되며:



각각의 X가 독립적으로 O, S 또는 NR¹이고, 이때 R¹이 C₁₋₃₀ 알킬, C₆₋₂₀ 아릴, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 또는 이들의 조합인 화합물.

청구항 16.

제13항에 있어서, 말단 캡핑기가 화학식 CVI 내지 CXXCII의 기에 공역된 잔기를 추가로 포함하고, 이때 상기 잔기가 비치환 또는 C₁₋₂₀ 알킬, C₂₋₂₀ 알케닐, C₁₋₂₀ 알콕시, C₆₋₂₀ 아릴, C₆₋₂₀ 아릴옥시, 플루오로, C₁₋₂₀ 플루오로알킬, C₁₋₂₀ 퍼플루오로알킬, C₁₋₂₀ 헤테로알킬, C₃₋₂₀ 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된 하기 화학식 CLXXVI 내지 CLXXXV의 2가 라디칼들로부터 선택되며:



각각의 R이 C₁₋₃₀ 알킬, C₂₋₃₀ 알케닐, C₁₋₃₀ 알콕시, C₆₋₃₀ 아릴, C₆₋₃₀ 아릴옥시, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 및 이들의 조합으로부터 독립적으로 선택되고;

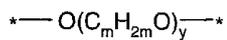
각각의 X가 독립적으로 O, S 또는 NR¹이고, 이때 R¹이 C₁₋₃₀ 알킬, C₆₋₂₀ 아릴, C₃₋₃₀ 헤테로아릴, C₁₋₃₀ 헤테로알킬 또는 이들의 조합이며;

각각의 t가 0 내지 4의 정수인 화합물.

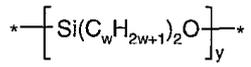
청구항 17.

제1항에 있어서, 하기 화학식 VI의 2가 폴리(옥시알킬렌) 부분 또는 하기 화학식 VII의 2가 폴리(디알킬실록산) 부분을 포함하는 하나 이상의 연결 부분으로 치환된 것인 화합물.

<화학식 VI>



<화학식 VII>



상기 식들에서, m은 1 내지 6의 정수이고;

y는 2 내지 20의 정수이고;

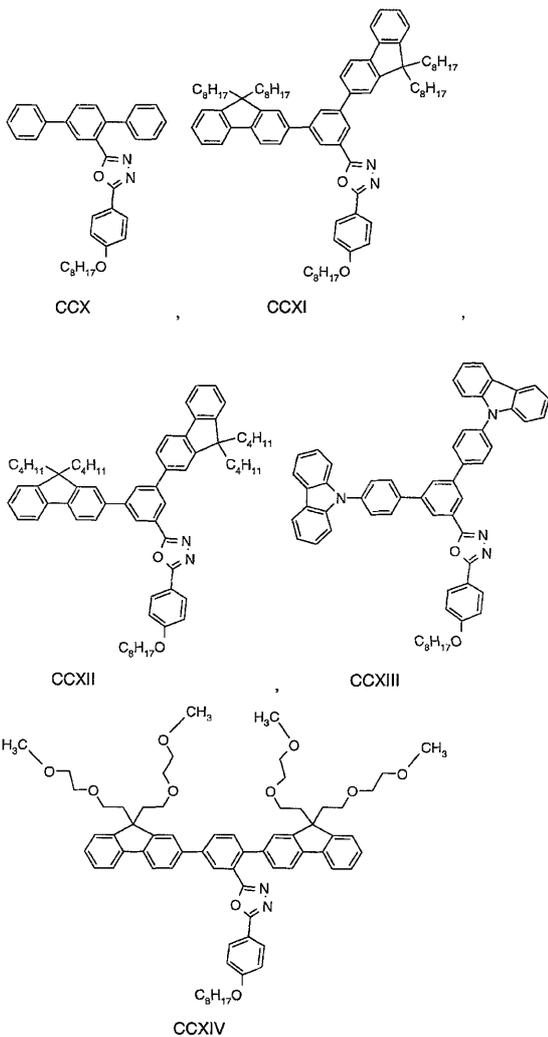
w는 1 내지 10의 정수이다.

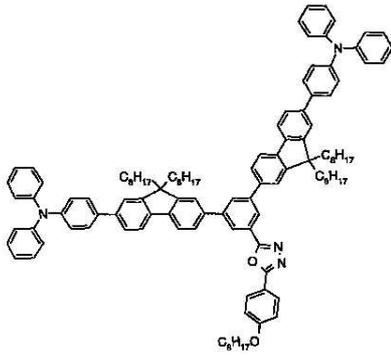
청구항 18.

제1항에 있어서, 하나 이상의 플루오로, 플루오로알킬 또는 퍼플루오로알킬 기로 치환된 것인 화합물.

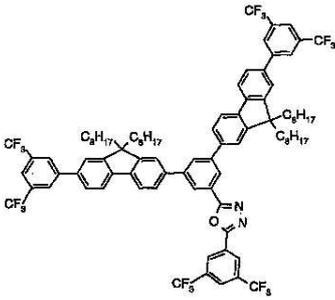
청구항 19.

제1항에 있어서,



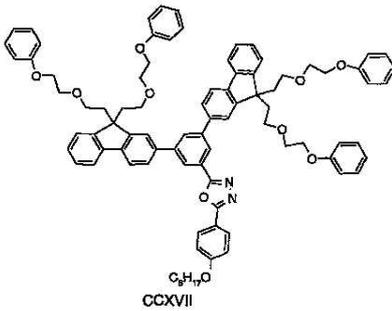


CCXV



CCXVI

, 또는



CCXVII

인 화합물.

청구항 20.

제1항에 있어서, 비결정질인 화합물.

청구항 21.

제1항에 있어서, 전자 수송 물질인 화합물.

청구항 22.

제1항에 있어서, 전자 수송 물질 및 정공 수송 물질 둘다인 화합물.

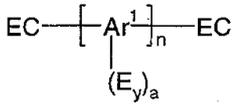
청구항 23.

제1항에 있어서, 발광 물질 및 전자 수송 물질인 화합물.

청구항 24.

(a) 제 1 방향족 코어 및 이 제 1 방향족 코어에 공액된 2개의 제 1 말단 캡핑기들을 포함하는 하기 화학식 I의 제 1 화합물:

<화학식 I>



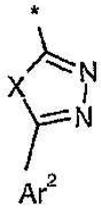
{상기 식에서,

각각의 Ar¹은 독립적으로 비치환 또는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, 페닐렌 기 아릴렌 또는 나프탈렌 기 아릴렌이고;

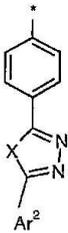
각각의 a는 독립적으로 1 또는 2이고;

각각의 E_y는 독립적으로 하기 화학식 II 또는 화학식 III의 구조이고:

<화학식 II>



<화학식 III>



[상기 식들에서,

각각의 X는 독립적으로 O, S 또는 NR¹이고, 이때 R¹은 알킬, 아릴, 헤테로아릴, 헤테로알킬 또는 이들의 조합이며;

각각의 Ar²는 독립적으로 비치환 또는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴, 알킬 옥사디아졸릴, 아릴 옥사디아졸릴, 알킬 트리아졸릴, 아릴 트리아졸릴, 디아릴아미노, 아릴디아릴아미노 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된 카르보시클릭 아릴 기이고;

각각의 별표(-*)는 화합물중의 또다른 기에 대한 결합 위치를 나타낸다];

n은 1 또는 2의 정수이고;

각각의 말단 캡핑기(EC)는 독립적으로 비치환 또는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, 카르보시클릭 아릴, 헤테로아릴 또는 3급 아미노 아릴 기이고, 이때 상기 말단 캡핑기는 아릴렌 방향족 코어에 공액되며, 단지 1개의 EC만이 화학식 II 또는 화학식 III의 기이다}; 및

(b) 전하 수송 물질, 전하 차단 물질, 발광 물질, 색상 전환 물질, 중합체성 결합제 및 이들의 조합으로부터 선택된 제 2 화합물

을 포함하는 조성물.

청구항 25.

제24항에 있어서, 정공 수송 물질 및 전자 수송 물질을 포함하는 조성물.

청구항 26.

제24항에 있어서, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질 및 발광 물질을 포함하는 조성물.

청구항 27.

제24항에 있어서, 제 2 화합물이,

비치환되거나, 제 1 화합물의 제 1 방향족 코어상에 존재하는 것과 동일한 유형의 치환기로 치환되거나, 또는 제 1 화합물의 제 1 방향족 코어상에는 없는 치환기로 치환될 수 있는, 제 1 화합물의 제 1 방향족 코어를 포함하는 방향족 라디칼;

비치환되거나, 제 1 말단 캡핑기에 존재하는 것과 동일한 유형의 치환기로 치환되거나, 또는 제 1 말단 캡핑기에는 없는 치환기로 치환될 수 있는, 제 1 화합물의 제 1 말단 캡핑기를 포함하는 제 2 말단 캡핑기;

비치환되거나, 제 1 말단 캡핑기에 존재하는 것과 동일한 유형의 치환기로 치환되거나, 또는 제 1 말단 캡핑기에는 없는 치환기로 치환될 수 있는, 제 1 화합물의 제 1 말단 캡핑기의 2가 라디칼을 포함하는 2가 라디칼; 또는

이들의 조합을 갖는, 전하 수송 물질, 전하 차단 물질, 발광 물질, 색상 전환 물질 및 이들의 조합으로부터 선택된 것인 조성물.

청구항 28.

제27항에 있어서, 제 2 화합물이 비-중합체성이고, 제 2 방향족 코어 및 하나 이상의 제 2 말단 캡핑기를 포함하는 것인 조성물.

청구항 29.

제28항에 있어서, 제 2 화합물의 제 2 말단 캡핑기가 제 1 화합물의 제 1 말단 캡핑기를 포함하는 것인 조성물.

청구항 30.

제28항에 있어서, 발광 중합체를 추가로 포함하는 조성물.

청구항 31.

제28항에 있어서, 전기활성 중합체를 추가로 포함하는 조성물.

청구항 32.

제28항에 있어서, 비활성 중합체를 추가로 포함하는 조성물.

청구항 33.

제29항에 있어서, 제 2 화합물의 제 2 방향족 코어가 제 1 화합물의 제 1 방향족 코어와 다르고, 조성물이 제 1 방향족 코어를 포함하는 제 1 단량체 및 제 2 방향족 코어를 포함하는 제 2 단량체를 포함하는 단량체 혼합물을 추가로 포함하는 것인 조성물.

청구항 34.

제29항에 있어서, 제 2 화합물의 제 2 방향족 코어가 제 1 화합물의 제 1 방향족 코어와 다르고, 조성물이 제 1 방향족 코어를 포함하는 제 1 단량체 및 제 2 방향족 코어를 포함하는 제 2 단량체를 포함하는 단량체 혼합물의 반응 생성물인 중합체를 추가로 포함하는 것인 조성물.

청구항 35.

제28항에 있어서, 제 2 화합물의 제 2 방향족 코어가 제 1 화합물의 제 1 방향족 코어를 포함하는 것인 조성물.

청구항 36.

제35항에 있어서, 발광 중합체를 추가로 포함하는 조성물.

청구항 37.

제35항에 있어서, 전기활성 중합체를 추가로 포함하는 조성물.

청구항 38.

제35항에 있어서, 비활성 중합체를 추가로 포함하는 조성물.

청구항 39.

제35항에 있어서, 제 2 화합물의 제 2 말단 캡핑기가 제 1 화합물의 제 1 말단 캡핑기와 다르고, 조성물이 제 1 말단 캡핑기 또는 제 1 말단 캡핑기의 2가 라디칼을 포함하는 제 1 단량체 및 제 2 말단 캡핑기 또는 제 2 말단 캡핑기의 2가 라디칼을 포함하는 제 2 단량체를 포함하는 단량체 혼합물을 추가로 포함하는 것인 조성물.

청구항 40.

제35항에 있어서, 제 2 화합물이 제 1 화합물의 제 1 말단 캡핑기와 다른 제 2 말단 캡핑기를 가지고, 조성물이 제 1 말단 캡핑기 또는 제 1 말단 캡핑기의 2가 라디칼을 포함하는 제 1 단량체 및 제 2 말단 캡핑기 또는 제 2 말단 캡핑기의 2가 라디칼을 포함하는 제 2 단량체를 포함하는 단량체 혼합물의 반응 생성물인 중합체를 추가로 포함하는 것인 조성물.

청구항 41.

제24항에 있어서, 제 2 화합물이 제 1 화합물의 제 1 방향족 코어를 포함하는 제 1 단량체를 포함하는 단량체 혼합물의 반응 생성물을 포함하는 중합체인 조성물.

청구항 42.

제24항에 있어서, 제 2 화합물이 제 1 말단 캡핑기 또는 제 1 말단 캡핑기의 라디칼을 포함하는 제 1 단량체를 포함하는 단량체 혼합물의 반응 생성물인 중합체인 조성물.

청구항 43.

제24항에 있어서, 비결정질인 조성물.

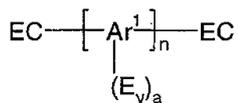
청구항 44.

제24항에 있어서, 용액 가공성(solution processible)인 조성물.

청구항 45.

방향족 코어 및 이 방향족 코어에 공액된 2개의 말단 캡핑기들을 갖는 하기 화학식 I의 화합물을 포함하는 유기 전자 장치.

<화학식 I>



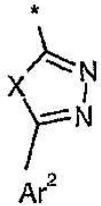
상기 식에서,

각각의 Ar¹은 독립적으로 비치환 또는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, 페닐렌 기 아릴렌 또는 나프탈렌 기 아릴렌이고;

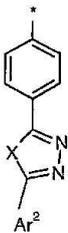
각각의 a는 독립적으로 1 또는 2이고;

각각의 E_y는 독립적으로 하기 화학식 II 또는 화학식 III의 구조이고:

<화학식 II>



<화학식 III>



[상기 식들에서,

각각의 X는 독립적으로 O, S 또는 NR¹이고, 이때 R¹은 알킬, 아릴, 헤테로아릴, 헤테로알킬 또는 이들의 조합이며;

각각의 Ar²는 독립적으로 비치환 또는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴, 알킬 옥사디아졸릴, 아릴 옥사디아졸릴, 알킬 트리아졸릴, 아릴 트리아졸릴, 디아릴아미노, 아릴디아릴아미노 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된 카르보시클릭 아릴 기이고;

각각의 별표(-*)는 화합물중의 또다른 기에 대한 결합 위치를 나타낸다];

n은 1 또는 2의 정수이고;

각각의 말단 캡핑기(EC)는 독립적으로 비치환 또는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된 카르보시클릭 아릴, 헤테로아릴 또는 3급 아미노 아릴 기이고, 이때 상기 말단 캡핑기는 아릴렌 방향족 코어에 공액되며, 단지 1개의 EC만이 화학식 II 또는 화학식 III의 기이다.

청구항 46.

제45항에 있어서, 유기 전계발광 장치인 유기 전자 장치.

청구항 47.

제46항에 있어서, 유기 전계발광 장치가 화학식 I의 화합물을 포함하는 유기 방출성 소자(emissive element)를 포함하는 것인 유기 전자 장치.

청구항 48.

제47항에 있어서, 유기 방출성 소자가 전하 수송 물질, 전하 차단 물질, 중합체성 물질, 발광 물질, 색상 전환층 또는 이들의 조합을 추가로 포함하는 것인 유기 전자 장치.

청구항 49.

제47항에 있어서, 유기 방출성 소자가 다층을 가지며, 화학식 I의 화합물이 발광층에 존재하는 것인 유기 전자 장치.

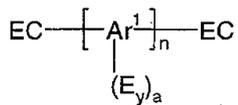
청구항 50.

제47항에 있어서, 유기 방출성 소자가 다층을 가지며, 화학식 I의 화합물이 전하 수송층에 존재하는 것인 유기 전자 장치.

청구항 51.

(a) 방향족 코어 및 이 방향족 코어에 공액된 2개의 말단 캡핑기들을 갖는 하기 화학식 I의 화합물을 포함하는 전달층을 포함하는 공여자 시트(sheet)를 제조하는 단계:

<화학식 I>



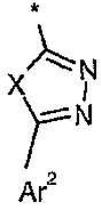
{상기 식에서,

각각의 Ar¹은 독립적으로 비치환 또는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, 페닐렌 기 아릴렌 또는 나프탈렌 기 아릴렌이고;

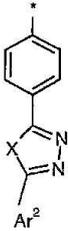
각각의 a는 독립적으로 1 또는 2이고;

각각의 E_y는 독립적으로 하기 화학식 II 또는 화학식 III의 구조이고:

<화학식 II>



<화학식 III>



[상기 식들에서,

각각의 X는 독립적으로 O, S 또는 NR¹이고, 이때 R¹은 알킬, 아릴, 헤테로아릴, 헤테로알킬 또는 이들의 조합이며;

각각의 Ar²는 독립적으로 비치환 또는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴, 알킬 옥사디아졸릴, 아릴 옥사디아졸릴, 알킬 트리아졸릴, 아릴 트리아졸릴, 디아릴아미노, 아릴디아릴아미노 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된 카르보시클릭 아릴 기이고;

각각의 별표(-*)는 화합물중의 또다른 기에 대한 결합 위치를 나타낸다];

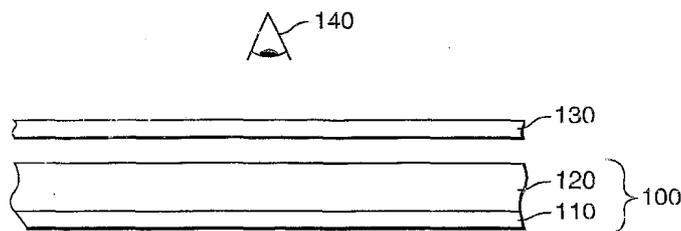
n은 1 또는 2의 정수이고;

각각의 말단 캡핑기(EC)는 독립적으로 비치환 또는 알킬, 알케닐, 알콕시, 아릴, 아릴옥시, 플루오로, 플루오로알킬, 퍼플루오로알킬, 헤테로알킬, 헤테로아릴 및 이들의 조합으로부터 선택된 하나 이상의 기들로 치환된, 카르보시클릭 아릴, 헤테로아릴 또는 3급 아미노 아릴 기이고, 이때 상기 말단 캡핑기는 아릴렌 방향족 코어에 공액되며, 단지 1개의 EC만이 화학식 II 또는 화학식 III의 기이다}; 및

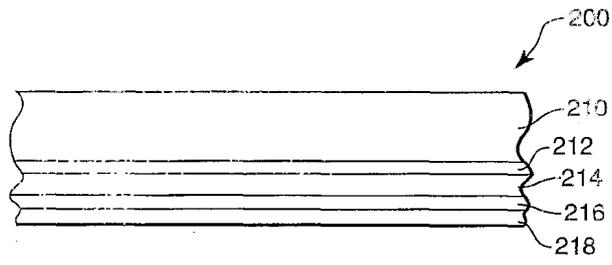
(b) 최소한 발광 구조의 일부를 형성하는 상기 전달층을 상기 공여자 시트로부터 수용자 시트로 전달하는 단계를 포함하는, 유기 전계발광 장치의 제조 방법.

도면

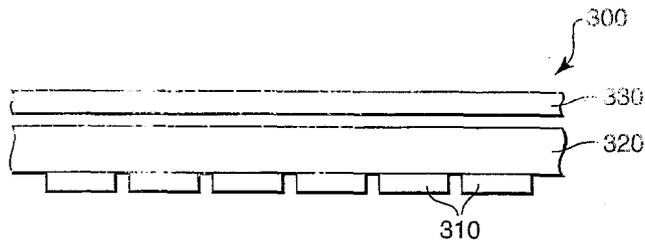
도면1



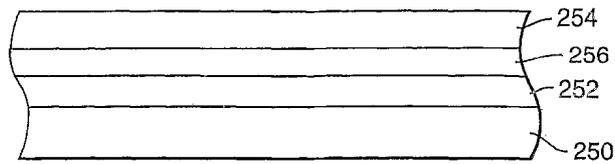
도면2



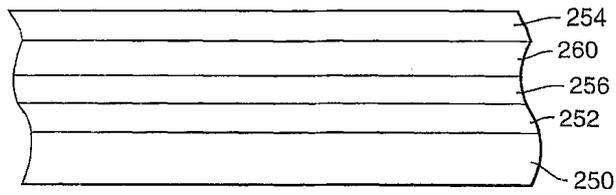
도면3



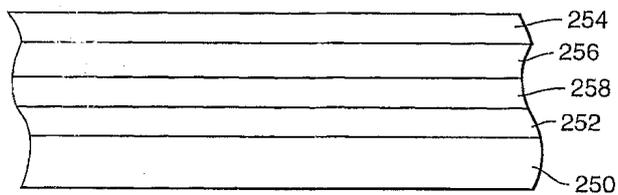
도면4A



도면4B



도면4C



도면4D

