

**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 공개특허공보(A)****(11) 공개번호** 10-2021-0016423  
**(43) 공개일자** 2021년02월15일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*H01L 51/00* (2006.01) *C07D 405/04* (2006.01)  
*C09K 11/06* (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)

(52) CPC특허분류  
*H01L 51/0073* (2013.01)  
*C07D 405/04* (2013.01)

(21) 출원번호 10-2020-7037691  
(22) 출원일자(국제) 2019년05월28일  
심사청구일자 없음  
(85) 번역문제출일자 2020년12월28일  
(86) 국제출원번호 PCT/EP2019/063712  
(87) 국제공개번호 WO 2019/229011  
국제공개일자 2019년12월05일

(30) 우선권주장  
18175234.6 2018년05월30일  
유럽특허청(EPO)(EP)

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

(72) 발명자  
**파르함 아미르**  
독일 60486 프랑크푸르트 암 마인 뢰미셔 링 26  
**크뢰버 요나스**  
독일 60311 프랑크푸르트 암 마인 파르가제 4  
(뒷면에 계속)

(74) 대리인  
**특허법인코리아나**

전체 청구항 수 : 총 19 항

**(54) 발명의 명칭 유기 전자 디바이스용 조성물****(57) 요약**

본 발명은 전자 수송 호스트 및 정공 수송 호스트를 포함하는 조성물에 관한 것이고, 전자 디바이스에서의 그의 용도에 관한 것이고, 상기 조성물을 포함하는 전자 디바이스에 관한 것이다. 전자 수송 호스트는 가장 바람직하게는 트리아진-디벤조푸란-플루오레닐 시스템의 부류로부터 또는 트리아진-디벤조티오펜-플루오레닐 시스템의 부류로부터 선택된다. 정공 수송 호스트는 바람직하게는 비스카르바졸의 부류로부터 선택된다.

(52) CPC특허분류

*C09K 11/06* (2021.01)  
*H01L 51/0052* (2013.01)  
*H01L 51/0055* (2013.01)  
*H01L 51/0056* (2013.01)  
*H01L 51/0067* (2013.01)  
*H01L 51/0074* (2013.01)  
*H01L 51/5016* (2013.01)  
*C09K 2211/1007* (2013.01)  
*C09K 2211/1029* (2013.01)

(72) 발명자

**엔겔하르트 옌스**

독일 64285 다름슈타트 하이델베르거 슈트라쎬 148

**야치 안야**

독일 60489 프랑크푸르트 암 마인 하트슈타이너 슈  
트라쎬 20

**아이크호프 크리스티안**

독일 68259 만하임 파일크라우트백 12

**에렌라이히 크리스티안**

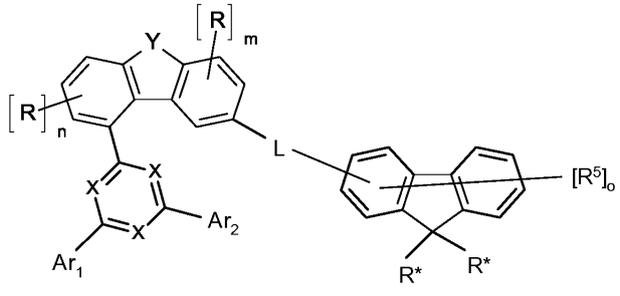
독일 64285 다름슈타트 아이히베르크슈트라쎬 22

명세서

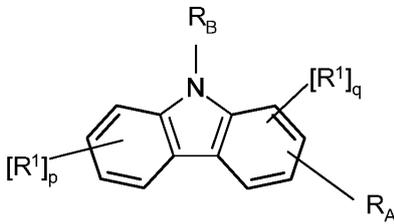
청구범위

청구항 1

하기 식 (1) 의 적어도 하나의 화합물 및 하기 식 (2) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 조성물로서,



식 (1)



식 (2)

식중 사용되는 기호 및 지수는 다음과 같다:

X 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, CR<sup>0</sup> 또는 N 이고, 단, 적어도 2 개의 X 기는 N 이고;

Y 는 0 및 S 로부터 선택되고;

L 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고 단일 결합 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R<sup>5</sup> 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 고리 시스템이고;

R<sub>A</sub> 은 H, -L<sub>3</sub>-Ar<sub>4</sub> 또는 -L<sub>1</sub>-N(Ar)<sub>2</sub> 이고;

R<sub>B</sub> 는 Ar<sub>3</sub> 또는 -L<sub>2</sub>-N(Ar)<sub>2</sub> 이고;

L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub> 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 단일 결합, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R<sup>3</sup> 라디칼에 의해 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고;

L<sub>3</sub> 은 단일 결합, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R<sup>3</sup> 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 여기서 카르바졸 상의 하나의 치환기 R<sup>1</sup> 은 치환기 R<sup>3</sup> 와 고리를 형성할 수도 있고;

Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub> 는 각각의 경우 각각 독립적으로, 하나 이상의 R<sup>3</sup> 라디칼에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴기이고;

Ar<sub>3</sub>은 하나 이상의 R<sup>3</sup> 라디칼에 의해 치환될 수도 있는, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 또는 10 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템이고;

Ar<sub>4</sub>는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수도 있는 비치환 또는 치환된 9-아릴

카르바졸릴 또는 비치환 또는 치환된 카르바졸-9-일이고, 여기서 하나 이상의 경우 2 개의  $R^4$  라디칼의 각각 또는 하나의  $R^4$  라디칼과 함께 하나의  $R^1$  라디칼은 독립적으로 단환 또는 다환, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리를 형성할 수도 있으며, 여기서 아틸은 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고  $R^3$  로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고;

$R^*$  는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 6 내지 12 개의 탄소 원자를 갖는 아릴 기이며, 여기서 2 개의 치환기  $R^*$  는, 하나 이상의 치환기  $R^5$  로 치환될 수도 있는 단환 또는 다환, 지방족, 방향족, 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 함께 형성할 수도 있고;

$R^0$ ,  $R$ ,  $R^1$  은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, CN,  $NO_2$ ,  $N(Ar)_2$ ,  $N(R^2)_2$ ,  $C(=O)Ar$ ,  $C(=O)R^2$ ,  $P(=O)(Ar)_2$ ,  $P(Ar)_2$ ,  $B(Ar)_2$ ,  $Si(Ar)_3$ ,  $Si(R^2)_3$ , 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 (이들 각각은 하나 이상의  $R^2$  라디칼에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는  $R^2C=CR^2$ ,  $Si(R^2)_2$ , C=O, C=S,  $C=NR^2$ ,  $P(=O)(R^2)$ , SO,  $SO_2$ ,  $NR^2$ , O, S 또는  $CONR^2$  에 의해 대체될 수도 있고, 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는  $NO_2$  에 의해 대체될 수도 있음), 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각각의 경우 하나 이상의  $R^2$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^2$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^2$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬 기로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 동일한 탄소 원자 또는 인접한 탄소 원자에 결합된 2 개의 치환기  $R^0$  및/또는 R 및/또는  $R^1$  이 하나 이상의  $R^2$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 단환 또는 다환의 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성하는 것이 선택적으로 가능하고;

$R^2$  는 각각의 경우 동일하거나 상이하게 H, D, F, Cl, Br, I, CN,  $NO_2$ ,  $N(Ar)_2$ ,  $NH_2$ ,  $N(R^3)_2$ ,  $C(=O)Ar$ ,  $C(=O)H$ ,  $C(=O)R^3$ ,  $P(=O)(Ar)_2$ , 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 2 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (이들 각각은 하나 이상의  $R^3$  라디칼로 치환될 수도 있고, 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는  $HC=CH$ ,  $R^3C=CR^3$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^3)_2$ ,  $Ge(R^3)_2$ ,  $Sn(R^3)_2$ , C=O, C=S, C=Se,  $C=NR^3$ ,  $P(=O)(R^3)$ , SO,  $SO_2$ , NH,  $NR^3$ , O, S, CONH 또는  $CONR^3$  으로 대체될 수도 있고 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는  $NO_2$  로 대체될 수도 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각각의 경우 하나 이상의  $R^3$  라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^3$  라디칼로 치환될 수도 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기, 또는 이들 시스템의 조합으로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 여기서 둘 이상의 인접 치환기  $R^2$  가 하나 이상의  $R^3$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 단환 또는 다환의, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성하는 것이 선택적으로 가능하고;

$R^3$  은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, CN,  $N(Ar)_2$ , 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드로카르빌 라디칼, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (여기서 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I 또는 CN 으로 대체될 수 있고, 각각 1 내지 4 개의 탄소 원자를 갖는 하나 이상의 알킬기에 의해 치환될 수도 있음) 으로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 둘 이상의 인접한  $R^3$  치환기는 함께 단환 또는 다환의 지방족 고리 시스템을 형성하는 것이 가능하고;

$R^4$  는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드로카르빌

라디칼, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (여기서 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, 1 내지 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지형 알킬기 또는 CN 에 의해 대체될 수도 있음) 으로 이루어지는 군에서 선택되고; 동시에, 둘 이상의 인접한  $R^4$  치환기는 함께 단환 또는 다환 고리 시스템을 형성할 수도 있고;

$R^5$  는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 D, F, CN 및 6 내지 18 개의 탄소 원자를 갖는 아릴기로 이루어지는 군에서 선택되며; 동시에, 둘 이상의 인접한 치환기  $R^5$  는 함께 단환 또는 다환 지방족 고리 시스템을 형성할 수도 있고;

Ar 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 비방향족  $R^3$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고; 동시에, 동일한 질소 원자, 인 원자, 또는 붕소 원자에 결합된 2 개의 Ar 라디칼은 또한  $N(R^3)$ ,  $C(R^3)_2$ , O 및 S 로부터 선택되는 브릿지 또는 단일 결합에 의해 서로 브릿지될 수도 있고,

n 및 m 은 각각의 경우 독립적으로 0, 1, 2 또는 3 이고,

o 는 각각의 경우 독립적으로 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6 또는 7 이고;

q 는 각각의 경우 독립적으로 0, 1, 2 또는 3 이고;

p 는 각각의 경우 독립적으로 0, 1, 2, 3 또는 4 인, 조성물.

## 청구항 2

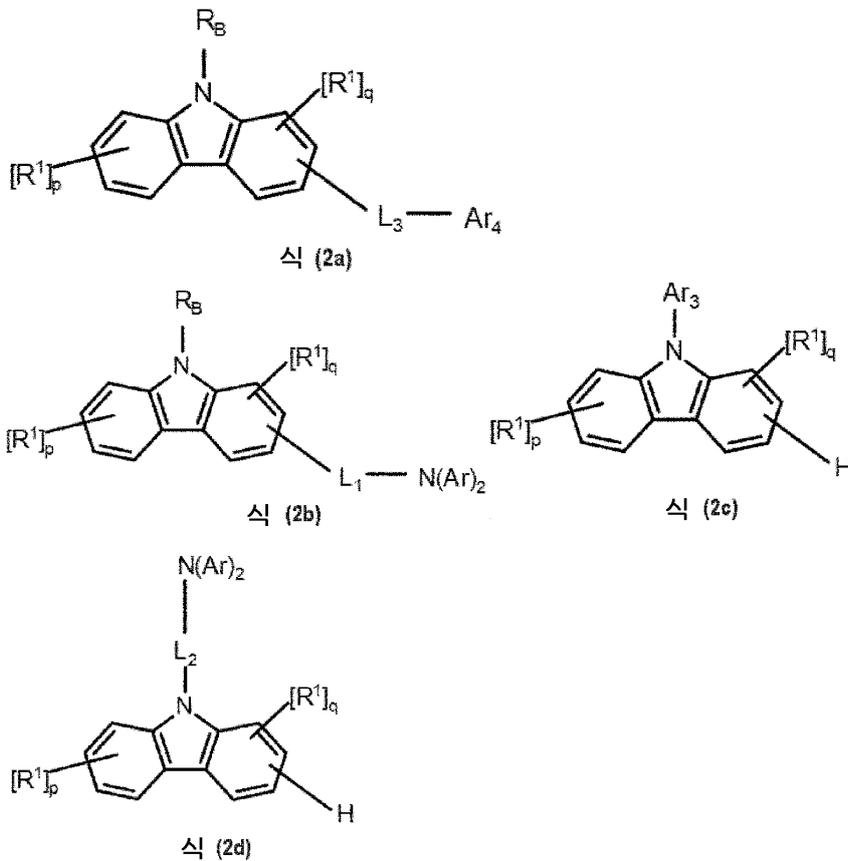
제 1 항에 있어서,

식 (1) 에서 Y 는 0 인 것을 특징으로 하는 조성물.

## 청구항 3

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서,

상기 식 (2) 의 화합물은 하기 식 (2a) 내지 (2d) 중 하나를 따르고



식중 사용된 기호와 지수  $L_1$ ,  $L_2$ ,  $L_3$ ,  $Ar$ ,  $Ar_3$ ,  $Ar_4$ ,  $R^1$ ,  $q$  및  $p$  는 제 1 항에 정의된 바와 같은 것을 특징으로 하는 조성물.

**청구항 4**

제 1 항 내지 제 3 항 중 하나 이상의 항에 있어서,

상기 조성물은 정공 주입 재료, 정공 수송 재료, 정공 차단 재료, 와이드 밴드 갭 재료, 형광 방출체, 인광 방출체, 호스트 재료, 매트릭스 재료, 전자 차단 재료, 전자 수송 재료 및 전자 주입 재료, n 도펀트 및 p 도펀트로 이루어지는 군으로부터 선택된 적어도 하나의 추가 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 조성물.

**청구항 5**

제 1 항 내지 제 4 항 중 하나 이상의 항에 있어서,

상기 조성물은 상기 식 (1) 의 화합물 및 상기 식 (2) 의 화합물로 이루어지는 것을 특징으로 하는 조성물.

**청구항 6**

제 1 항 내지 제 5 항 중 하나 이상의 항에 기재된 조성물 및 적어도 하나의 용매를 포함하는, 포블레이션.

**청구항 7**

유기 전자 디바이스에서의, 제 1 항 내지 제 5 항 중 하나 이상의 항에 따른 조성물의 용도.

**청구항 8**

제 7 항에 있어서,

상기 유기 전자 디바이스는 유기 집적 회로 (OIC), 유기 전계 효과 트랜지스터 (OFET), 유기 박막 트랜지스터 (OTFT), 유기 전계 발광 디바이스, 유기 태양 전지 (OSC), 유기 광학 검출기 및 유기 광수용체의 군으로부터 선

택되는 것을 특징으로 하는 용도.

**청구항 9**

적어도 하나의 유기 층에 제 1 항 내지 제 5 항 중 하나 이상의 항에 기재된 적어도 하나의 조성물을 포함하는 유기 전자 디바이스.

**청구항 10**

제 9 항에 있어서,

상기 유기 전자 디바이스는 유기 집적 회로 (OIC), 유기 전계 효과 트랜지스터 (OFET), 유기 박막 트랜지스터 (OTFT), 유기 전계 발광 디바이스, 유기 태양 전지 (OSC), 유기 광학 검출기 및 유기 광수용체의 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 전자 디바이스.

**청구항 11**

제 9 항 또는 제 10 항에 있어서,

상기 유기 전자 디바이스는 유기 발광 트랜지스터 (OLET), 유기 전계 켄치 디바이스 (OFQD), 유기 발광 전기화학 셀 (OLEC, LEC LEEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 유기 발광 다이오드 (OLED) 로부터 선택된 전계 발광 디바이스인 것을 특징으로 하는 유기 전자 디바이스.

**청구항 12**

제 9 항 내지 제 11 항 중 하나 이상의 항에 있어서,

상기 유기 전자 디바이스는 방출 층 (EML) 에, 전자 수송 층 (ETL) 에, 전자 주입 층 (EIL) 에 및/또는 정공 차단 층 (HBL) 에 제 1 항 내지 제 6 항 중 하나 이상의 항에 기재된 조성물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전자 디바이스.

**청구항 13**

제 9 항 내지 제 12 항 중 하나 이상의 항에 있어서,

상기 유기 전자 디바이스는 제 1 항 내지 제 5 항 중 하나 이상의 항에 기재된 조성물을 상기 방출 층에서 인광 방출체와 함께 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전자 디바이스.

**청구항 14**

제 9 항 내지 제 13 항 중 하나 이상의 항에 기재된 디바이스의 제조 방법으로서,

제 1 항 내지 제 5 항 중 하나 이상의 항에 기재된 조성물을 포함하는 적어도 하나의 유기 층이 기상 증착에 의해 또는 용액으로부터 적용되는 것을 특징으로 하는 디바이스의 제조 방법.

**청구항 15**

제 14 항에 있어서,

제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 기재된, 상기 식 (1) 의 적어도 하나의 화합물 및 상기 식 (2) 의 적어도 하나의 화합물은, 선택적으로 추가 재료와 함께, 적어도 2 개의 재료 소스로부터 연속적으로 또는 동시에 기상으로부터 증착되고, 상기 유기 층을 형성하는 것을 특징으로 하는 디바이스의 제조 방법.

**청구항 16**

제 14 항에 있어서,

제 5 항에 기재된 상기 조성물이 상기 호스트 시스템의 기상 증착을 위한 재료 소스로서 이용되고 선택적으로 추가 재료와 함께 유기 층을 형성하는 것을 특징으로 하는 디바이스의 제조 방법.

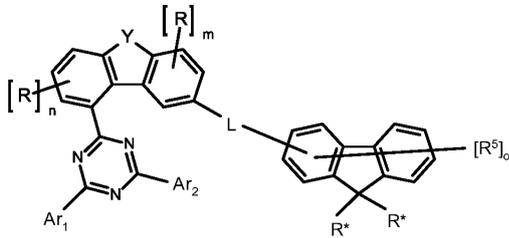
**청구항 17**

제 14 항에 있어서,

제 6 항에 기재된 포플레이션은 상기 유기 층을 적용하기 위해 사용되는 것을 특징으로 하는 디바이스의 제조 방법.

**청구항 18**

하기 식 (1a) 의 화합물로서,



식 (1a)

식 중 사용되는 기호 및 지수는 다음과 같다:

Y 는 O 및 S 로부터 선택되고;

L 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 6 내지 18 개의 탄소 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 바람직하게는 페닐렌, 바이페닐렌, 나프틸렌, 페난트레닐렌 또는 트리페닐레닐렌이며, 이들은 하나 이상의 R<sup>5</sup> 라디칼에 의해 치환될 수도 있다;

Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub> 는 각각의 경우 각각 독립적으로, 하나 이상의 R<sup>3</sup> 라디칼에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴기이고;

R\* 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 6 내지 12 개의 탄소 원자를 갖는 아릴 기이며, 여기서 2 개의 치환기 R\* 는, 하나 이상의 R 라디칼로 치환될 수도 있는 단환 또는 다환, 지방족, 방향족, 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 함께 형성할 수도 있고;

R 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고 D, F, CN 및 6 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 아릴기로 이루어지는 군으로부터 선택되고;

R<sup>3</sup> 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하고, H, D, F, CN, N(Ar)<sub>2</sub>, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드로카르빌 라디칼, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (여기서 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I 또는 CN 으로 대체될 수도 있고, 각각 1 내지 4 개의 탄소 원자를 갖는 하나 이상의 알킬기에 의해 치환될 수도 있음) 으로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 둘 이상의 인접한 R<sup>3</sup> 치환기는 함께 단환 또는 다환의 지방족 고리 시스템을 형성하는 것이 가능하고;

R<sup>5</sup> 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 D, F, CN 및 6 내지 18 개의 탄소 원자를 갖는 아릴기로 이루어지는 군에서 선택되며; 동시에, 둘 이상의 인접한 치환기 R<sup>5</sup> 는 함께 단환 또는 다환 지방족 고리 시스템을 형성할 수도 있고;

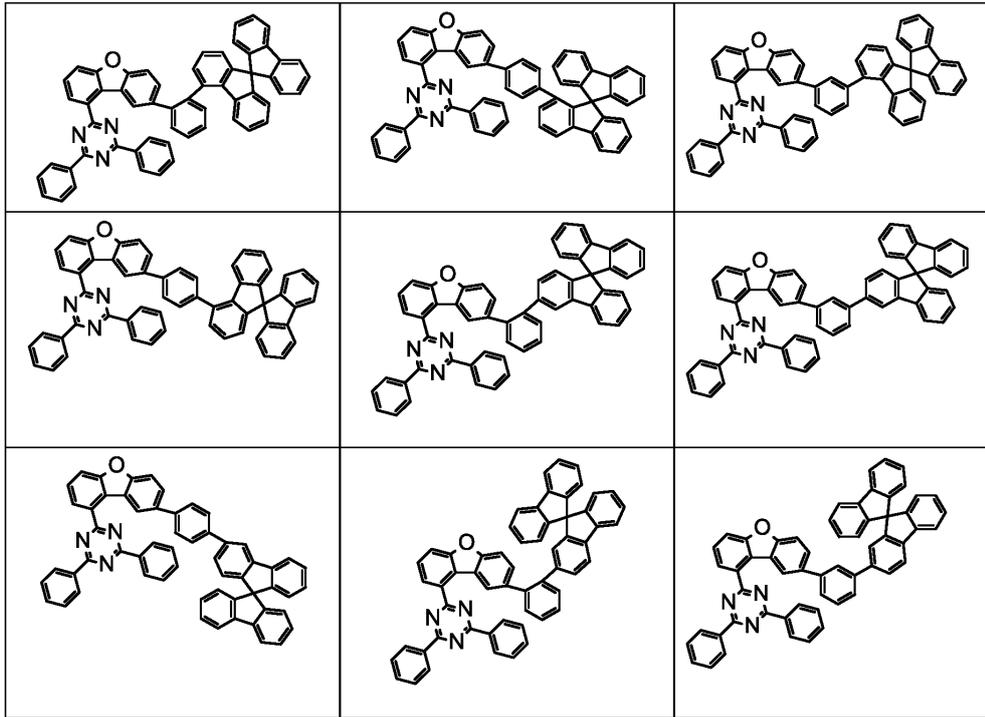
n 및 m 은 각각의 경우 독립적으로 0, 1, 2 또는 3 이고,

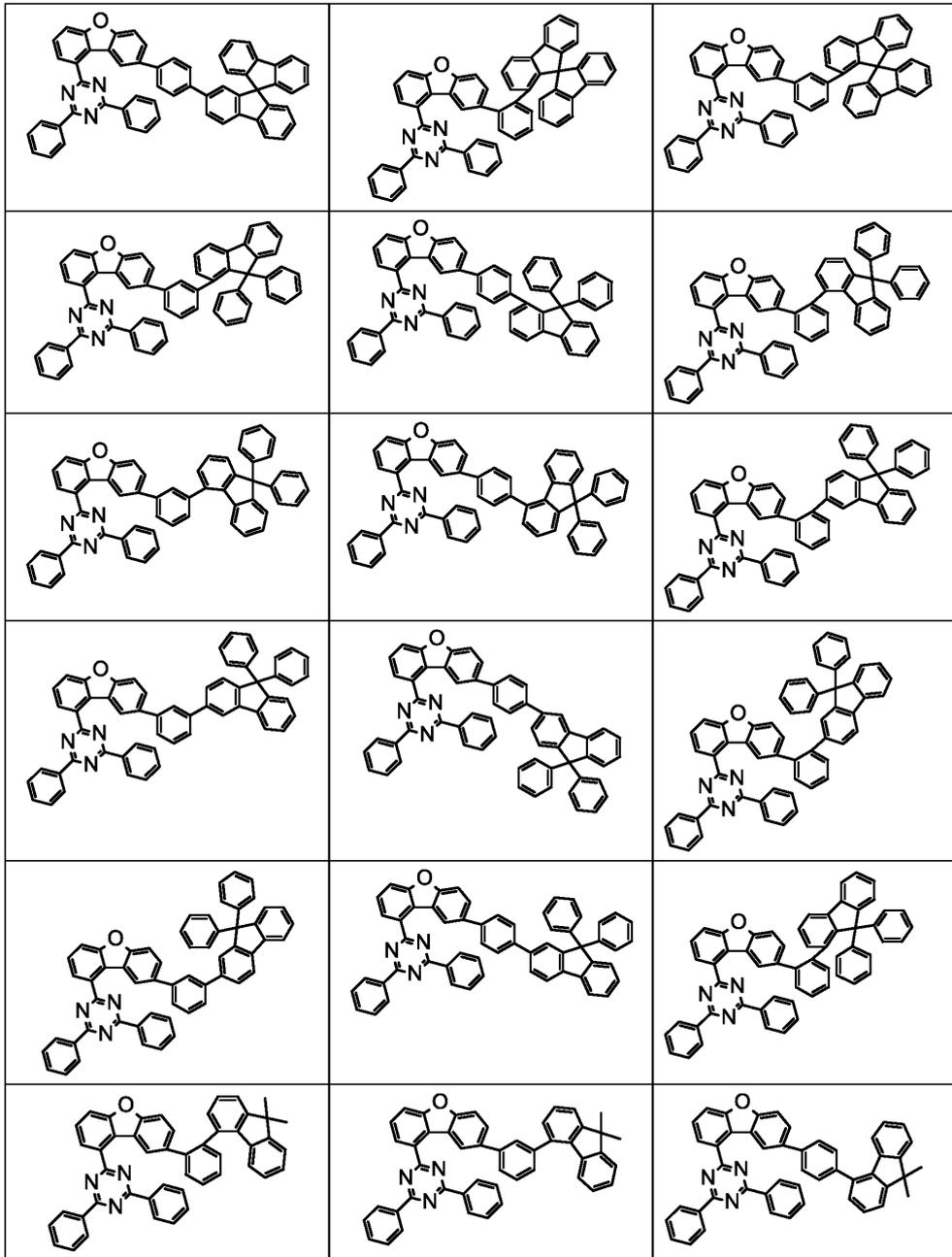
o 는 각각의 경우 독립적으로 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6 또는 7 인, 화합물.

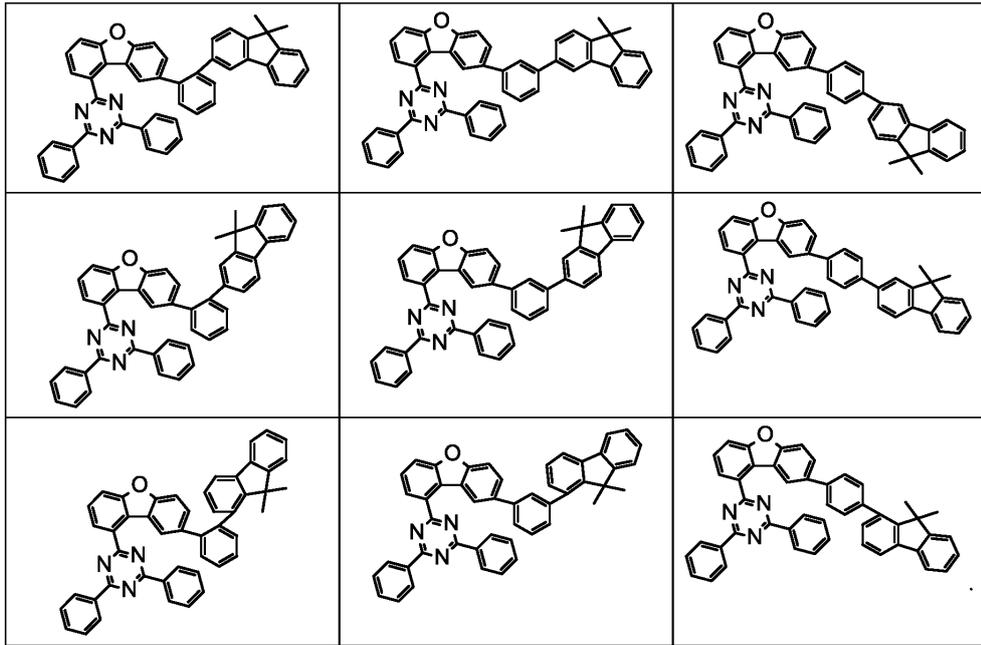
**청구항 19**

제 18 항에 있어서,

하기 화합물들의 군으로부터 선택되는, 화합물.







**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 발명은 전자 수송 호스트 및 정공 수송 호스트를 포함하는 조성물, 이의 전자 디바이스에서의 용도 및 상기 조성물을 포함하는 전자 디바이스에 관한 것이다. 전자 수송 호스트는 보다 바람직하게는 트리아진-디벤조푸란-플루오레닐 시스템의 부류 또는 트리아진-디벤조티오펜-플루오레닐 시스템의 부류로부터 선택된다. 정공 수송 호스트는 바람직하게는 비스카르바졸의 부류로부터 선택된다.

**배경 기술**

[0002] 유기 반도체가 기능성 재료로서 사용되는 유기 전계 발광 디바이스 (예를 들어, OLED -유기 발광 다이오드 또는 OLEC -유기 발광 전기화학 전지) 의 구조는 예를 들어, US 4539507, US 5151629, EP 0676461 및 WO 98/27136 에 기재되어 있다. 형광 방출체뿐만 아니라 여기서 사용되는 방출 재료는 점점 형광보다는 인광을 발하는 유기 금속 착물이 되고 있다 (M. A. Baldo *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* 1999, 75, 4-6). 양자 역학적인 이유로, 인광 방출체로 유기 금속 화합물을 사용하여 최대 4 배의 에너지 효율과 전력 효율 증가가 가능하다. 그러나, 일반적인 말로, 예를 들어 효율, 작동 전압 및 수명에 대하여 OLED, 특히 또한 삼중항 방출 (인광) 을 나타내는 OLED 의 개선이 여전히 필요하다.

[0003] 유기 전계 발광 디바이스의 특성은 사용된 방출체에 의해서만 결정되는 것은 아니다. 또한, 여기서 특히 중요한 것은 호스트 및 매트릭스 재료, 정공 차단 재료, 전자 수송 재료, 정공 수송 재료 및 전자 또는 여기자 차단 재료와 같은 사용되는 다른 재료이며, 이들 중에서도 특히 호스트 또는 매트릭스 재료이다. 이러한 재료의 개선은 전계 발광 디바이스의 뚜렷한 개선을 가져올 수 있다.

[0004] 유기 전자 디바이스에 사용하기 위한 호스트 재료는 당업자에게 잘 알려져 있다. "매트릭스 재료"라는 용어는 또한 의미하는 것이 인광 방출체를 위한 호스트 재료인 경우 종래 기술에서 자주 사용된다. 이 용어의 사용은 또한 본 발명에 적용 가능하다. 한편, 다수의 호스트 재료가 형광 및 인광 전자 디바이스 양자 모두를 위해 개발되었다.

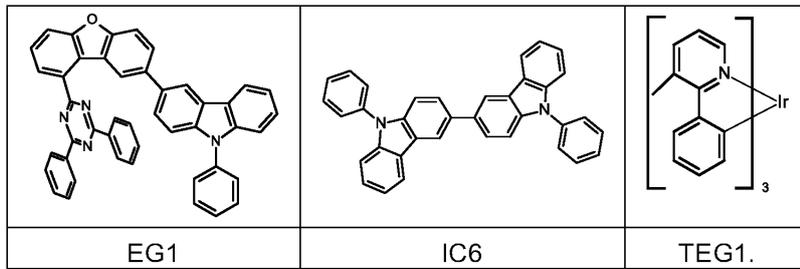
[0005] 종래 기술에 따르면, 트리아진은, 인광 방출체에 사용되는 매트릭스 재료, 예를 들어, WO 2008/056746, KR 20150074603, KR 20150136027, WO 2015/169412, EP3043398 A1, JP5831654, US 2016/093808, US 2017/0054087 또는 WO 2018/016742 에 기재된 구조 중에 있다.

[0006] 전자 디바이스, 특히 유기 전계 발광 디바이스의 성능 데이터를 개선시키는 추가의 수단은 둘 이상의 재료, 특히 호스트 재료 또는 매트릭스 재료의 조합을 사용하는 것이다.

[0007] US 6,392,250 B1에는 OLED의 방출층에서의 전자 수송 재료, 정공 수송 재료 및 형광 방출체로 이루어지는 혼합물의 용도가 개시되어 있다. 이 혼합물의 도움으로, 종래 기술에 비해 OLED의 수명을 개선할 수 있었다.

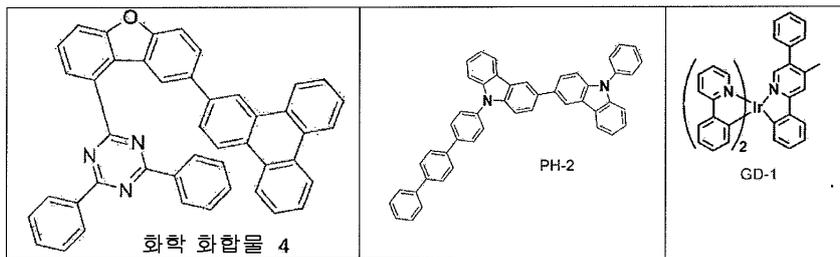
[0008] US 6,803,720 B1에는 OLED의 방출층에서의 인광 방출체 및 정공 수송 재료 및 전자 수송 재료를 포함하는 혼합물의 용도가 개시되어 있다. 정공 수송 재료 및 전자 수송 재료 양자 모두는 작은 유기 분자이다.

[0009] WO 2015/169412에 따르면, 마찬가지로, 예를 들어 혼합물에서, 트리아진-디벤조푸란-카르바졸 유도체 및 트리아진-디벤조티오펜-카르바졸 유도체를 사용할 수 있다. 예를 들어, 방출 층에, 호스트 재료 EG1, IC6 및 인광 방출체 TEG1을 함유하는 E34로 표시된 OLED의 제조가 설명된다. 사용된 화합물의 구조는 아래에 도시되어 있다:



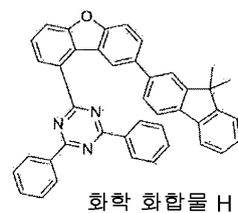
[0010]

[0011] WO 2018/016742에 따르면, 예를 들어 혼합물에서 트리아진-디벤조푸란-아릴 유도체 및 트리아진-디벤조티오펜-아릴 유도체를 사용할 수 있다. 예를 들어, 특정 트리아진-디벤조푸란-트리페닐렌 유도체는 EML에서 특정 비스카바졸 및 방출체와 조합된다. 다음 표에 나타낸 바와 같이 화합물 4와 비스카바졸 PH-2 및 방출체 GD-1의 조합을 예로써 자세히 설명한다:



[0012]

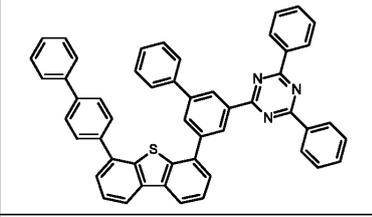
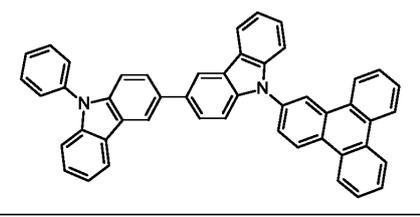
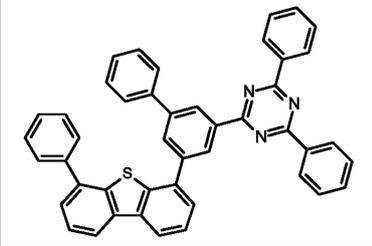
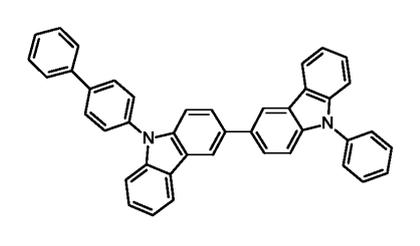
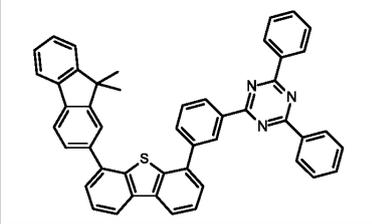
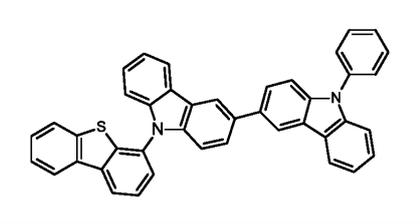
[0013] 하기 식의 화합물 H



[0014]

[0015] 가 단일 호스트 시스템에서 비교 목적으로 사용된다.

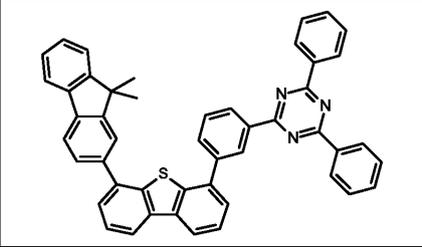
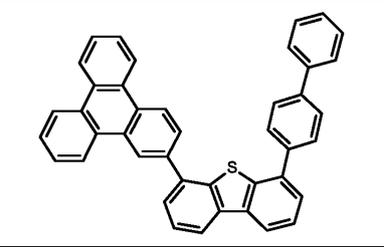
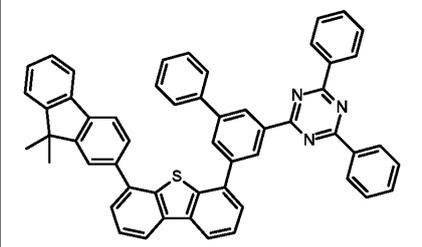
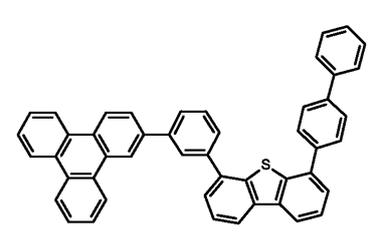
[0016] US 2017/0054087에 따르면, 특정 트리아진-디벤조푸란-아릴 유도체 또는 특정 트리아진-디벤조티오펜-아릴 유도체와 특정 비스카르바졸 유도체의 조합을 발광 디바이스의 제조를 위한 예비 혼합물인, 소위 프리믹스 시스템 (premix system)에서 사용할 수 있다. 다음 표에는 예로써 세 가지 프리믹스가 명시되어 있다:

	
화합물 A14	화합물 F1
	
화합물 A11	화합물 H3
	
화합물 D2	화합물 G14.

[0017]

[0018]

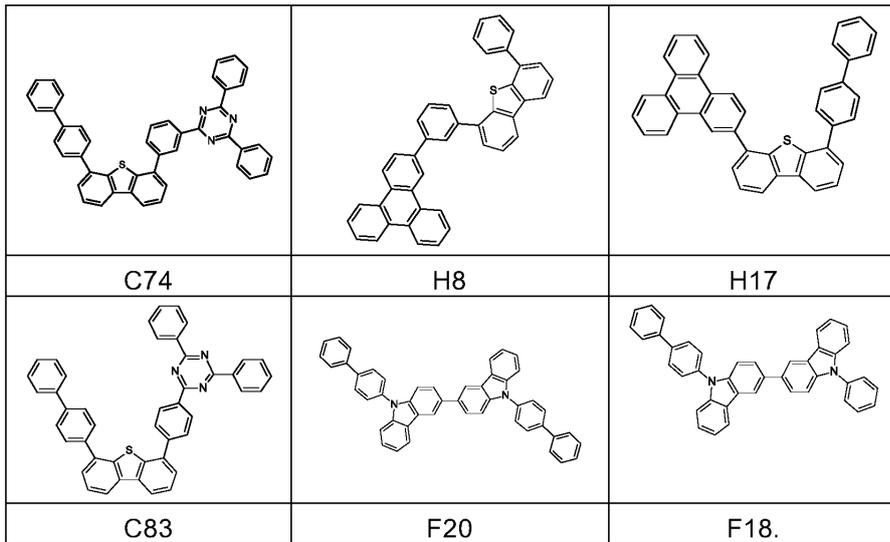
EP3043398 A1 에 따르면, 발광 디바이스의 제조를 위해 특정 트리아진-디벤조푸란-아릴 유도체 또는 특정 트리아진-디벤조티오펜-아릴 유도체와 특정 카르바졸 유도체의 조합을 사용할 수 있다. 다음 표에는 예로써 두 가지 재료 조합이 명시되어 있다:

	
화합물 2	화합물 H2
	
화합물 5	화합물 H11.

[0019]

[0020]

US 2016/093808 에 따르면, 유기 전자 디바이스를 위한 유기 층의 제조를 위해 특정 트리아진 유도체의 삼원 혼합물, 예로써 혼합물 TPMI (화합물 H8, 화합물 C74 및 화합물 H17) 및 화합물 C83, F20 및 F18 의 혼합물을 사용할 수 있다. 구조들은 하기 표에 명시되어 있다:



[0021]

[0022]

그러나, 이들 재료를 사용하는 경우 또는 재료의 혼합물을 사용하는 경우, 특히 유기 전자 디바이스의 효율, 작동 전압 및/또는 수명과 관련하여, 여전히 개선이 필요하다.

### 발명의 내용

#### 해결하려는 과제

[0023]

따라서, 본 발명의 목적은, 유기 전자 디바이스, 특히 유기 전계 발광 디바이스, 그리고 특히 형광 또는 인광 OLED 에서 사용하기에 적합하고, 특히 향상된 효율, 향상된 작동 전압 및/또는 향상된 수명과 관련하여, 양호한 디바이스 특성에 이르는 재료를 제공하고, 그리고 대응하는 전자 디바이스를 제공하는 것이다.

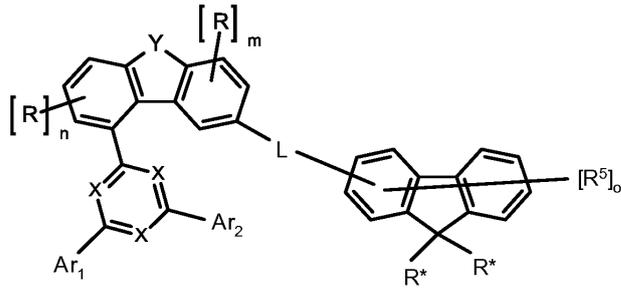
#### 과제의 해결 수단

[0024]

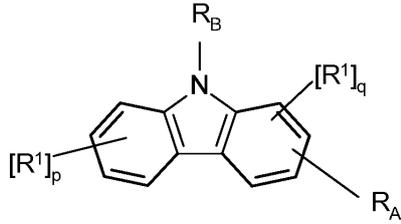
이제, 식 (1) 의 화합물, 예를 들어 더욱 바람직하게는 트리아진-디벤조푸란-플루오렌 유도체 또는 트리아진-벤조티오펜-플루오렌 유도체를 함유하고 식 (2) 의 정공 수송 호스트를 포함하는 조성물에 의해, 이러한 목적이 달성되고, 종래 기술의 단점이 없어진다는 것을 알아냈다. 그러한 조성물은 특히, 효율, 작동 전압 및/또는 수명 관련하여 그리고 특히 또한 2 중량% 내지 15 중량 %의 농도로 방출 층에서 발광 성분의 존재 하에서, 유기 전자 디바이스, 특히 유기 전계 발광 디바이스의 매우 양호한 특성으로 이어진다.

[0025]

따라서 본 발명은 먼저 하기 식 (1) 의 적어도 하나의 화합물 및 하기 식 (2) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 조성물을 제공하며,



식 (1)



식 (2)

[0026]

[0027] 식 중 사용되는 기호 및 지수는 다음과 같다:

[0028] X 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, CR<sup>0</sup> 또는 N 이고, 단, 적어도 2 개의 X 기는 N 이고;

[0029] Y 는 O 및 S 로부터 선택되고;

[0030] L 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고 단일 결합, 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 가지며 하나 이상의 R<sup>5</sup> 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 고리 시스템이다;

[0031] L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub> 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 단일 결합, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R<sup>3</sup> 라디칼에 의해 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고;

[0032] L<sub>3</sub> 은 단일 결합, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R<sup>3</sup> 라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 여기서 카르바졸 상의 하나의 치환기 R<sup>1</sup> 은 치환기 R<sup>3</sup> 와 고리를 형성할 수도 있다.

[0033] Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub> 는 각각의 경우 각각 독립적으로, 하나 이상의 R<sup>3</sup> 라디칼에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴기이고;

[0034] R<sub>A</sub>은 H, -L<sub>3</sub>-Ar<sub>4</sub>, -L<sub>1</sub>-N(Ar)<sub>2</sub> 이고;

[0035] R<sub>B</sub>는 Ar<sub>3</sub> 또는 -L<sub>2</sub>-N(Ar)<sub>2</sub> 이고;

[0036] Ar<sub>3</sub>은 하나 이상의 R<sup>3</sup> 라디칼에 의해 치환될 수도 있는, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 또는 10 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템이고;

[0037] Ar<sub>4</sub>는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 하나 이상의 R<sup>4</sup> 라디칼로 치환될 수도 있는 비치환 또는 치환된 9-아릴 카르바졸릴 또는 비치환 또는 치환된 카르바졸-9-일이고, 여기서 하나 이상의 경우 2 개의 R<sup>4</sup> 라디칼의 각각 또는 하나의 R<sup>4</sup> 라디칼과 함께 하나의 R<sup>1</sup> 라디칼은 독립적으로 단환 또는 다환, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리를 형성할 수도 있으며, 여기서 아릴은 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 R<sup>3</sup> 로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고;

[0038]  $R^*$  는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 6 내지 12 개의 탄소 원자를 갖는 아릴 기이며, 여기서 2 개의 치환기  $R^*$  는, 하나 이상의 치환기  $R^5$  로 치환될 수도 있는 단환 또는 다환, 지방족, 방향족, 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 함께 형성할 수도 있고;

[0039]  $R^0$ ,  $R$ ,  $R^1$  은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, CN,  $NO_2$ ,  $N(Ar)_2$ ,  $N(R^2)_2$ ,  $C(=O)Ar$ ,  $C(=O)R^2$ ,  $P(=O)(Ar)_2$ ,  $P(Ar)_2$ ,  $B(Ar)_2$ ,  $Si(Ar)_3$ ,  $Si(R^2)_3$ , 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 (이들 각각은 하나 이상의  $R^2$  라디칼에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는  $R^2C=CR^2$ ,  $Si(R^2)_2$ , C=O, C=S, C=NR<sup>2</sup>,  $P(=O)(R^2)$ , SO,  $SO_2$ ,  $NR^2$ , O, S 또는  $CONR^2$  에 의해 대체될 수도 있고, 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는  $NO_2$  에 의해 대체될 수도 있음), 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각각의 경우 하나 이상의  $R^2$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^2$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^2$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬 기로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 동일한 탄소 원자 또는 인접한 탄소 원자에 결합된 2 개의 치환기  $R^0$  및/또는 R 및/또는  $R^1$  이 하나 이상의  $R^2$  라디칼에 의해 치환될 수 있는 단환 또는 다환의 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성하는 것이 선택적으로 가능하고;

[0040]  $R^2$  는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 H, D, F, Cl, Br, I, CN,  $NO_2$ ,  $N(Ar)_2$ ,  $NH_2$ ,  $N(R^3)_2$ ,  $C(=O)Ar$ ,  $C(=O)H$ ,  $C(=O)R^3$ ,  $P(=O)(Ar)_2$ , 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 2 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (이들 각각은 하나 이상의  $R^3$  라디칼로 치환될 수도 있고, 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는  $HC=CH$ ,  $R^3C=CR^3$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^3)_2$ ,  $Ge(R^3)_2$ ,  $Sn(R^3)_2$ , C=O, C=S, C=Se, C=NR<sup>3</sup>,  $P(=O)(R^3)$ , SO,  $SO_2$ , NH,  $NR^3$ , O, S, CONH 또는  $CONR^3$  으로 대체될 수도 있고 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는  $NO_2$  로 대체될 수도 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각각의 경우 하나 이상의  $R^3$  라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^3$  라디칼로 치환될 수도 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기, 또는 이들 시스템의 조합으로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 여기서 둘 이상의 인접 치환기  $R^2$  가 하나 이상의  $R^3$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 단환 또는 다환의, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성하는 것이 선택적으로 가능하고;

[0041]  $R^3$  은 각각의 경우에 동일하거나 상이하고, H, D, F, CN,  $N(Ar)_2$ , 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드로카르빌 라디칼, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (여기서 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I 또는 CN 으로 대체될 수 있고, 각각 1 내지 4 개의 탄소 원자를 갖는 하나 이상의 알킬기에 의해 치환될 수도 있음) 으로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 둘 이상의 인접한  $R^3$  치환기는 함께 단환 또는 다환의 지방족 고리 시스템을 형성하는 것이 가능하고;

[0042]  $R^4$  는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드로카르빌 라디칼, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (여기서 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, 1 내지 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지형 알킬기 또는 CN 에 의해 대체될 수도 있음) 으로 이루어지는 군에서 선택되고; 동시에, 둘 이상의 인접한  $R^4$  치환기는 함께 단환 또는 다환 고리 시스템을 형성할 수도 있고;

[0043]  $R^5$  는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 D, F, CN 및 6 내지 18 개의 탄소 원자를 갖는 아릴기로 이루어지는 군에서 선택되며; 동시에, 둘 이상의 인접한 치환기  $R^5$  는 함께 단환 또는 다환 지방족 고리 시스템을 형성할 수도 있고;

[0044] Ar 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 비방향족  $R^3$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고; 동시에, 동일한 질소 원자, 인 원자, 또는 붕소 원자에 결합된 2 개의 Ar 라디칼은 또한  $N(R^3)$ ,  $C(R^3)_2$ , O 및 S 로부터 선택되는 브릿지 또는 단일 결합에 의해 서로 브릿지될 수도 있고,

[0045] n 및 m 은 각각의 경우 독립적으로 0, 1, 2 또는 3 이고,

[0046] o 는 각각의 경우 독립적으로 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6 또는 7 이고;

[0047] q 는 각각의 경우 독립적으로 0, 1, 2 또는 3 이고;

[0048] p 는 각각의 경우 독립적으로 0, 1, 2, 3 또는 4이다.

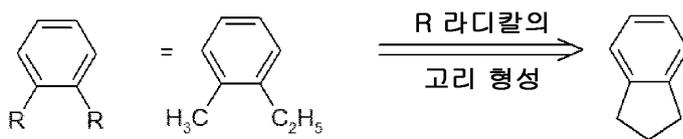
[0049] 본 발명은 또한 이러한 종류의 조성물을 포함하는 포몰레이션 (formulation), 유기 전자 디바이스에서의 이들 조성물의 용도, 이러한 종류의 조성물을 포함하고 바람직하게는 조성물을 하나의 층에 포함하는 유기 전자 디바이스, 바람직하게는 전계 발광 디바이스, 그리고 이러한 종류의 디바이스의 제조 방법에 관한 것이다. 마찬가지로 이하에 설명된 대응하는 바람직한 실시형태는 본 발명의 요지의 일부를 형성한다. 특히 식 (1) 의 화합물의 선택과 관련하여, 알려진 재료의 특정 선택을 통해 놀랍고 유리한 효과가 달성된다.

[0050] 위에 설명된 또는 바람직한 것으로 이하에 설명된, 식 (1) 의 적어도 하나의 화합물 및 식 (2) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 조성물을 포함하는 층은 특히 방출층 (EML), 전자 수송층 (ETL), 전자 주입층 (EIL) 및/또는 정공 차단층 (HBL) 이다.

[0051] 층이 방출 층인 경우, 그것은 위에 설명된 식 (1) 및 식 (2) 의 매트릭스 재료를 포함하는 조성물에 추가하여, 인광 방출체를 포함하는 것을 특징으로 하는 인광층인 것이 바람직하다.

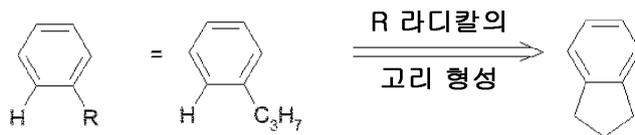
[0052] 본 발명의 맥락에서 인접한 탄소 원자는 서로 직접 결합된 탄소 원자이다.

[0053] 2 개 이상의 라디칼이 함께 고리를 형성할 수도 있다는 문구는, 본 상세한 설명의 맥락에서, 특히, 2 개의 라디칼이 2 개의 수소 원자의 형식적 제거 (formal elimination) 와 함께 화학 결합에 의해 서로 연결됨을 의미하는 것으로 이해되어야 한다. 이는 하기 스킴에 의해 예시된다:



[0054]

[0055] 그러나, 추가적으로, 위에 언급된 문구는 또한 2 개의 라디칼 중 하나가 수소인 경우에는 제 2 라디칼이 수소 원자가 결합된 위치에 결합되어, 고리를 형성한다는 것을 의미하는 것으로 이해되어야 한다. 이는 하기 스킴에 의해 예시될 것이다:



[0056]

[0057] 본 발명의 맥락상 아릴기는 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자, 바람직하게는 탄소 원자를 함유한다. 본 발명의 맥락상 헤테로아릴기는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 함유하고, 여기서 고리 원자는 탄소 원자 및 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하고, 다만, 탄소 원자 및 헤테로원자의 총합은 적어도 5 로 합계된다. 헤테로원자들은 바람직하게는 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 아릴기 또는 헤테로아릴기는 단순 방향족 환, 즉 벤젠으로부터 유도된 페닐, 또는, 예를 들어 피리딘, 피리미딘 또는 티오펜으로부터 유도된, 단순 헤테로방향족 환, 또는, 예를 들어 나프탈렌, 안트라센, 페난트렌, 퀴놀린 또는 이소퀴놀린으로부터 유도되는 융합된

(fused) 아릴 또는 헤테로아릴기를 의미하는 것으로 이해된다. 따라서 6 내지 18 개의 탄소 원자를 갖는 아릴 기는 바람직하게는 페닐, 나프틸, 페난트릴 또는 트리페닐레닐이며, 치환기로서 아릴 기의 부착에 제한은 없다. 6 내지 18 개의 탄소 원자를 갖는 아릴렌 기는 바람직하게는 페닐렌, 나프틸렌, 페난트릴렌 또는 트리페닐레닐렌이며, 가교제로서 아릴렌 기의 링크에 제한은 없다.

[0058] 본 발명의 맥락상 방향족 고리 시스템은 고리 시스템 내에 6 내지 40 개의 탄소 원자를 함유하고 하나 이상의 라디칼  $R^3$  라디칼에 의해 치환될 수 있으며, 여기서  $R^3$  은 후술되는 정의를 갖는다. 방향족 고리 시스템은 또한 위에 설명된 바와 같은 아릴 기를 함유한다.

[0059] 6 내지 18 개의 탄소 원자를 갖는 방향족 고리 시스템은 바람직하게는 페닐렌, 바이페닐렌, 나프틸렌, 페난트릴렌 및 트리페닐레닐렌으로부터 선택되며, 여기서 각각의 방향족 고리 시스템은 하나 이상의  $R^5$  라디칼로 치환될 수도 있다.

[0060] 본 발명의 맥락상 헤테로방향족 고리 시스템은 5 내지 40 개의 고리 원자 및 적어도 하나의 헤테로원자를 함유하고 하나 이상의  $R^3$  라디칼에 의해 치환될 수도 있으며, 여기서  $R^3$  은 후술되는 정의를 갖는다. 바람직한 헤테로방향족 고리 시스템은 10 내지 40 개의 고리 원자 및 적어도 하나의 헤테로원자를 갖고 하나 이상의 라디칼  $R^3$  에 의해 치환될 수 있으며, 여기서  $R^3$  은 후술되는 정의를 갖는다. 헤테로방향족 고리 시스템은 또한 위에 설명된 바와 같은 헤테로아릴 기를 함유한다. 헤테로방향족 고리 시스템에서 헤테로원자들은 바람직하게는 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 본 발명의 맥락상 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은, 반드시 아릴 또는 헤테로아릴기만을 함유하는 것은 아니며, 또한 복수의 아릴 또는 헤테로아릴기가 비방향족 단위 (바람직하게는, H 이외의 10% 미만의 원자), 예를 들어 탄소, 질소 또는 산소 원자 또는 카르보닐기에 의해 인터럽트 (interrupt) 되는 것이 가능한 시스템을 의미하는 것으로 이해되어야 한다. 예를 들어 9,9'-스피로비플루오렌, 9,9'-디아릴플루오렌, 트리아릴아민, 디아릴 에테르, 스티벤 등과 같은 시스템은 또한 본 발명의 맥락에서 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로서, 그리고 마찬가지로 2 개 이상의 아릴기가, 예를 들어 선형 또는 환형 알킬기 또는 실릴기에 의해 인터럽트되는 시스템으로 간주될 것이다. 또한, 2 개 이상의 아릴 또는 헤테로아릴기가 서로 직접 결합되는 시스템, 예를 들어, 바이페닐, 테르페닐 또는 쿼터페닐 또는 비피리딘도 마찬가지로 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템의 정의에 의해 포함된다.

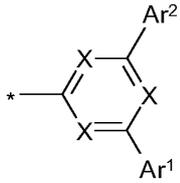
[0061] 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 또한 각 경우에 위에 언급된  $R^3$  라디칼로 치환될 수 있으며 임의의 원하는 위치를 통해 방향족 또는 헤테로방향족 시스템에 연결될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은, 예를 들어 벤젠, 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센, 페난트렌, 벤조페난트렌, 피렌, 크리센, 페릴렌, 플루오란텐, 벤조플루오란텐, 나프타센, 펜타센, 벤조피렌, 바이페닐, 바이페닐렌, 테르페닐, 테르페닐렌, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 디하이드로페난트렌, 디하이드로피렌, 테트라하이드로피렌, 시스- 또는 트랜스-인덴노플루오렌, 시스- 또는 트랜스-모노벤조인덴노플루오렌, 시스- 또는 트랜스-디벤조인덴노플루오렌, 트록센, 이소트록센, 스피로트록센, 스피로이소트록센, 푸란, 벤조푸란, 이소벤조푸란, 디벤조푸란, 티오펜, 벤조티오펜, 이소벤조티오펜, 디벤조티오펜, 피롤, 인돌, 이소인돌, 카르바졸, 인돌로카르바졸, 인데노카르바졸, 피리딘, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 아크리딘, 페난트리딘, 벤조-5,6-퀴놀린, 벤조-6,7-퀴놀린, 벤조-7,8-퀴놀린, 페노티아진, 페녹사진, 피라졸, 인다졸, 이미다졸, 벤즈이미다졸, 나프티미다졸, 페난트리미다졸, 피리디미다졸, 피라진이미다졸, 퀴놀살린이미다졸, 옥사졸, 벤족사졸, 나프톡사졸, 안트톡사졸, 페난트록사졸, 이속사졸, 1,2-티아졸, 1,3-티아졸, 벤조티아졸, 피리다진, 벤조피리다진, 피리미딘, 벤조피리미딘, 퀴놀살린, 1,5-디아자안트라센, 2,7-디아자피렌, 2,3-디아자피렌, 1,6-디아자피렌, 1,8-디아자피렌, 4,5-디아자피렌, 4,5,9,10-테트라아자페릴렌, 피라진, 페나진, 페녹사진, 페노티아진, 플루오루빈, 나프티리딘, 아자카르바졸, 벤조카르보린, 페난트롤린, 1,2,3-트리아졸, 1,2,4-트리아졸, 벤조트리아졸, 1,2,3-옥사디아졸, 1,2,4-옥사디아졸, 1,2,5-옥사디아졸, 1,3,4-옥사디아졸, 1,2,3-티아디아졸, 1,2,4-티아디아졸, 1,2,5-티아디아졸, 1,3,4-티아디아졸, 1,3,5-트리아진, 1,2,4-트리아진, 1,2,3-트리아진, 테트라졸, 1,2,4,5-테트라진, 1,2,3,4-테트라진, 1,2,3,5-테트라진, 퓨린, 프테리딘, 인돌리진 및 벤조티아디아졸에서 유래된 기를 의미하는 것으로 이해된다.

[0062] 약어 Ar 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 비방향족  $R^3$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고; 동시에, 동일한 질소 원자, 인 원자, 또는 붕소 원자에 결합된 2 개의 Ar 라디칼은 또한  $N(R^3)$ ,  $C(R^3)_2$ , O 및 S 로부터 선택되는 브릿지 또는 단일 결합에 의해 서로 브릿지될 수도 있다. 치환기  $R^3$  은 위에 설명되었거나 또는 이하에 바람직한 것으로

설명된다.

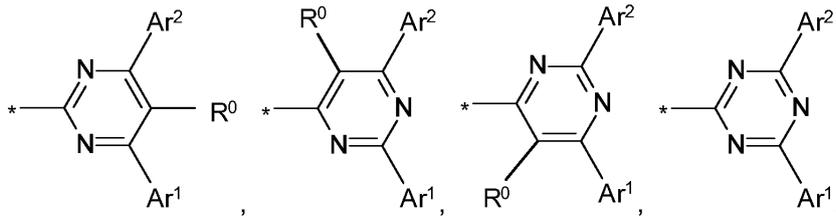
- [0063] 본 발명의 맥락상 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기는 단환, 이환 또는 다환 기를 의미하는 것으로 이해된다.
- [0064] 본 발명의 맥락상, 개별적인 수소 원자 또는 CH<sub>2</sub> 기가 또한 위에 언급된 기에 의해 치환될 수도 있는 C<sub>1</sub>- 내지 C<sub>20</sub>-알킬기는 예를 들어, 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, 시클로프로필, n-부틸, i-부틸, s-부틸, t-부틸, 시클로부틸, 2-메틸부틸, n-펜틸, s-펜틸, t-펜틸, 2-펜틸, 네오펜틸, 시클로펜틸, n-헥실, s-헥실, t-헥실, 2-헥실, 3-헥실, 네오헥실, 시클로헥실, 1-메틸시클로펜틸, 2-메틸펜틸, n-헵틸, 2-헵틸, 3-헵틸, 4-헵틸, 시클로헵틸, 1-메틸시클로헥실, n-옥틸, 2-에틸헥실, 시클로옥틸, 1-비시클로[2.2.2]옥틸, 2-비시클로[2.2.2]옥틸, 2-(2,6-디메틸)옥틸, 3-(3,7-디메틸)옥틸, 아다만틸, 트리플루오로메틸, 펜타플루오로에틸, 2,2,2-트리플루오로에틸, 1,1-디메틸-n-헥스-1-일, 1,1-디메틸-n-헵트-1-일, 1,1-디메틸-n-옥트-1-일, 1,1-디메틸-n-데크-1-일, 1,1-디메틸-n-도데크-1-일, 1,1-디메틸-n-테트라데크-1-일, 1,1-디메틸-n-헥사데크-1-일, 1,1-디메틸-n-옥타데크-1-일, 1,1-디에틸-n-헥스-1-일, 1,1-디에틸-n-헵트-1-일, 1,1-디에틸-n-옥트-1-일, 1,1-디에틸-n-데크-1-일, 1,1-디에틸-n-도데크-1-일, 1,1-디에틸-n-테트라데크-1-일, 1,1-디에틸-n-헥사데크-1-일, 1,1-디에틸-n-옥타데크-1-일, 1-(n-프로필)시클로헥스-1-일, 1-(n-부틸)시클로헥스-1-일, 1-(n-헥실)시클로헥스-1-일, 1-(n-옥틸)시클로헥스-1-일 및 1-(n-데실)시클로헥스-1-일 라디칼을 의미하는 것으로 이해된다.
- [0065] 알케닐 기는 예를 들어, 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 펜테닐, 시클로펜테닐, 헥세닐, 시클로헥세닐, 헵테닐, 시클로헵테닐, 옥테닐, 시클로옥테닐 또는 시클로옥타디에닐을 의미하는 것으로 이해된다.
- [0066] 알킬닐 기는 예를 들어, 에틸닐, 프로피닐, 부티닐, 펜티닐, 헥시닐, 헵티닐 또는 옥티닐을 의미하는 것으로 이해된다.
- [0067] C<sub>1</sub>- 내지 C<sub>20</sub>-알콕시기는 예를 들어, 메톡시, 트리플루오로메톡시, 에톡시, n-프로폭시, i-프로폭시, n-부톡시, i-부톡시, s-부톡시, t-부톡시 또는 2-메틸부톡시를 의미하는 것으로 이해된다.
- [0068] C<sub>1</sub>- 내지 C<sub>20</sub>-티오알킬기는 예를 들어 S-알킬기, 예를 들어 티오메틸, 1-티오에틸, 1-티오-i-프로필, 1-티오-n-프로필, 1-티오-i-부틸, 1-티오-n-부틸 또는 1-티오-t-부틸을 의미하는 것으로 이해된다.
- [0069] 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기는 O-아릴 또는 O-헤테로아릴을 의미하고, 아릴 또는 헤테로아릴 기가 산소 원자를 통해 결합됨을 의미한다.
- [0070] 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬 기는 위에 설명된 바처럼 알킬 기가 아릴 기 또는 헤테로아릴 기로 치환됨을 의미한다.
- [0071] 인광 방출체는 본 발명의 맥락상 더 높은 스핀 다중도를 갖는 여기된 상태, 즉 1 초과 스핀 상태, 특히 여기된 삼중항 상태에서부터의 발광을 나타내는 화합물이다. 본 출원의 맥락상, 모든 발광성 착물과 전이 금속 또는 란타나이드는 인광 방출체로서 고려될 수 있다. 보다 정확한 정의는 아래에 더 제공된다.
- [0072] 위에 설명되거나 또는 이하에 바람직한 것으로 설명되는 식 (1) 의 적어도 하나의 화합물, 및 위에 설명되거나 또는 이하에 설명되는 식 (2) 의 적어도 하나의 화합물을 포함하는 조성물이 인광 방출체용 매트릭스 재료로서 사용되는 경우, 그의 삼중항 에너지는 인광 방출체의 삼중항 에너지보다 현저하게 작지 않은 것이 바람직하다. 삼중항 준위와 관련하여, T<sub>1</sub>(방출체) - T<sub>1</sub>(매트릭스) ≤ 0.2 eV 인 경우가 바람직하고, 보다 바람직하게는 ≤ 0.15 eV, 가장 바람직하게는 ≤ 0.1 eV 이다. T<sub>1</sub>(매트릭스) 은 여기서 방출 층에서의 매트릭스 재료의 삼중항 준위이며, 이 조건은 두 매트릭스 재료 각각에 적용 가능하고, 그리고 T<sub>1</sub>(방출체)는 인광 방출체의 삼중항 준위이다. 방출 층이 둘 초과 매트릭스 재료를 함유하는 경우, 위에 언급된 관계는 바람직하게는 모든 추가 매트릭스 재료에도 적용 가능하다.
- [0073] 본 발명의 바람직한 실시형태에서는, Y 가 O 및 S, 바람직하게는 O 로부터 선택되는 식 (1) 의 화합물이 선택된다.
- [0074] 식 (1) 의 화합물에서, 기호 X 는 두 경우에 N 그리고 한 경우에 CR<sup>0</sup> 이거나 또는 세 경우에 N 이다.

[0075] 치환기



[0076]

[0077] 는 따라서 다음의 정의를 갖고, 여기서 \* 는 디벤조퓨란 또는 디벤조티오펜에 대한 결합 부위를 나타내고, R<sup>0</sup>, Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup> 는 위에 주어진 정의 또는 바람직한 것으로 주어진 정의를 갖는다:

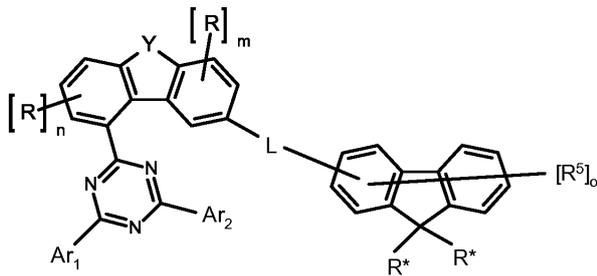


[0078]

[0079] R<sup>0</sup> 는 각각의 경우 동일하거나 또는 상이하고 H, D, F 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어진 군으로부터 바람직하게 선택된다. R<sup>0</sup> 은 각각의 경우 더 바람직하게는 H 이다.

[0080]

X 가 각각의 경우 N 인 식 (1) 의 화합물은 하기 식 (1a) 로 표현되고,



식 (1a)

[0081]

[0082] 식중 Y, L, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>, R, R<sup>5</sup>, R<sup>\*</sup>, n, m 및 o 는 위에 주어진 정의 또는 이하에 주어진 정의를 갖는다.

[0083]

보다 바람직하게는, 위에 설명되었거나, 바람직한 것으로 설명되었거나 또는 이하에서 바람직한 것으로 설명되는 치환기를 갖는 식 (1a) 의 적어도 하나의 화합물이 조성물을 위해 선택된다.

[0084]

따라서, 본 발명은 또한 위에 설명된 조성물을 제공하고, 여기서 바람직하게는 기호 Y 가 0 일 때 식 (1) 의 화합물은 식 (1a) 에 해당한다.

[0085]

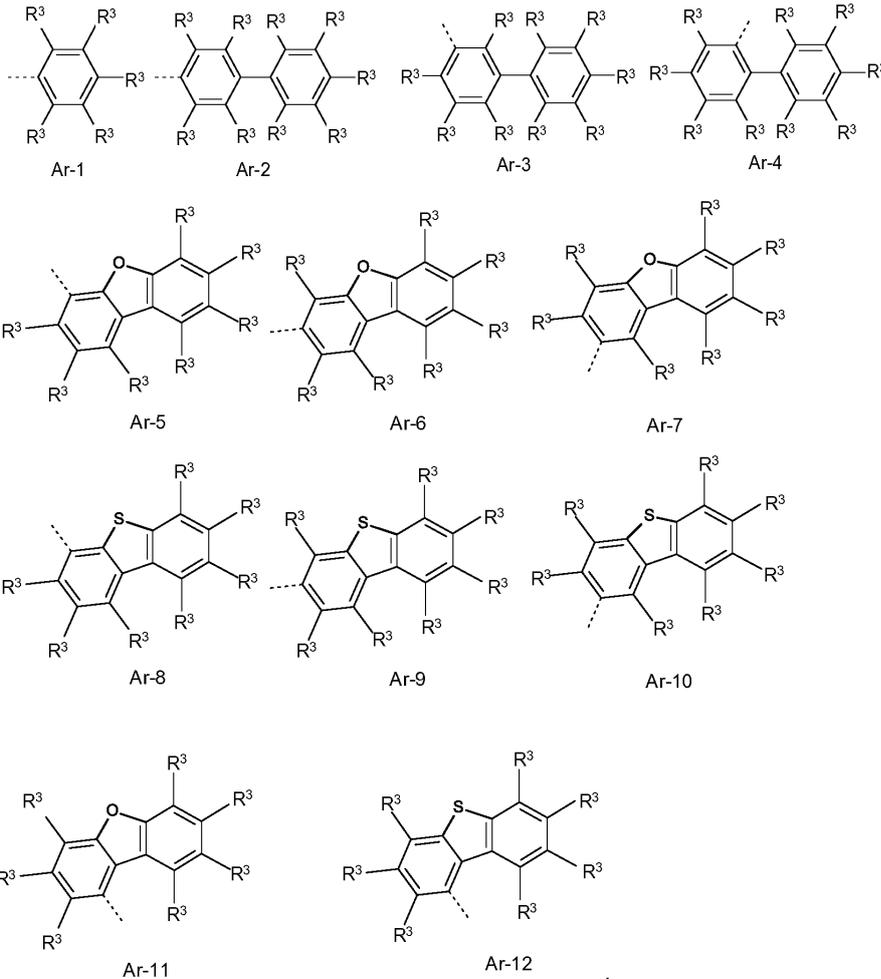
식 (1) 또는 (1a) 의 화합물, 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (1) 또는 (1a) 의 화합물에서, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub> 는 각각 독립적으로 바람직하게는, 위에 설명되었거나 또는 바람직한 것으로 설명된 6 내지 40 개의 탄소 원자를 갖고 하나 이상의 R<sup>3</sup> 라디칼에 의해 치환될 수도 있는 아릴 기이거나 또는 하나 이상의 R<sup>3</sup> 라디칼에 의해 치환될 수도 있는 디벤조푸라닐 또는 디벤조티오펜닐 기이다.

[0086]

아릴 기 또는 디벤조푸라닐 기 또는 디벤조티오펜닐 기의 결합은 여기서 제한되지 않는다.

[0087]

Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub> 는 따라서 바람직하게는 하기 Ar-1 내지 Ar-12 기로부터 선택될 수도 있으며, 여기서 R<sup>3</sup> 은 위에 명시되거나 또는 바람직한 것으로 명시된 정의를 갖는다:



[0088]

[0089]

[0090]

보다 바람직하게는, 적어도 하나의 Ar<sub>1</sub> 또는 Ar<sub>2</sub> 은 페닐이고, 다른 방향족 치환기는 6 내지 40 개의 탄소 원자를 갖고 하나 이상의 R<sup>3</sup> 라디칼로 치환될 수도 있는 아릴기이거나 또는 디벤조푸라닐 또는 디벤조티오페닐 기이며, 바람직하게는 Ar-1 내지 Ar-12 로부터 선택된다. 보다 바람직하게는, 적어도 하나의 Ar<sub>1</sub> 또는 Ar<sub>2</sub> 는 페닐이고, 다른 방향족 치환기는 하나 이상의 R<sup>3</sup> 라디칼에 의해 치환될 수도 있는 페닐 기 또는 디벤조푸라닐이다. 가장 바람직하게는, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub> 기 양자 모두는 동일하다. 가장 바람직하게는, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub> 기 양자 모두는 페닐이거나 또는 Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub> 기 양자 모두는 디벤조푸라닐이다.

[0091]

식 (1) 또는 (1a) 의 화합물 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (1) 또는 (1a) 의 화합물에서, 위에 설명되거나 또는 바람직한 것으로 설명되는 바와 같이, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub> 는 하나 이상의 R<sup>3</sup> 라디칼에 의해 치환된 아릴 또는 헤테로아릴기이고, 치환기 R<sup>3</sup> 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, D, F, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어진 군으로부터 바람직하게 선택된다. 이 R<sup>3</sup> 의 경우 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템은 바람직하게는 디벤조푸란 또는 디벤조티오페닐로부터 유도된다. 이 R<sup>3</sup> 의 경우 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템은 바람직하게는 페닐, 바이페닐 또는 테르페닐이고, 더욱 바람직하게는 페닐 또는 [1,1',2',1'']-테르페닐-5'-일이다. 바람직하게는, Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub> 에서의 아릴기 또는 헤테로아릴기는 각 경우에 독립적으로 R<sup>3</sup> 에 의해 한번 치환된다. 보다 바람직하게는, Ar<sub>1</sub> 또는 Ar<sub>2</sub> 에서의 아릴기 또는 헤테로아릴기는 R<sup>3</sup> 에 의해 한번 치환된다.

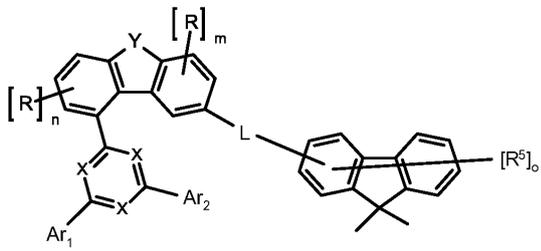
[0092]

디벤조푸라닐 또는 디벤조티오페닐 상의 치환기 R<sup>3</sup> 는 바람직하게는 H 이다. 6 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 아릴 기 상의 치환기 R<sup>3</sup> 는, 발생하는 경우, 바람직하게는 페닐 또는 H 이다. 가장 바람직하게는, Ar<sub>1</sub>

및 Ar<sub>2</sub> 에서의 아릴기 또는 헤테로아릴기는 비치환된다.

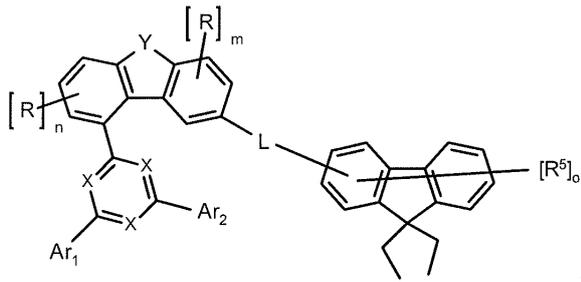
[0093] 식 (1) 또는 (1a) 의 화합물, 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (1) 또는 (1a) 의 화합물에서, 치환기 R\* 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 6 내지 12 개의 탄소 원자를 갖는 아릴 기이며, 여기서 2 개의 치환기 R\* 는, 하나 이상의 치환기 R<sup>5</sup> 로 치환될 수도 있는 단환 또는 다환, 지방족, 방향족, 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 함께 형성할 수도 있다. R\* 는 바람직하게는 각각의 경우 동일하거나, 또는 2 개의 치환기 R\* 는 함께 단환 또는 다환, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성한다. 보다 바람직하게는, R\* 는 메틸, 에틸 및 페닐로부터 선택된다. 보다 바람직하게는, 2 개의 치환기 R\* 는 이들이 결합되는 탄소 원자와 함께, 하나 이상의 치환기 R<sup>5</sup> 로 치환될 수도 있는 시클로헥센 및 디벤조시클로헥센으로부터 선택된 고리 시스템을 형성한다. 2 개의 치환기 R\* 에 의해 형성된 고리 시스템은 보다 바람직하게는 스피로바이플루오렌이다.

[0094] 위에 설명된 바와 같이 치환기 R\* 이 바람직한 정의를 갖는 식 (1) 의 화합물은 식 (1b), (1c), (1d), (1e) 및 (1f) 로 표현되고

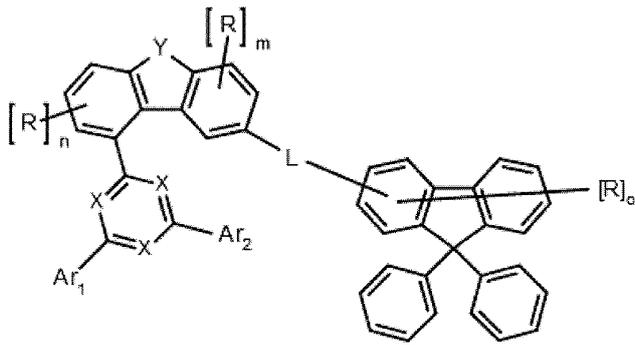


식 (1b)

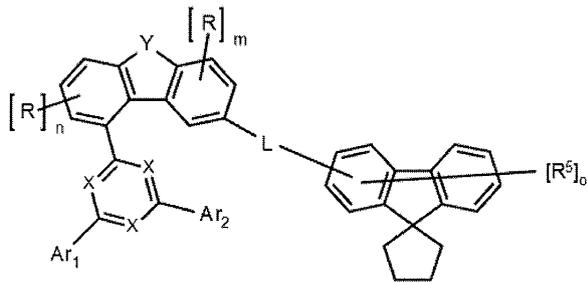
[0095]



식 (1c)

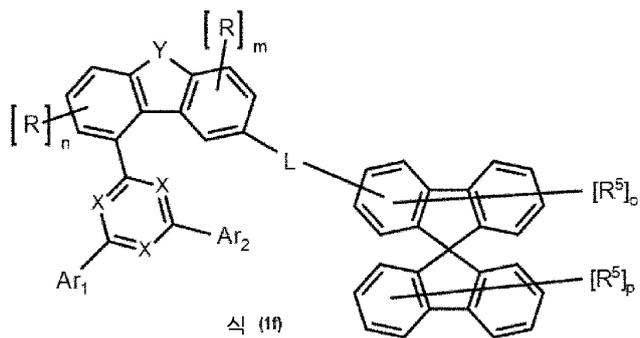


식 (1d)



식 (1e)

또는



식 (1f)

[0096]

[0097]

[0098]

식중 X, Y, L, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>, R, R<sup>5</sup>, n, m 및 o 는 위에 주어진 정의 또는 바람직한 것으로 주어진 정의 또는 이하에 주어진 정의를 가지며 p 는 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 또는 8 이다.

[0099]

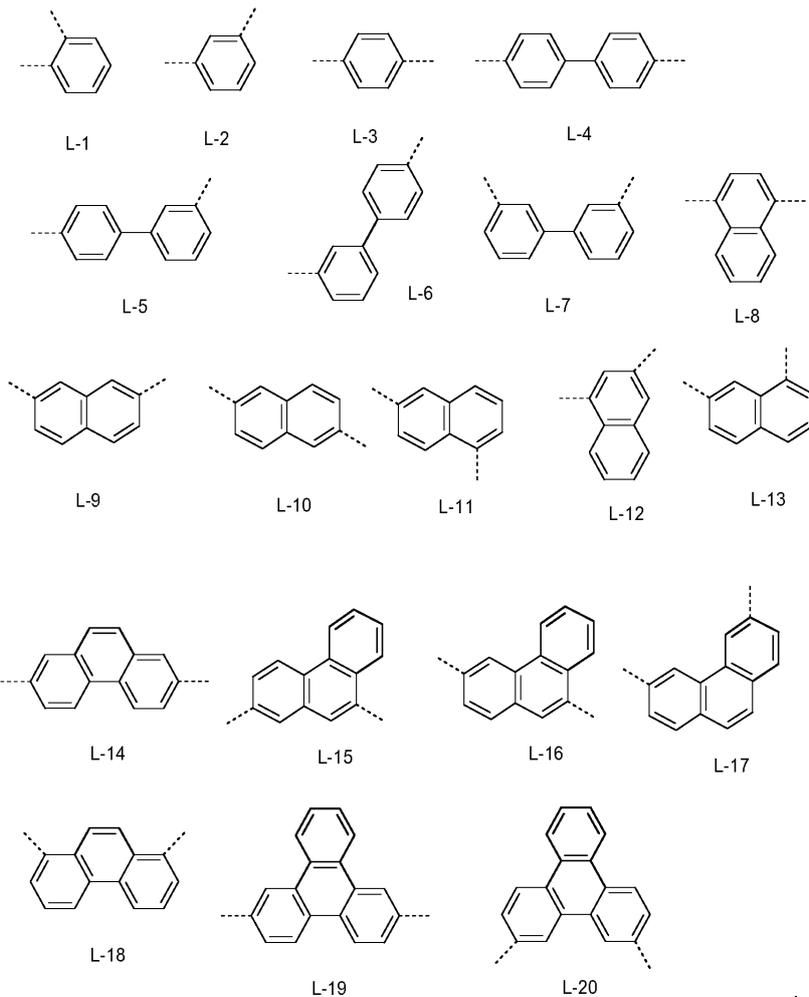
식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e) 및 (1f) 의 화합물에서, 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e) 및 (1f) 의 화합물에서, n 은 바람직하게 0 또는 1이고 여기서 R 은 위에 주어진 정의 또는 이하에 주어진 정의를 갖는다. 더욱 바람직하게는, n 은 0 이다.

[0100]

식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e) 및 (1f) 의 화합물에서, 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e) 및 (1f) 의 화합물에서, m 은 바람직하게 0 또는 1이고 여기서 R 은 위에 주어진 정의

또는 이하에 주어진 정의를 갖는다. 더욱 바람직하게는,  $m$  은 0 이다.

- [0101] 식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e) 및 (1f) 의 화합물에서, 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e) 및 (1f) 의 화합물에서,  $n$  및  $m$  의 총합, 줄여서  $(n+m)$  은 바람직하게는 0, 1 또는 2 이고, 여기서  $R$  은 위에 주어진 정의를 갖거나 또는 이하에 주어진 정의를 갖는다. 보다 바람직하게는,  $(n+m)$  는 0 또는 1 이다. 가장 바람직하게는,  $(n+m)$  는 0 이다.
- [0102] 식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e) 및 (1f) 의 화합물에서, 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e) 및 (1f) 의 화합물에서,  $o$  는 바람직하게 0, 1 또는 2 이고 여기서  $R^5$  는 위에 주어진 정의 또는 이하에 주어진 정의를 갖는다. 더욱 바람직하게는,  $o$  는 0 이다.
- [0103] 식 (1f) 의 화합물, 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (1f) 의 화합물에서,  $p$  는 바람직하게 0, 1 또는 2 이고 여기서  $R^5$  는 위에 주어진 정의 또는 이하에 주어진 정의를 갖는다. 더욱 바람직하게는,  $p$  는 0 이다.
- [0104] 식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e) 및 (1f) 의 화합물에서 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e) 및 (1f) 의 화합물에서,  $n$  또는  $m$  는 1 보다 크고, 치환기  $R$  은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, D, F, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알킬기 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어진 군으로부터 바람직하게 선택된다. 이  $R$  의 경우 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템은 바람직하게는 디벤조푸란 또는 디벤조티오펜으로부터 유도된다. 이  $R$  의 경우 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템은 바람직하게는 페닐, 바이페닐 또는 테르페닐이고, 더욱 바람직하게는 페닐 또는 [1,1',2',1'']-테르페닐-5'-일이다. 이  $R$  의 경우 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알킬기는 바람직하게는 1 내지 4 개의 탄소 원자를 갖는 선형 또는 분지형 알킬기, 보다 바람직하게는 메틸, 에틸,  $n$ -프로필 또는  $n$ -부틸, 가장 바람직하게는 메틸이다.
- [0105] 식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e) 및 (1f) 의 화합물에서 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e) 및 (1f) 의 화합물에서,  $o$  또는  $p$  는 1 보다 크고, 치환기  $R^5$  는 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 바람직하게는 D 및 페닐로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0106] 식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e) 및 (1f) 의 화합물에서 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e) 및 (1f) 의 화합물에서,  $L$  은 각각의 경우 동일하거나 상이하고 단일 결합 또는 6 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^5$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 방향족 고리 시스템이고, 여기서  $R^5$  는 위에 설명된 바처럼 정의된다.  $R^5$  은 여기서 바람직하게는 D 및 페닐로 이루어진 군으로부터 선택된다.  $L$  은 바람직하게는 단일 결합 또는 6 내지 18 개의 탄소 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 바람직하게는 페닐렌, 디페닐렌, 나프틸렌, 페난트레닐렌 또는 트리페닐레닐렌이고, 여기서 추가 치환기에 대한 부착은 제한되지 않는다. 여기서 페닐렌은 예를 들어, 오르토, 메타 또는 파라 위치에서 디벤조푸란/디벤조티오펜 단위 및 플루오레닐 단위에 결합될 수도 있다.
- [0107] 따라서  $L$  은 바람직하게는, 위에 설명된 바와 같은  $R^5$  로 치환될 수도 있거나 비치환될 수도 있는 하기 링커 L-1 내지 L-20 으로부터 선택될 수도 있다:



[0108]

[0109]

[0110]

[0111]

[0112]

[0113]

[0114]

[0115]

바람직하게는, 링커 L-1 내지 L-20 은 비치환된다.

링커 L-1 내지 L-7 을 사용하는 것이 특히 바람직하다.

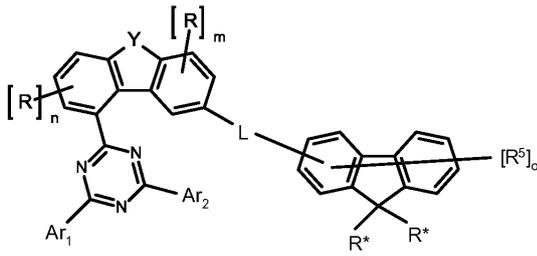
바람직하게는, L 은 메타 위치에서 페닐렌으로서 연결된다.

식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e) 및 (1f) 의 화합물에서 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e) 및 (1f) 의 화합물에서, L 은 임의의 위치에서 플루오레닐에 결합될 수도 있다. 위에 설명되거나 또는 바람직한 것으로 설명된 바와 같이, L은 보다 바람직하게는 플루오레닐 라디칼의 위치 2 및 4 에서, 가장 바람직하게는 플루오레닐 라디칼의 위치 2에서 연결된다.

위에 설명되거나 또는 바람직한 것으로 설명된 바와 같이, L 은 바람직하게는 바이스피로플루오레닐 라디칼의 위치 2, 2 또는 4 에서, 또는 가장 바람직하게는 바이스피로플루오레닐 라디칼의 위치 2에서 연결된다.

특히 바람직한 식 (1) 의 화합물은 위에 설명된 바와 같이 식 (1d) 및 (1f) 를 따른다.

[0116] 본 발명은 마찬가지로 또한 하기 식 (1a) 의 특정 화합물을 제공하고



식 (1a)

[0117]

식 중 사용되는 기호 및 지수는 다음과 같다:

[0118]

Y 는 0 및 S 로부터 선택되고;

[0119]

L 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 6 내지 18 개의 탄소 원자를 갖는 방향족 고리 시스템, 바람직하게는 페닐렌, 바이페닐렌, 나프틸렌, 페난트레닐렌 또는 트리페닐레닐렌이며, 이들은 하나 이상의 R<sup>5</sup> 라디칼에 의해 치환될 수도 있다;

[0120]

Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub> 는 각각의 경우 각각 독립적으로, 하나 이상의 R<sup>3</sup> 라디칼에 의해 치환될 수도 있는, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴기이고;

[0121]

R\* 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬기 또는 6 내지 12 개의 탄소 원자를 갖는 아릴 기이며, 여기서 2 개의 치환기 R\* 는, 하나 이상의 R<sup>5</sup> 라디칼로 치환될 수도 있는 단환 또는 다환, 지방족, 방향족, 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 함께 형성할 수도 있고;

[0122]

R 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고 D, F, CN 및 6 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 아릴기로 이루어지는 군으로부터 선택되고;

[0123]

R<sup>3</sup> 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하고, H, D, F, CN, N(Ar)<sub>2</sub>, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드로카르빌 라디칼, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (여기서 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I 또는 CN 으로 대체될 수도 있고, 각각 1 내지 4 개의 탄소 원자를 갖는 하나 이상의 알킬기에 의해 치환될 수도 있음) 으로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 둘 이상의 인접한 R<sup>3</sup> 치환기는 함께 단환 또는 다환의 지방족 고리 시스템을 형성하는 것이 가능하고;

[0124]

R<sup>5</sup> 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 D, F, CN 및 6 내지 18 개의 탄소 원자를 갖는 아릴기로 이루어지는 군에서 선택되며; 동시에, 둘 이상의 인접한 치환기 R<sup>5</sup> 는 함께 단환 또는 다환 지방족 고리 시스템을 형성할 수도 있고;

[0125]

n 및 m 은 각각의 경우 독립적으로 0, 1, 2 또는 3 이고,

[0126]

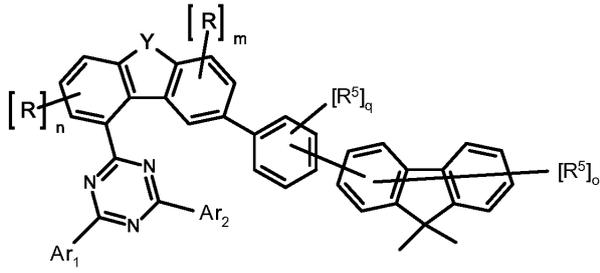
o 는 각각의 경우 독립적으로 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6 또는 7 이다.

[0127]

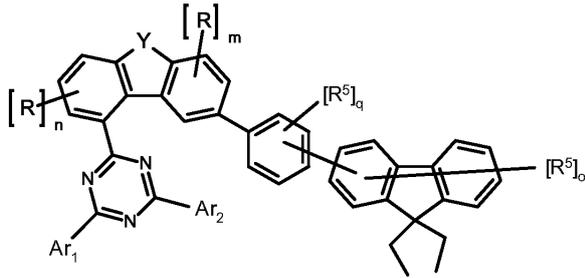
바람직한 것으로 명시된 Y, L, Ar<sup>1</sup>, Ar<sup>2</sup>, R, R<sup>3</sup>, R<sup>5</sup>, R\*, n, m 및 o 의 정의는 위에서 설명한 바와 같이 대응하여 적용 가능하다.

[0128]

[0129] 따라서, 본 발명은 마찬가지로 하기 식 (1g), (1h), (1i), (1j) 및 (1k) 의 바람직한 화합물을 제공한다:

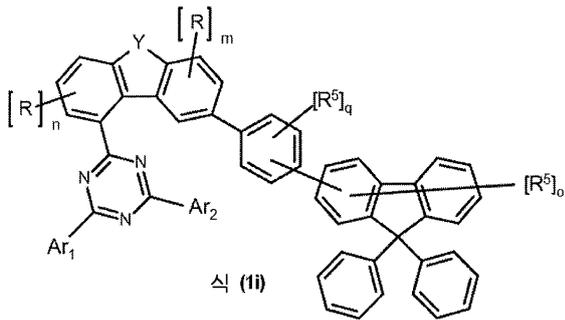


식 (1g)

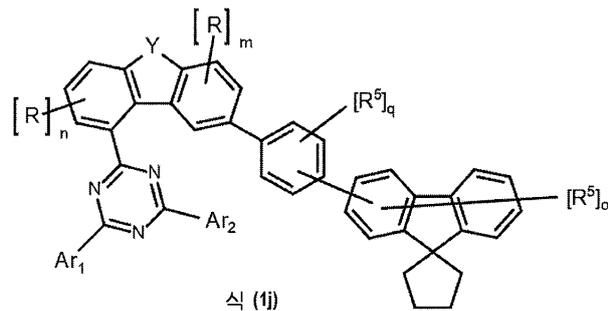


식 (1h)

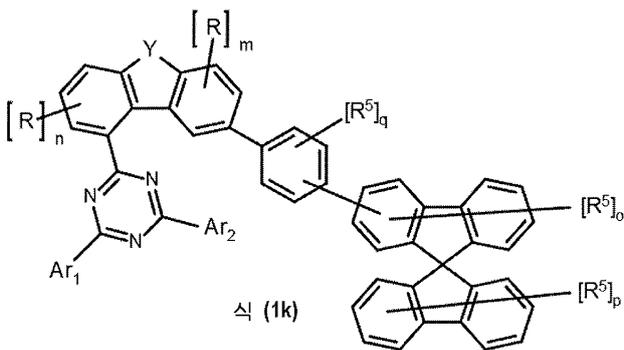
[0130]



식 (1i)



식 (1j)



식 (1k)

[0131]

[0132] 식중 Y, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>, R, R<sup>5</sup>, n, m, o 및 p 는 위에 주어진 정의 또는 바람직한 것으로 주어진 정의를 가지며 q 는 0, 1, 2, 3 또는 4 이다. q 가 0 보다 크면, R<sup>5</sup> 는 바람직하게는 D 또는 페닐이다.

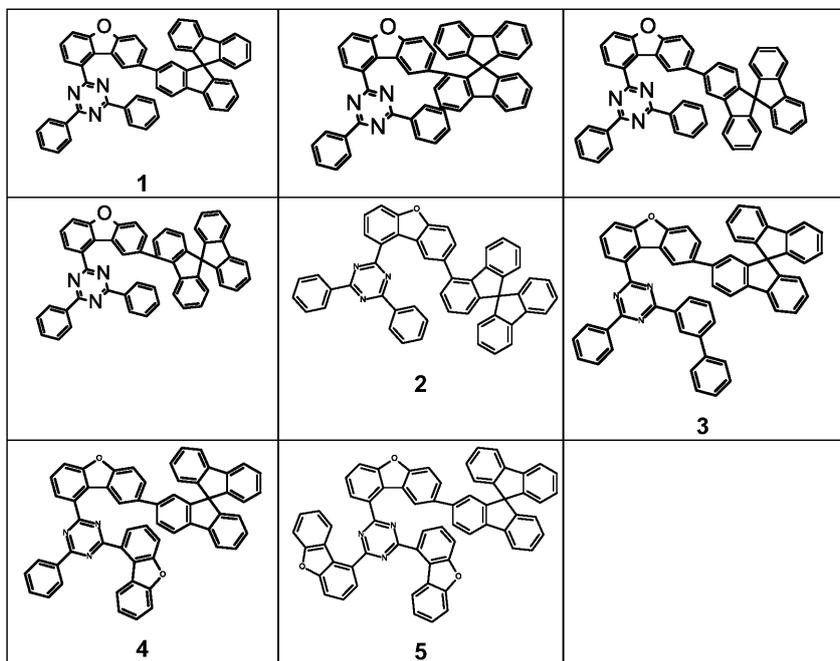
[0133] 식 (1), (1a), (1g), (1h), (1i), (1j) 및 (1k) 의 화합물에서, Y 는 바람직하게는 0 이고, Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup> 는 바람직하게는 위에 설명된 바와 같이 페닐, 디벤조푸라닐, 디벤조티오펜일 및 바이페닐이고, n, m, o, p 및 q 는 바람직하게는 0 이다.

[0134] 식 (1g), (1h), (1i), (1j) 및 (1k) 의 화합물이 바람직하게는 본 발명의 조성물을 위해 선택된다.

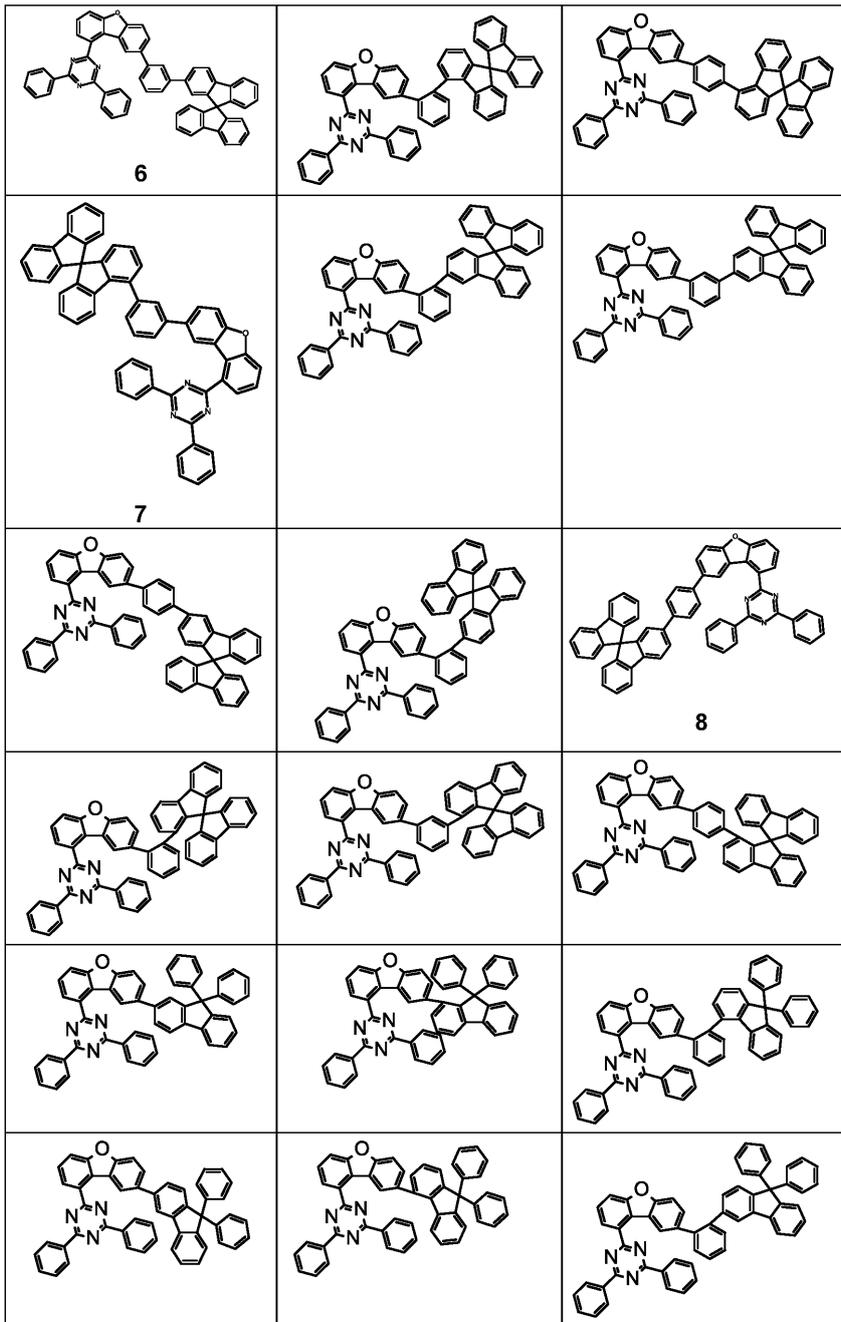
[0135] 식 (1k) 의 화합물은 바람직하게는 본 발명에 의해 제공되거나, 보다 바람직하게는 본 발명의 조성물을 위해 선택되며, 여기서 사용되는 기호는 명시된 정의 또는 바람직한 것으로 명시된 정의를 갖는다.

[0136] 본 발명에 따라 선택되는 식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e), (1f), (1g), (1h), (1i), (1j) 및 (1k) 의 적합한 화합물의 예는 아래 표 1 에 나타낸 구조이다.

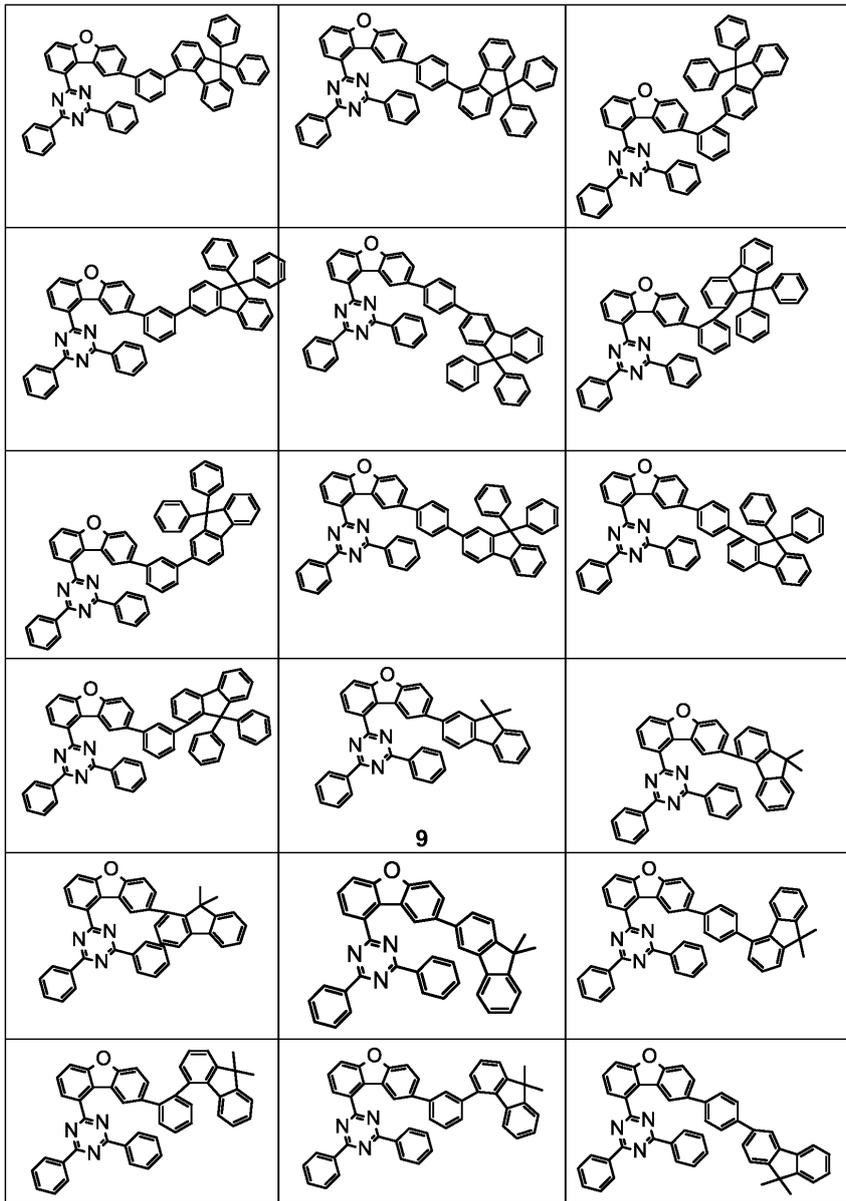
[0137] 표 1:



[0138]

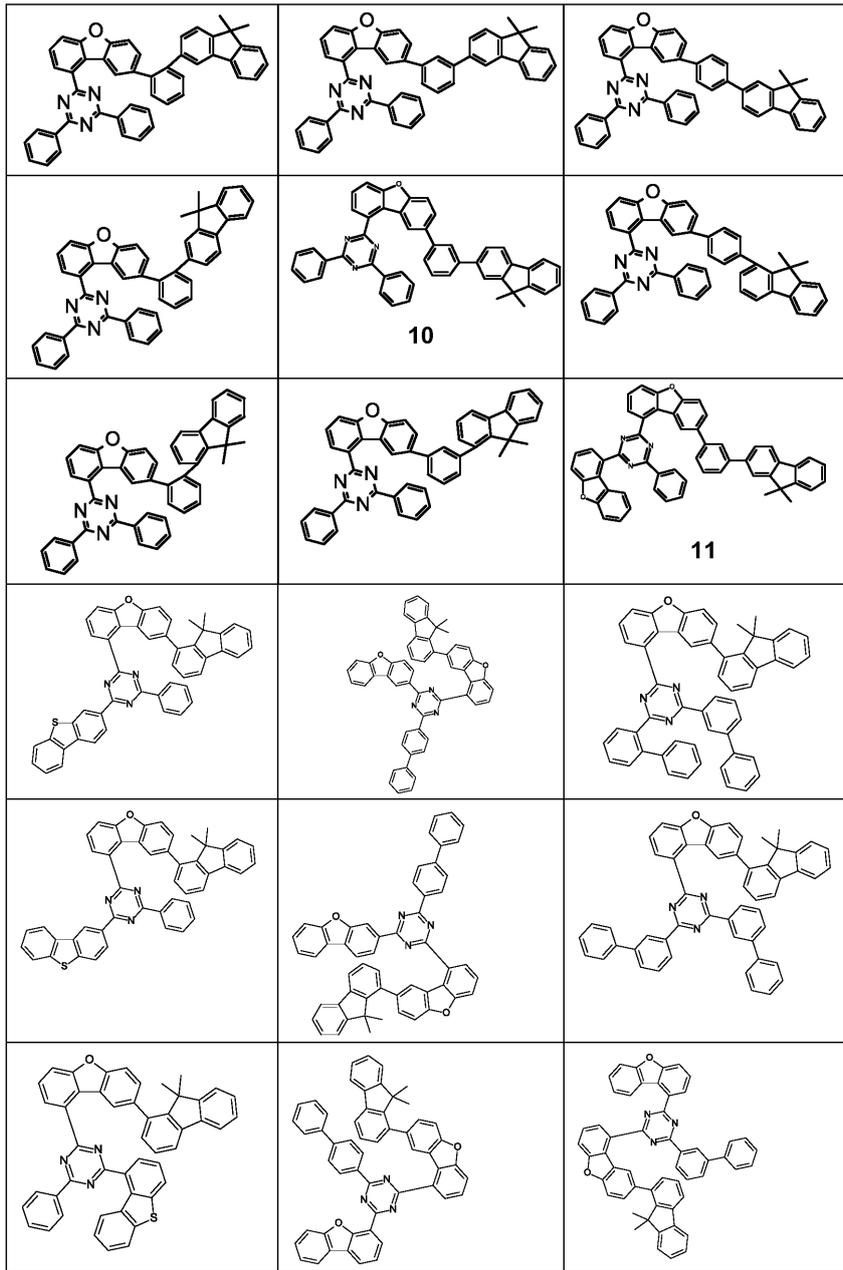


[0139]

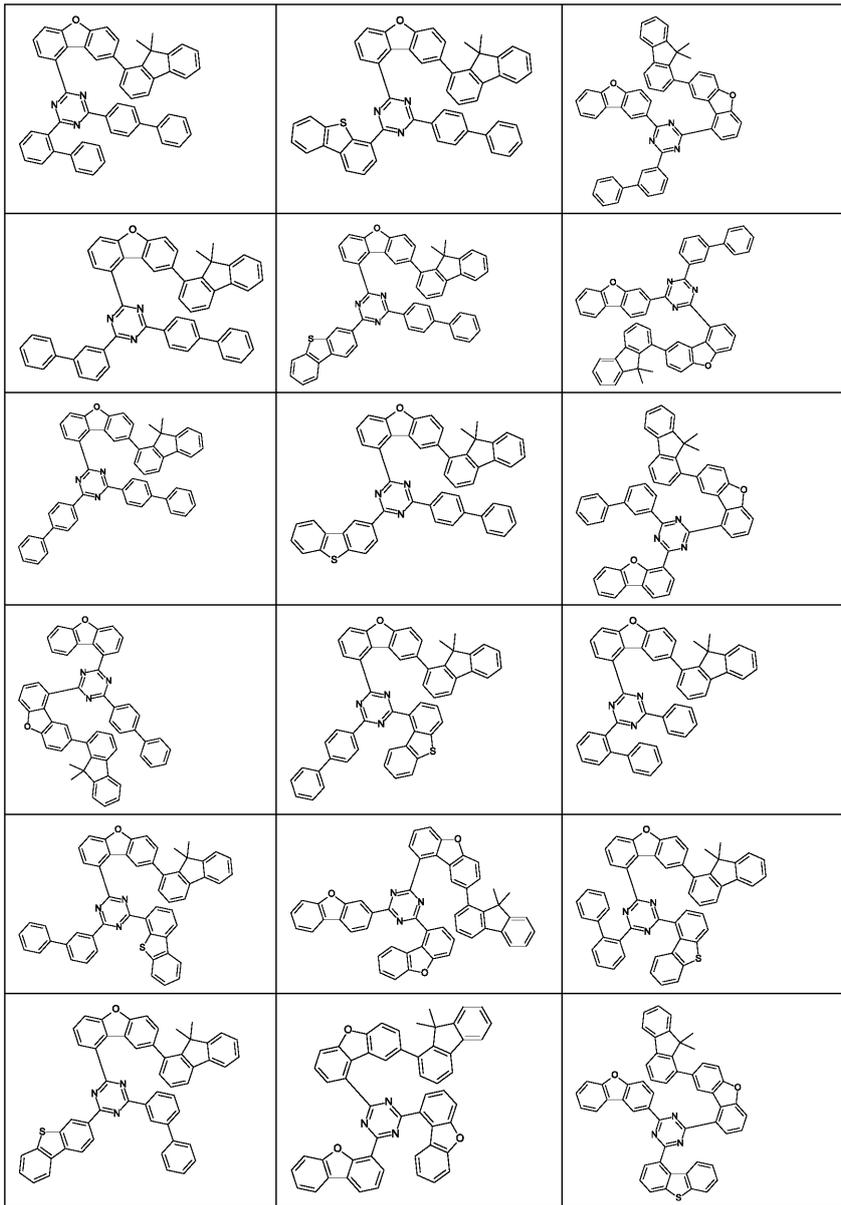


9

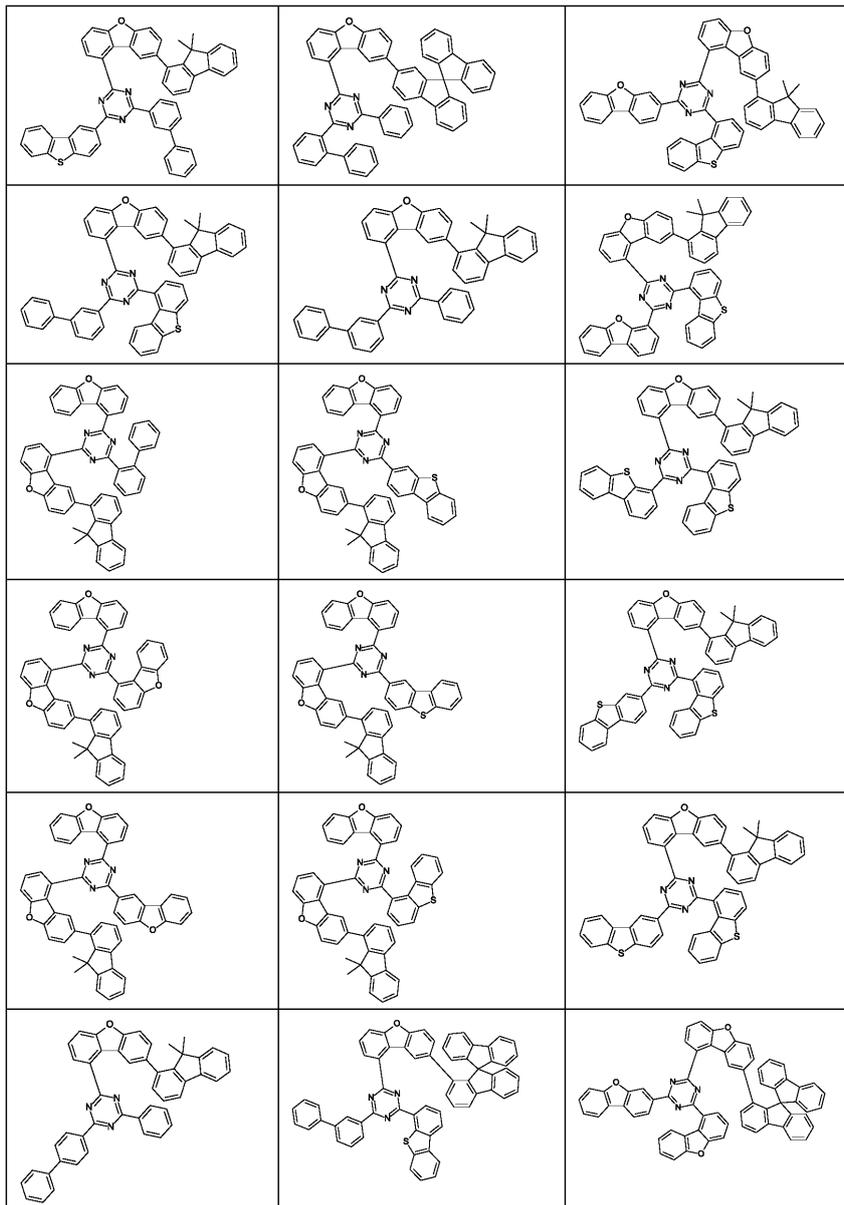
[0140]



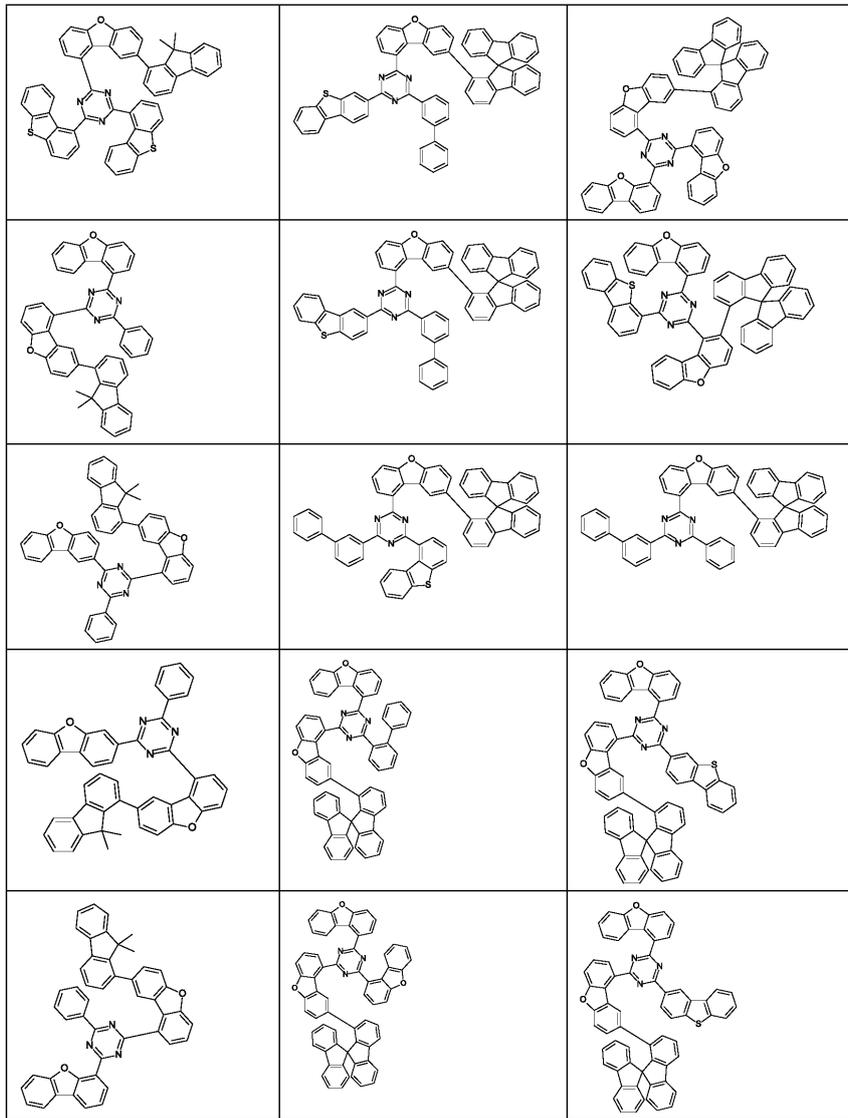
[0141]



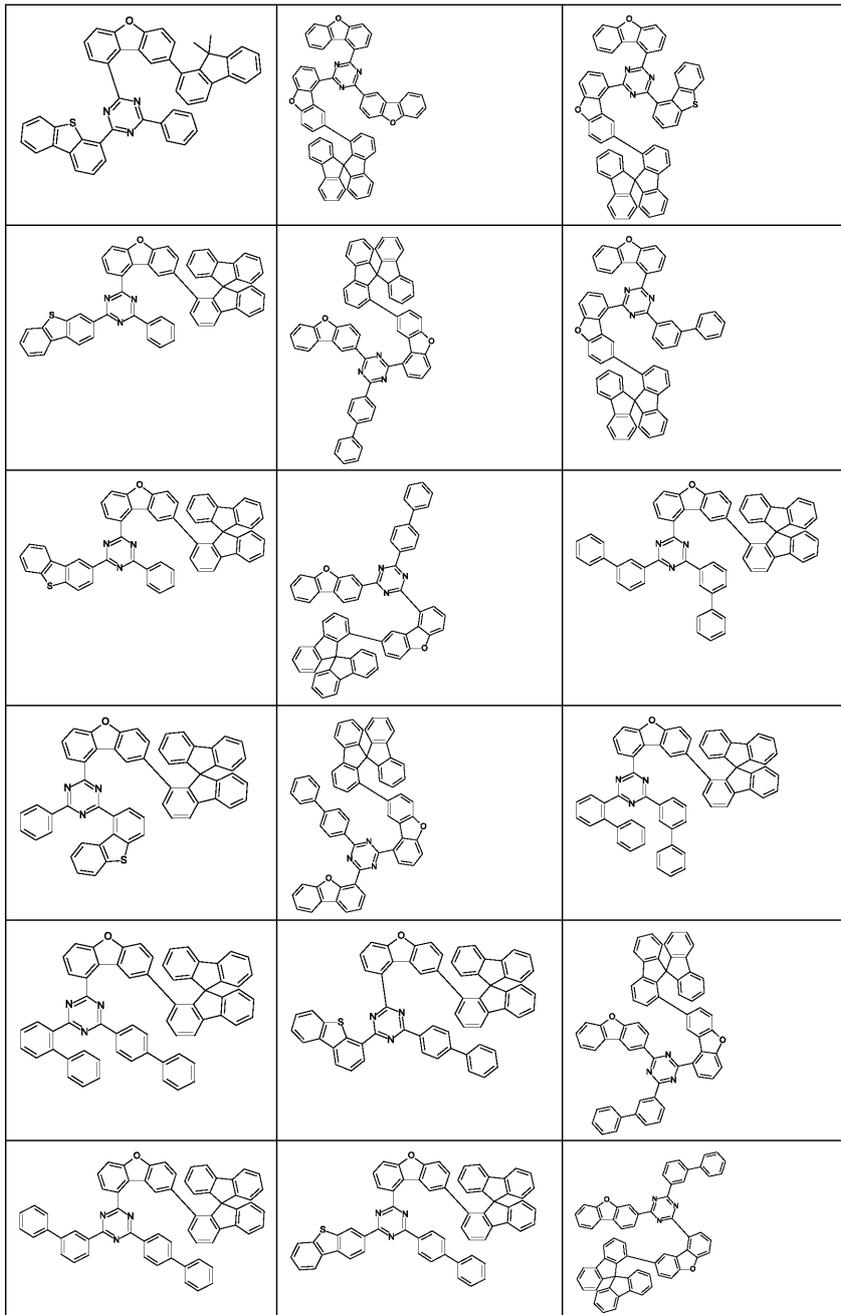
[0142]



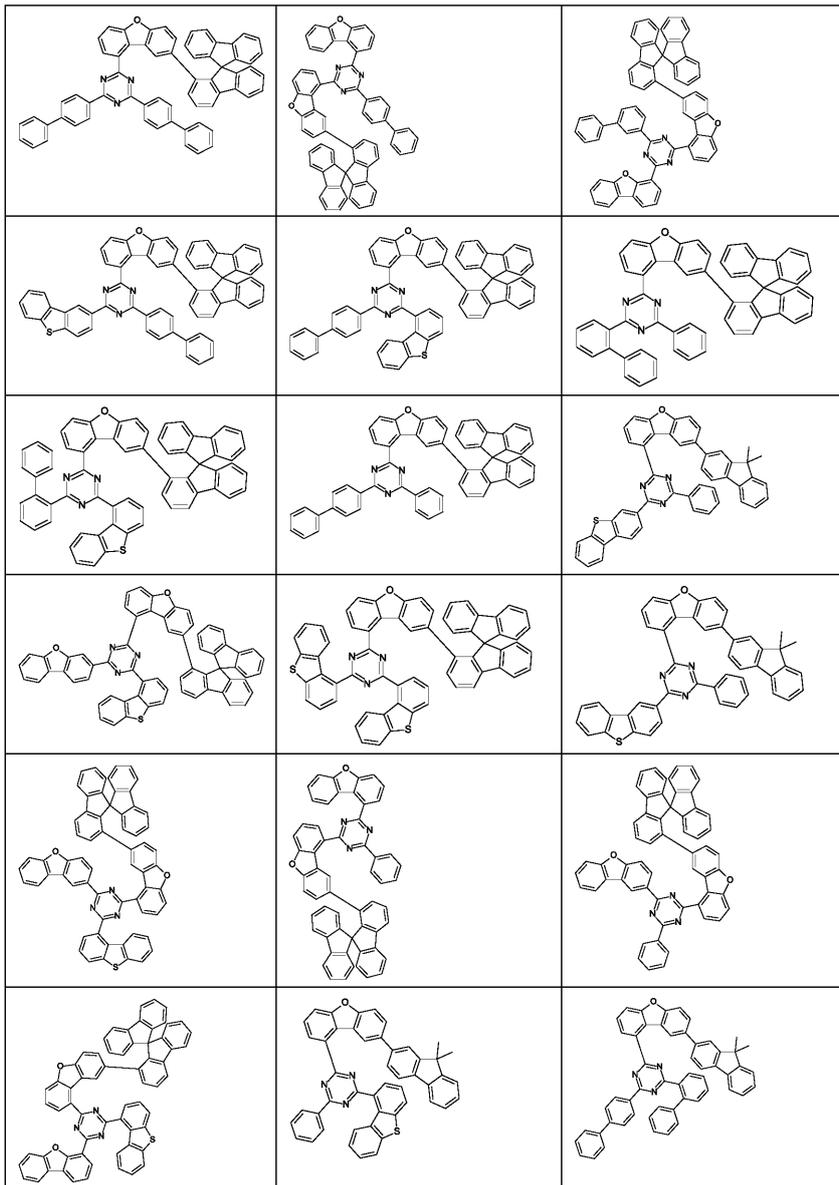
[0143]



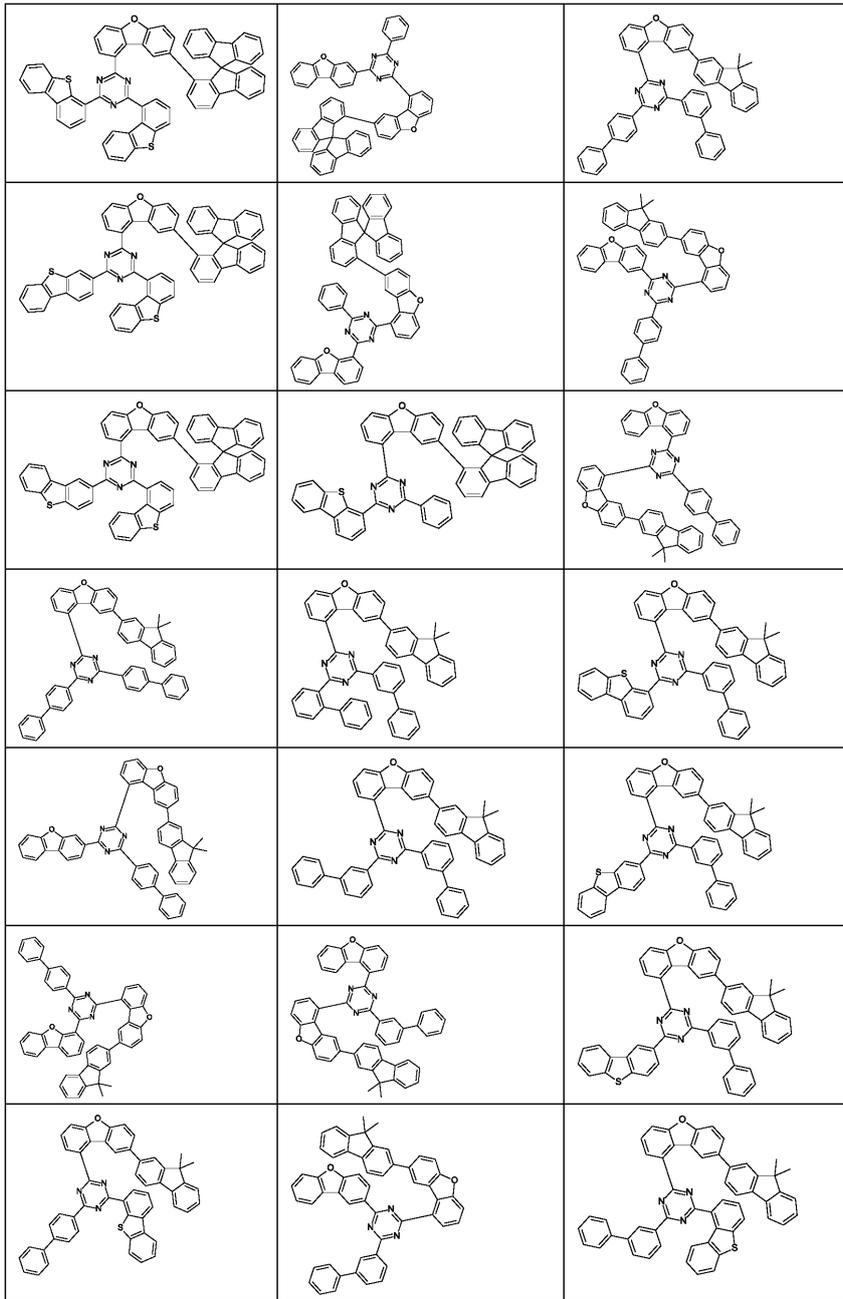
[0144]



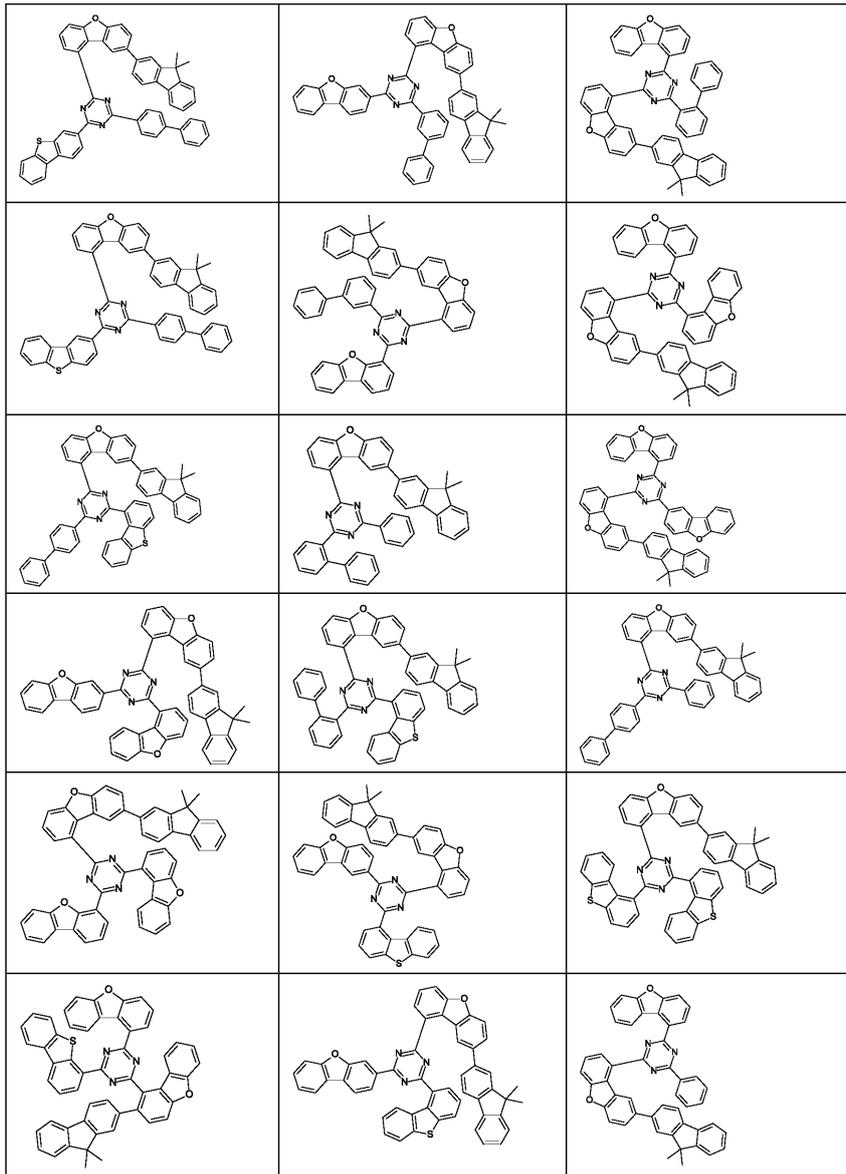
[0145]



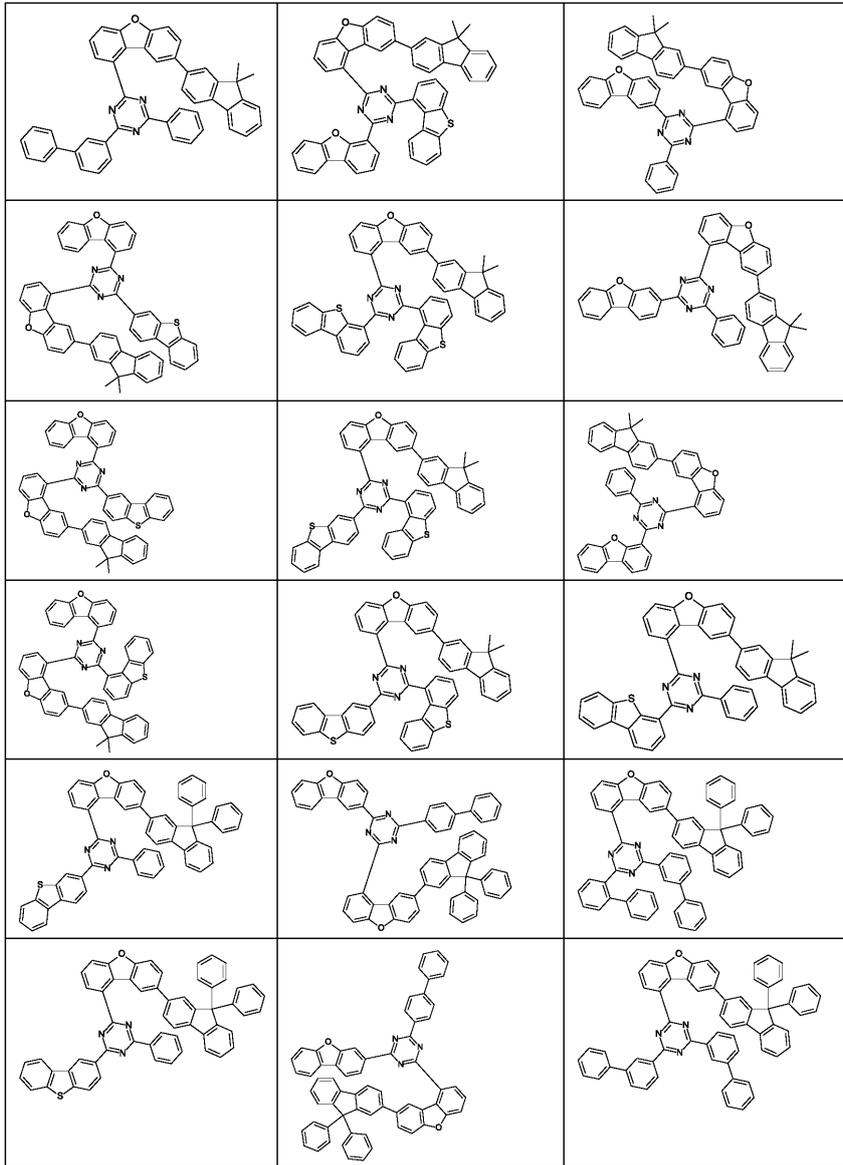
[0146]



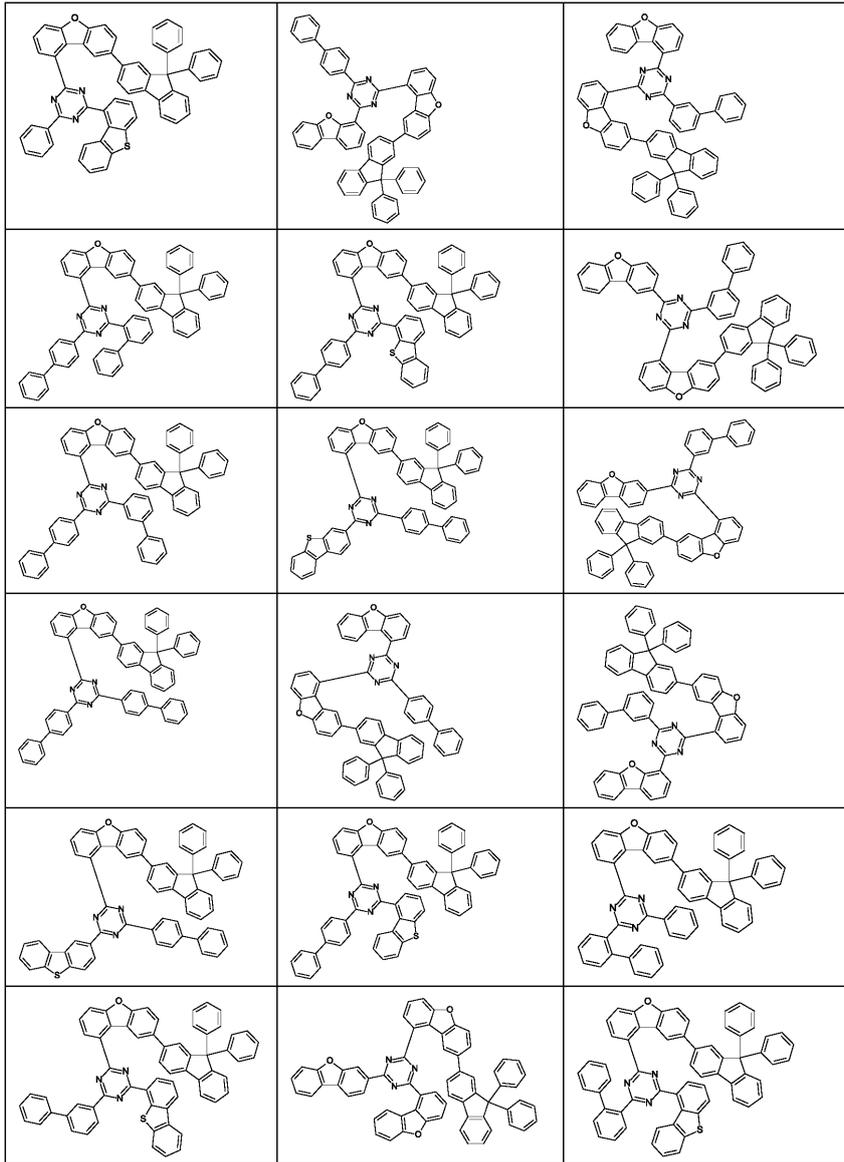
[0147]



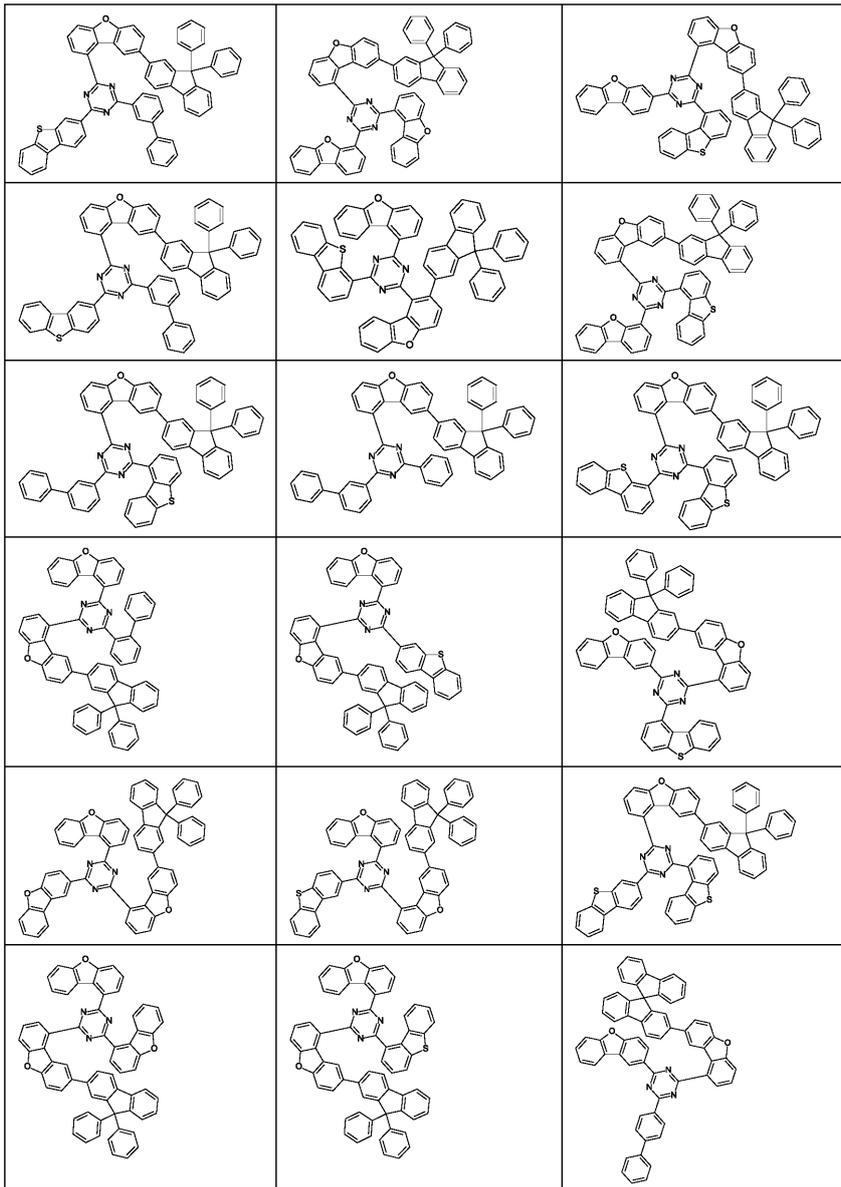
[0148]



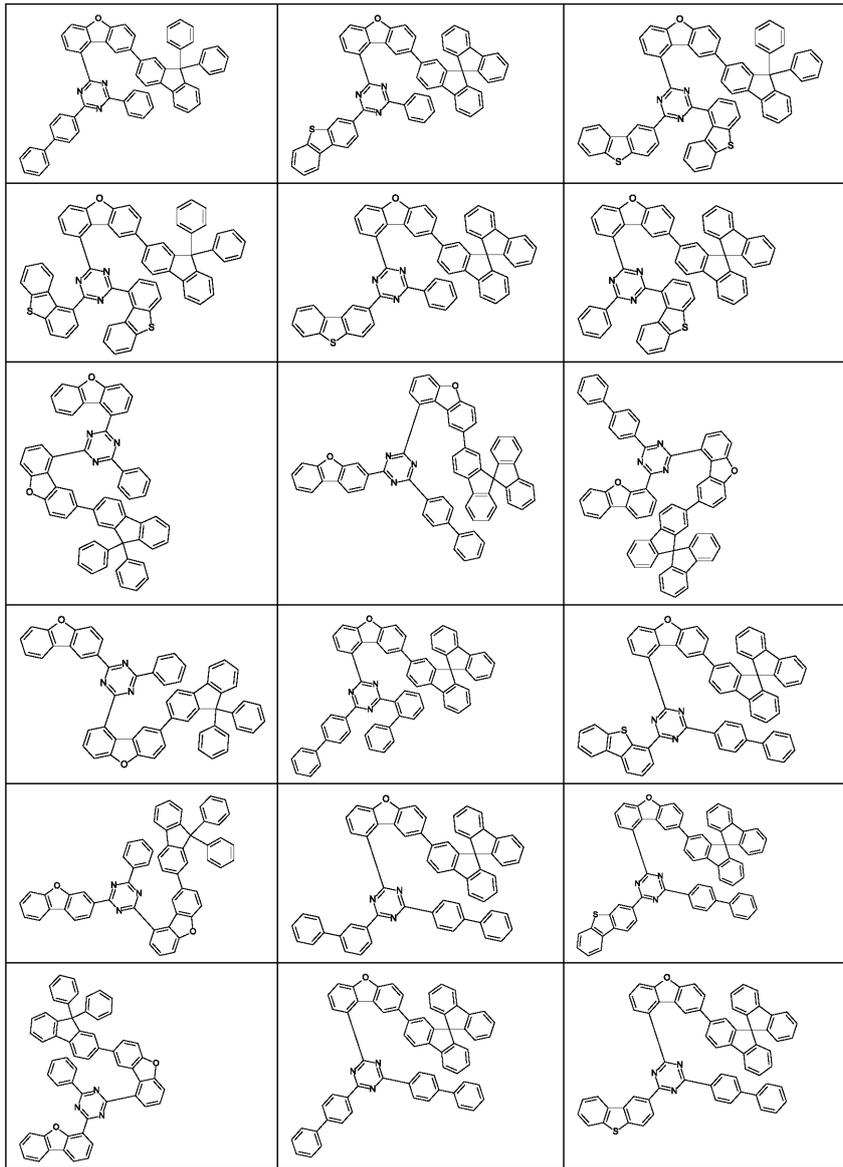
[0149]



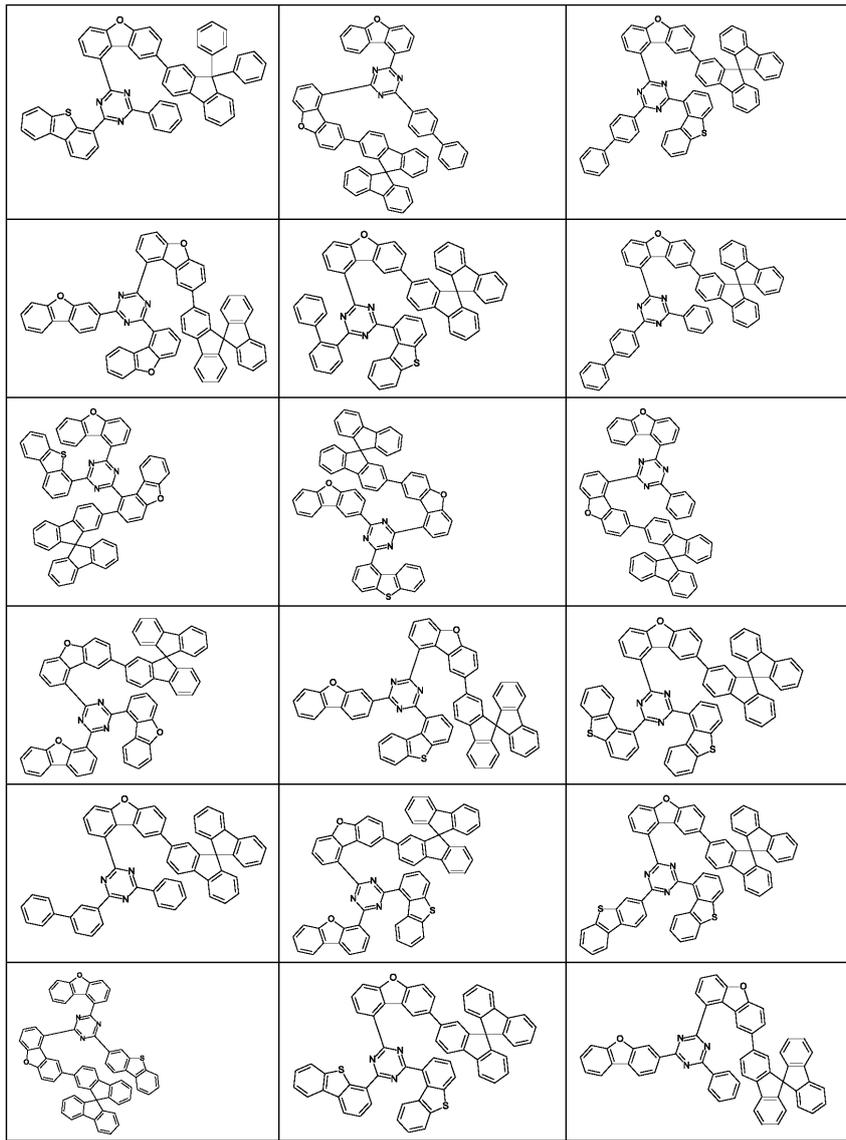
[0150]



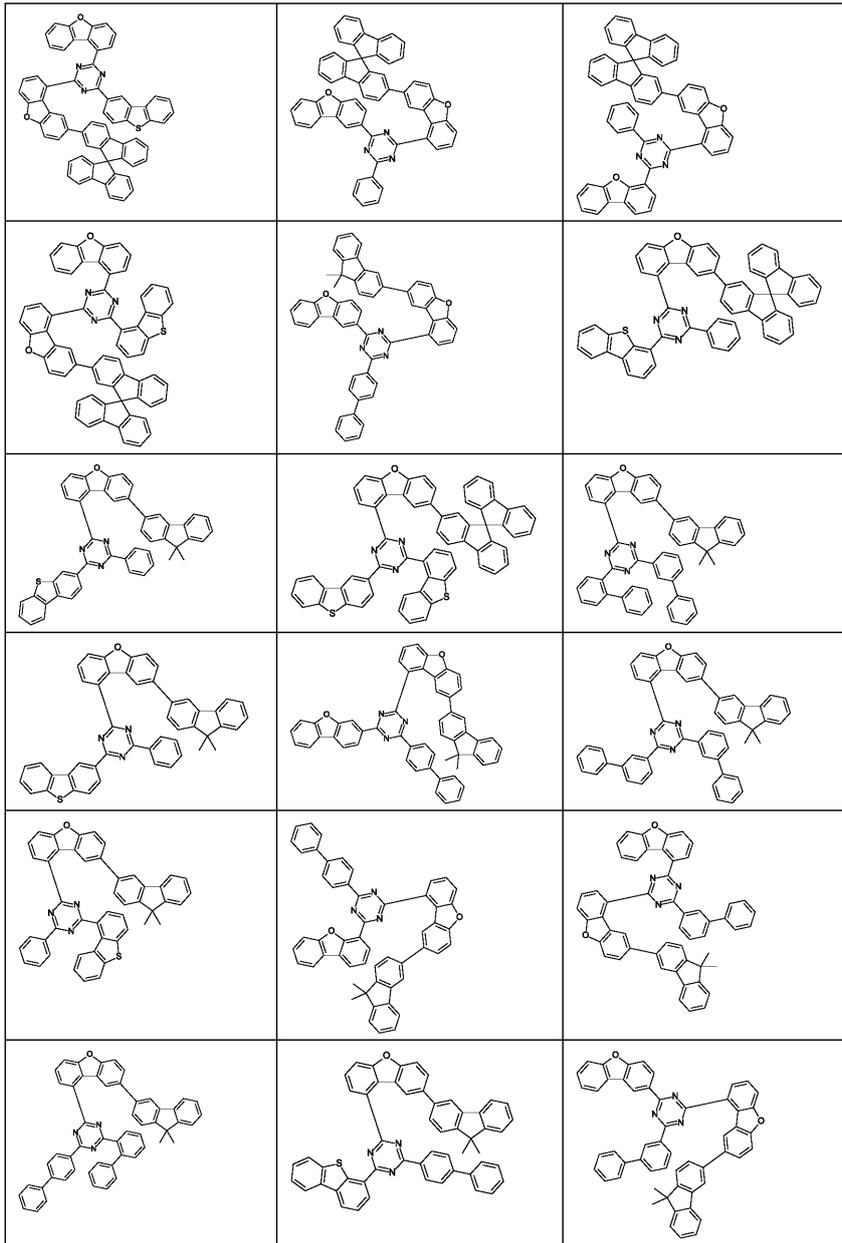
[0151]



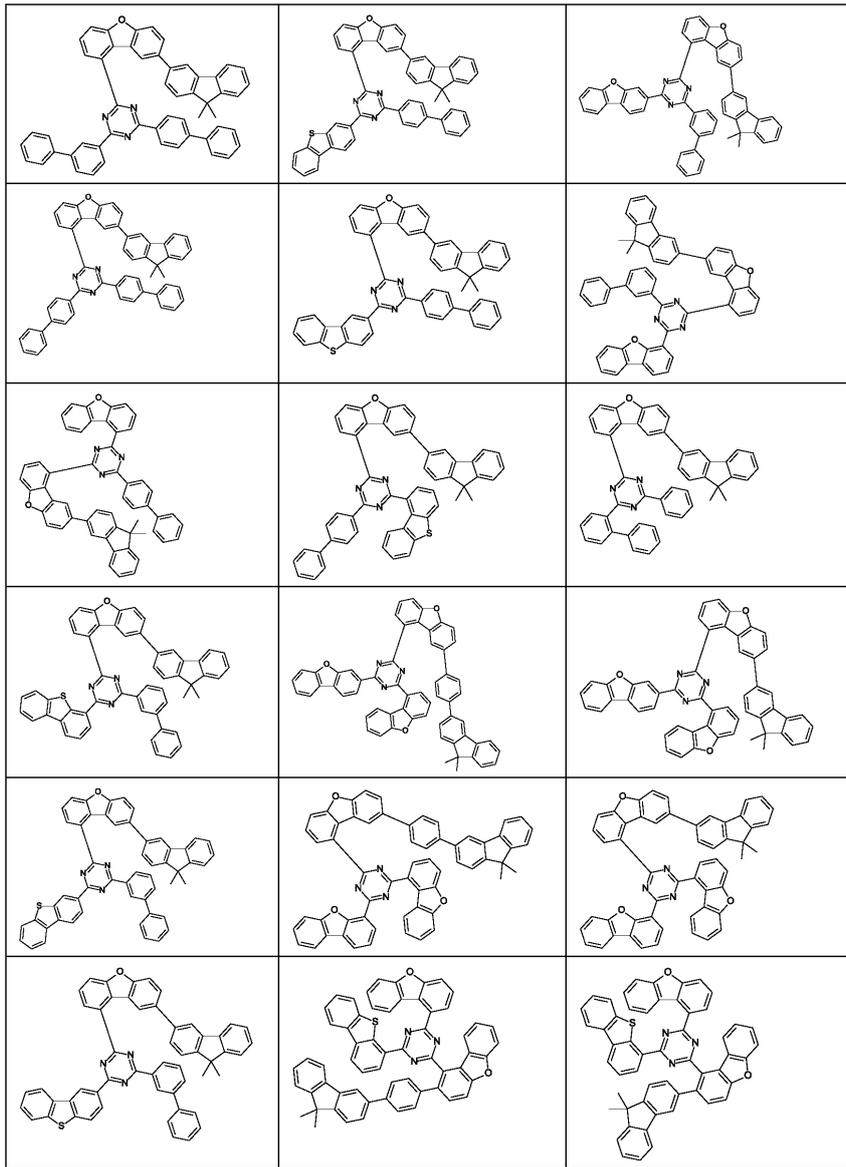
[0152]



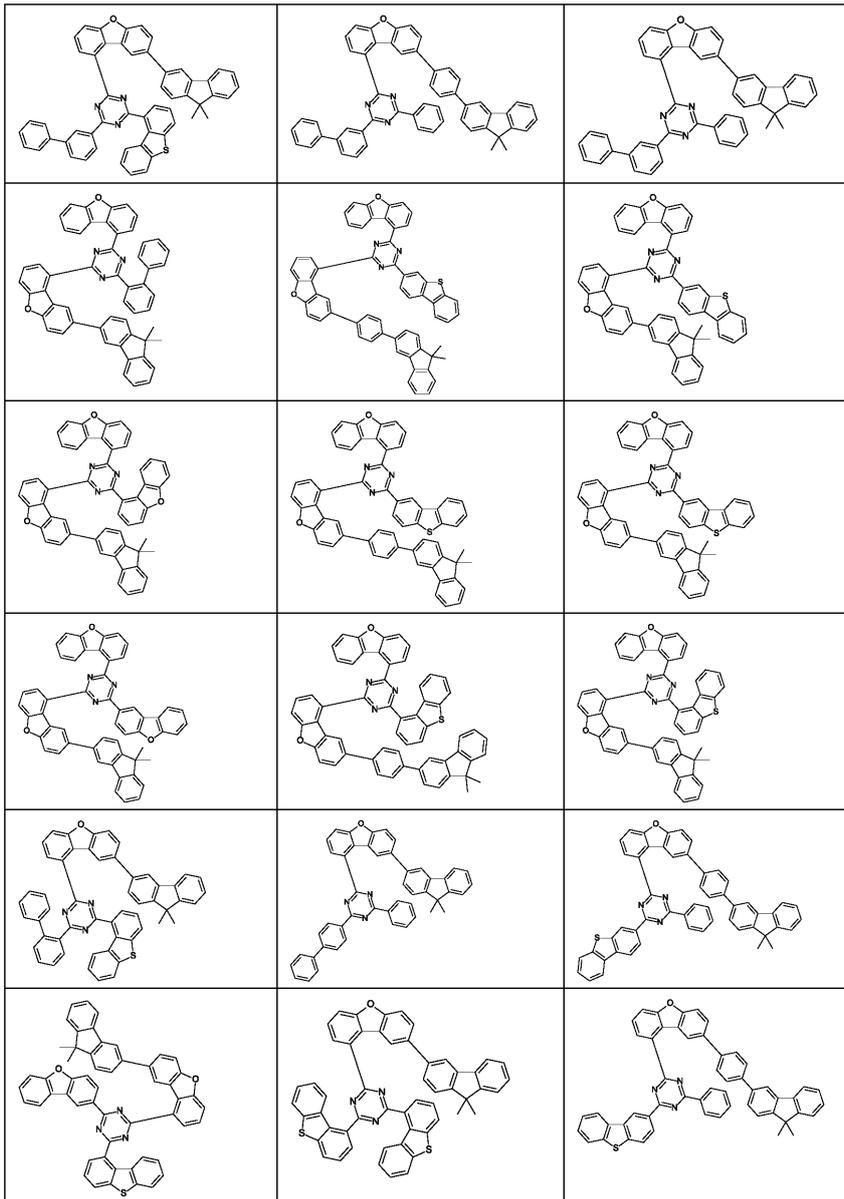
[0153]



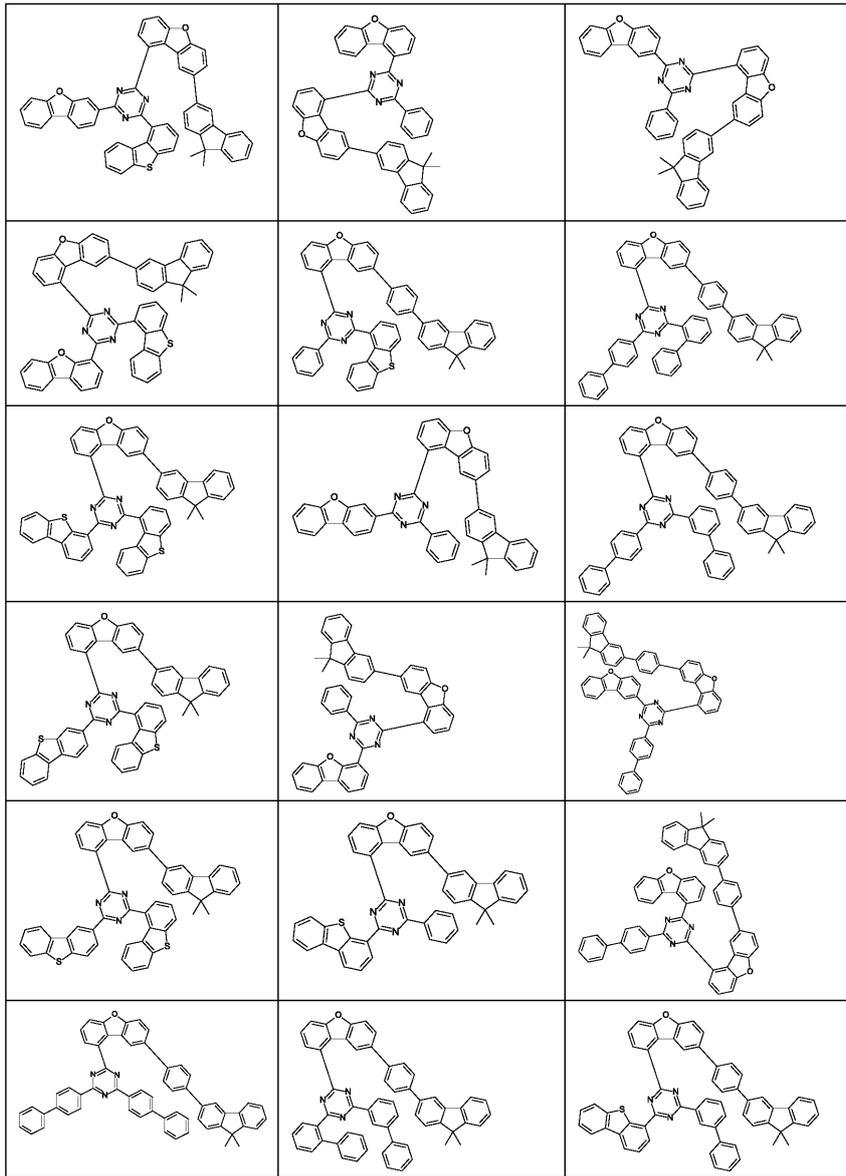
[0154]



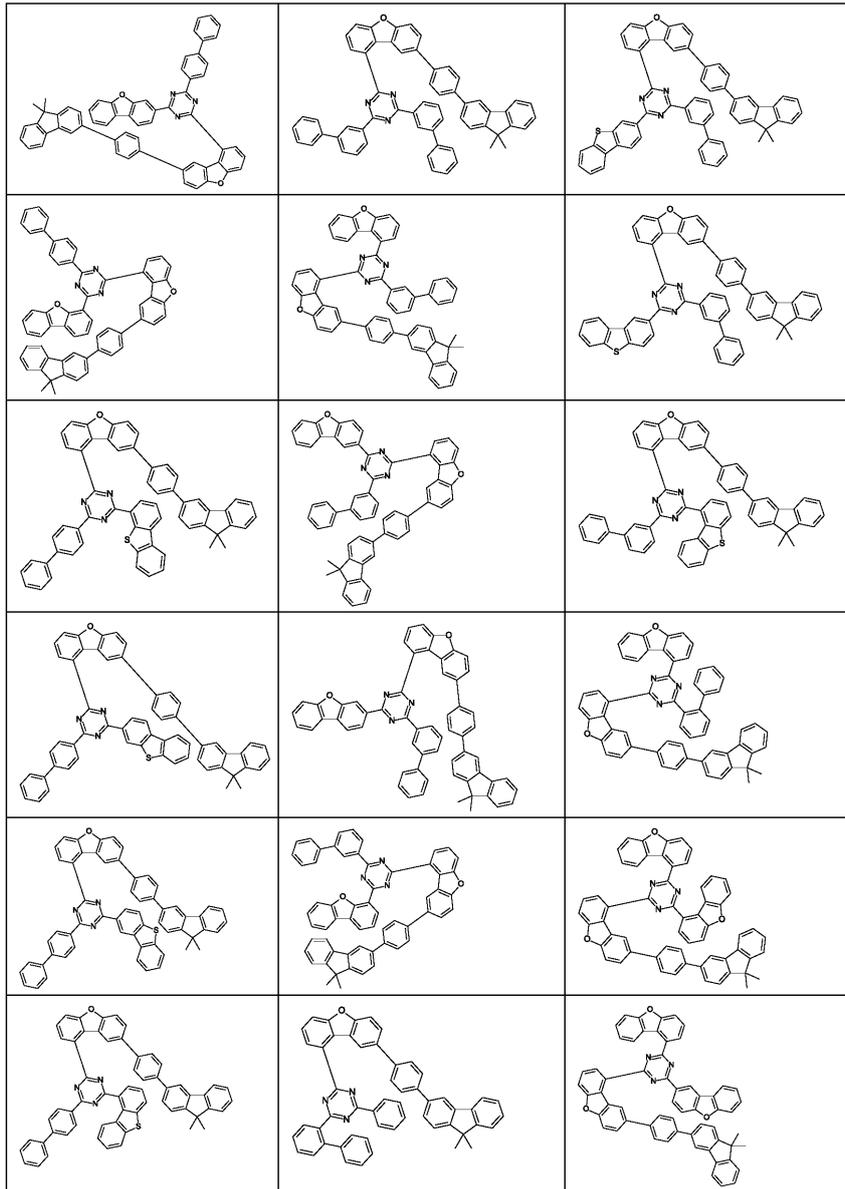
[0155]



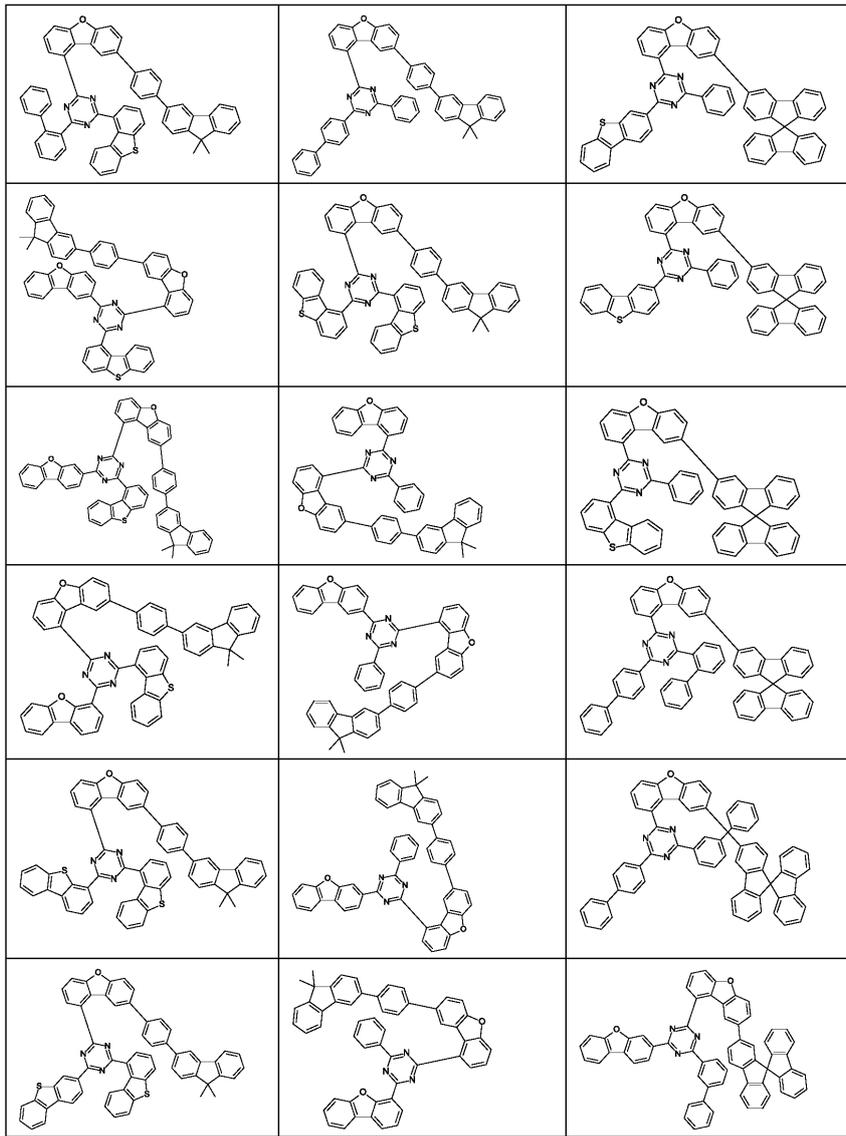
[0156]



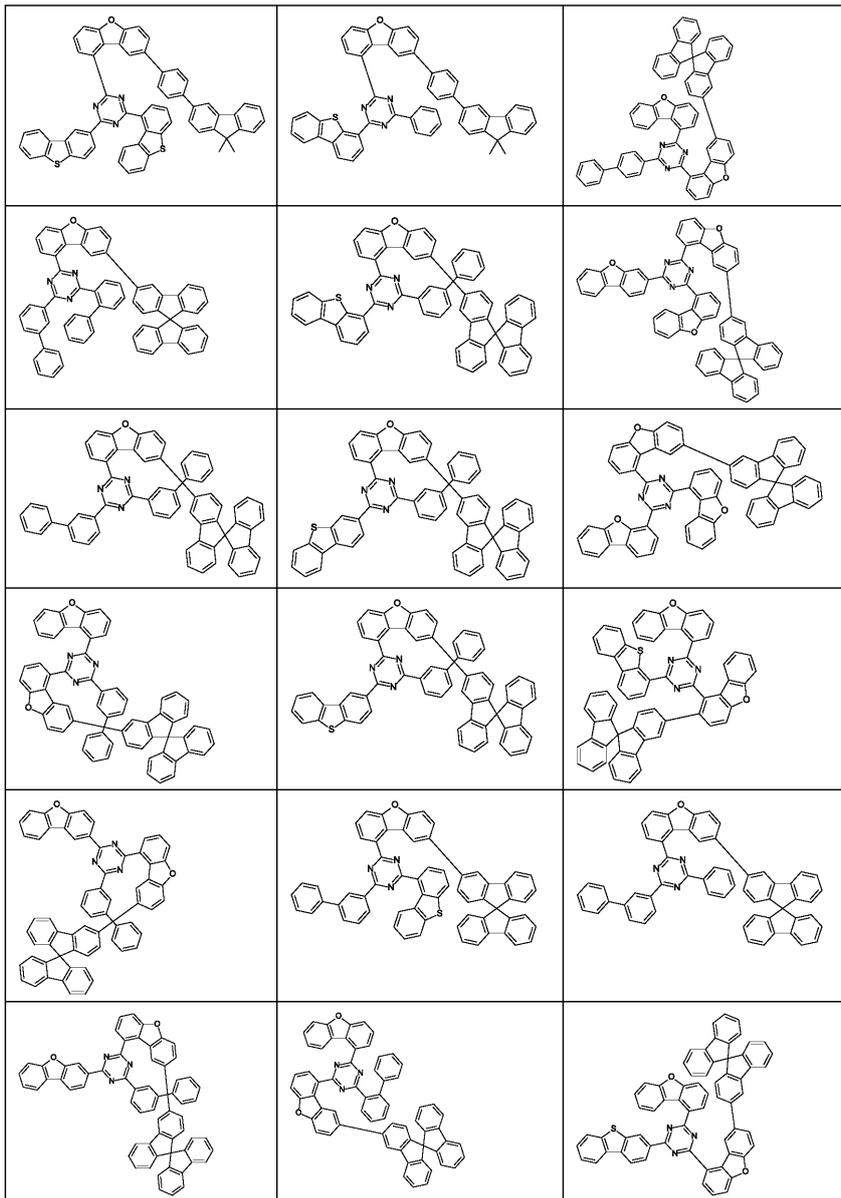
[0157]



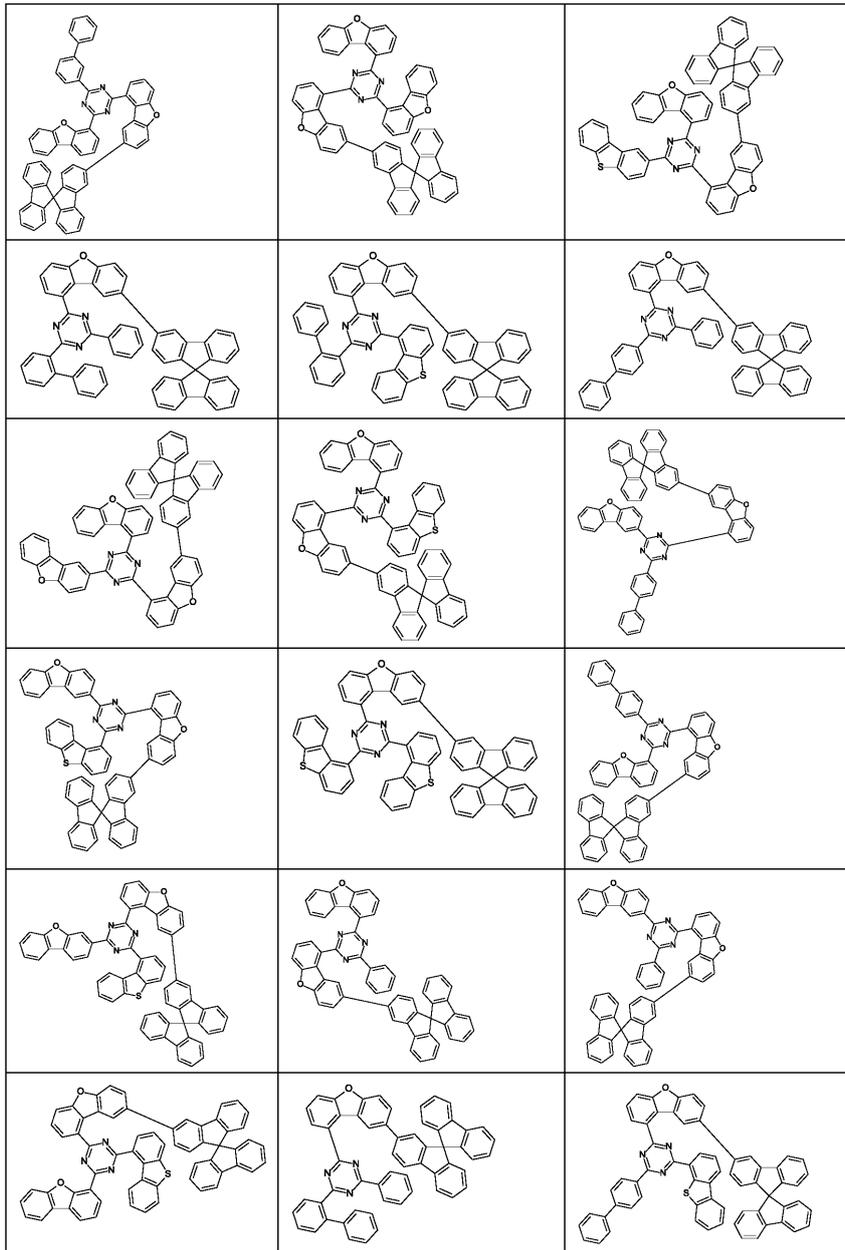
[0158]



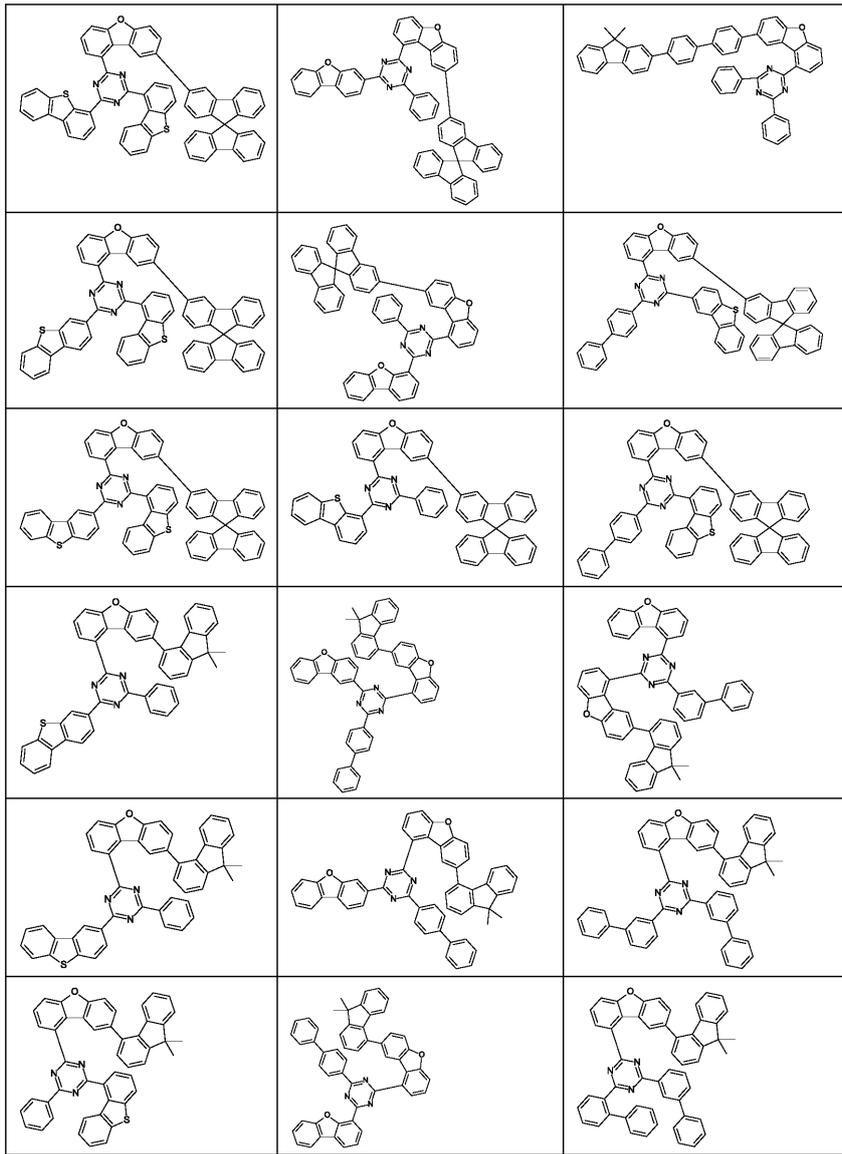
[0159]



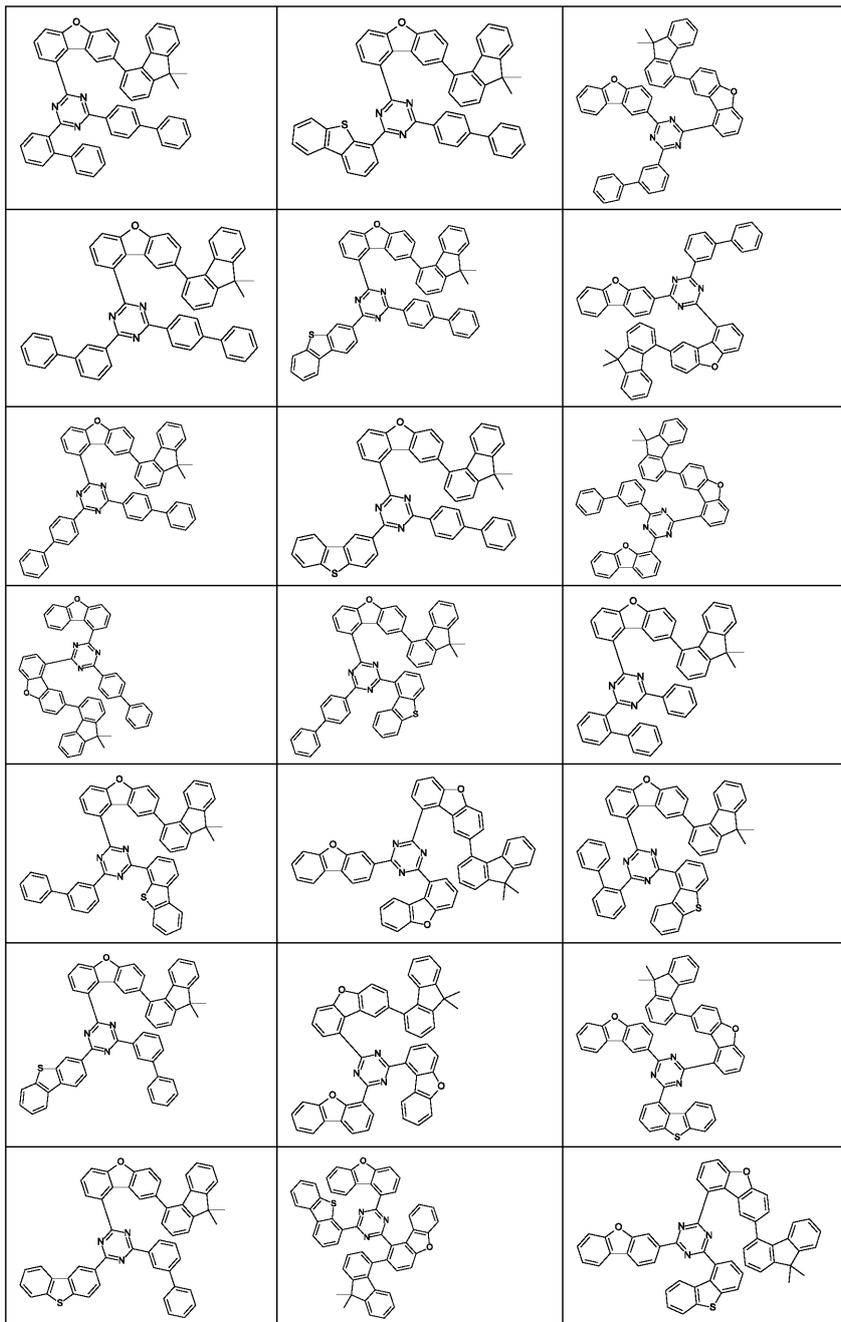
[0160]



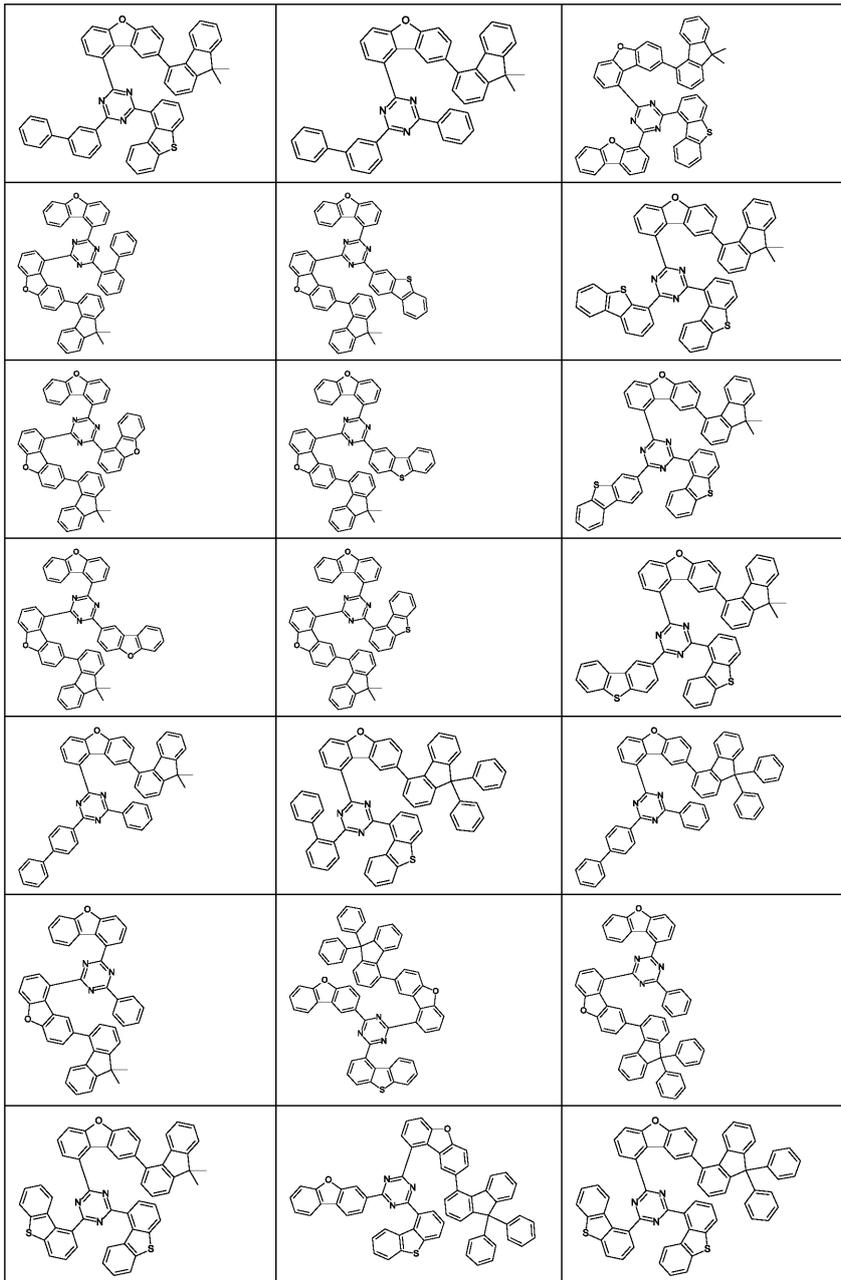
[0161]



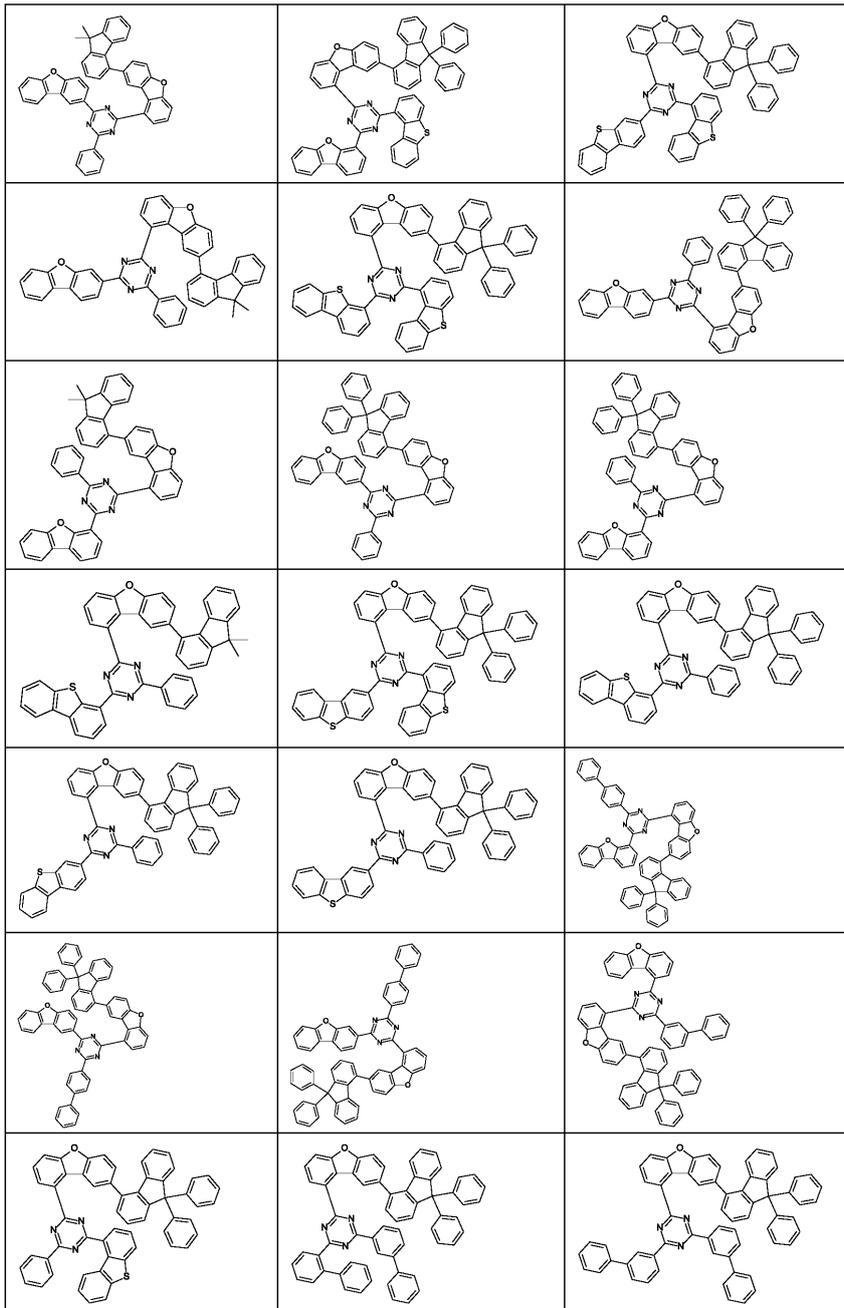
[0162]



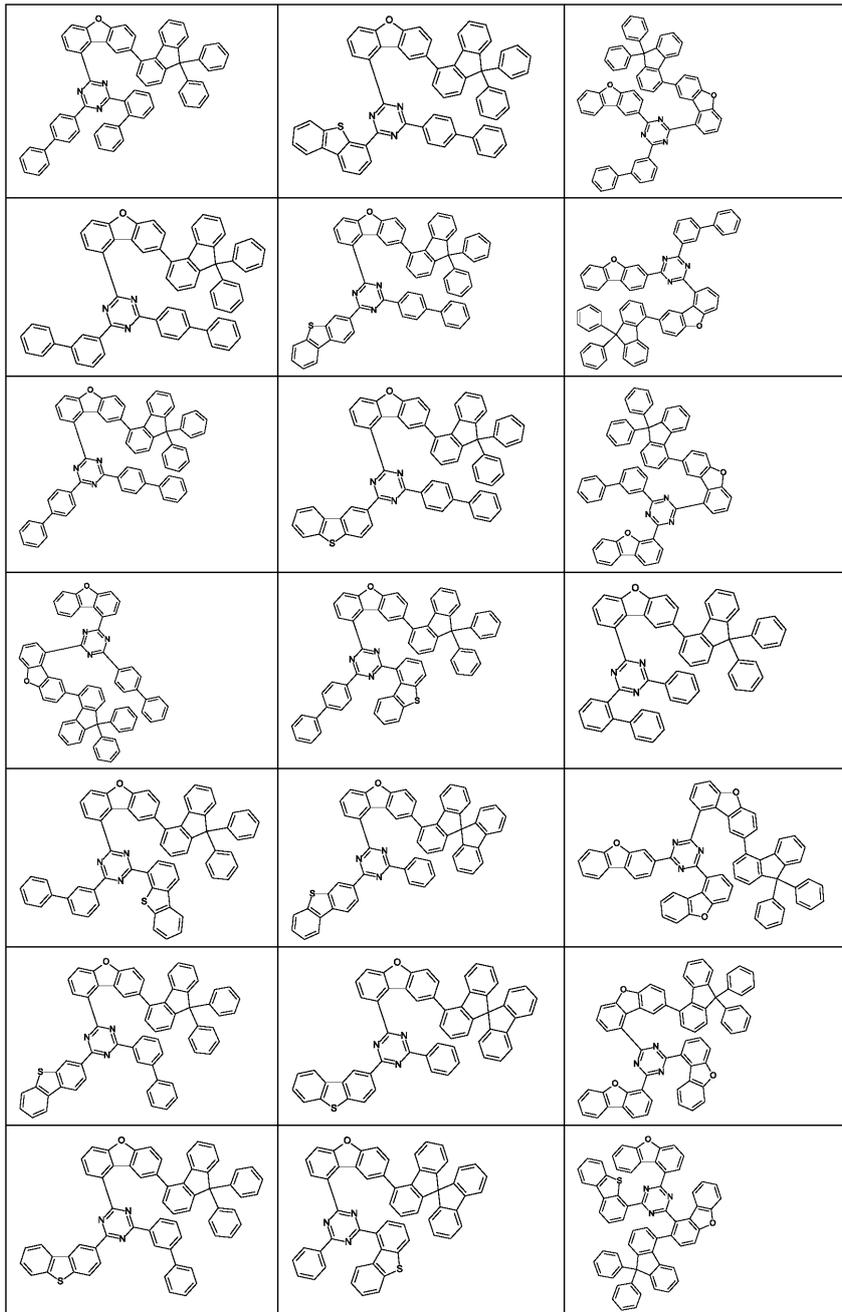
[0163]



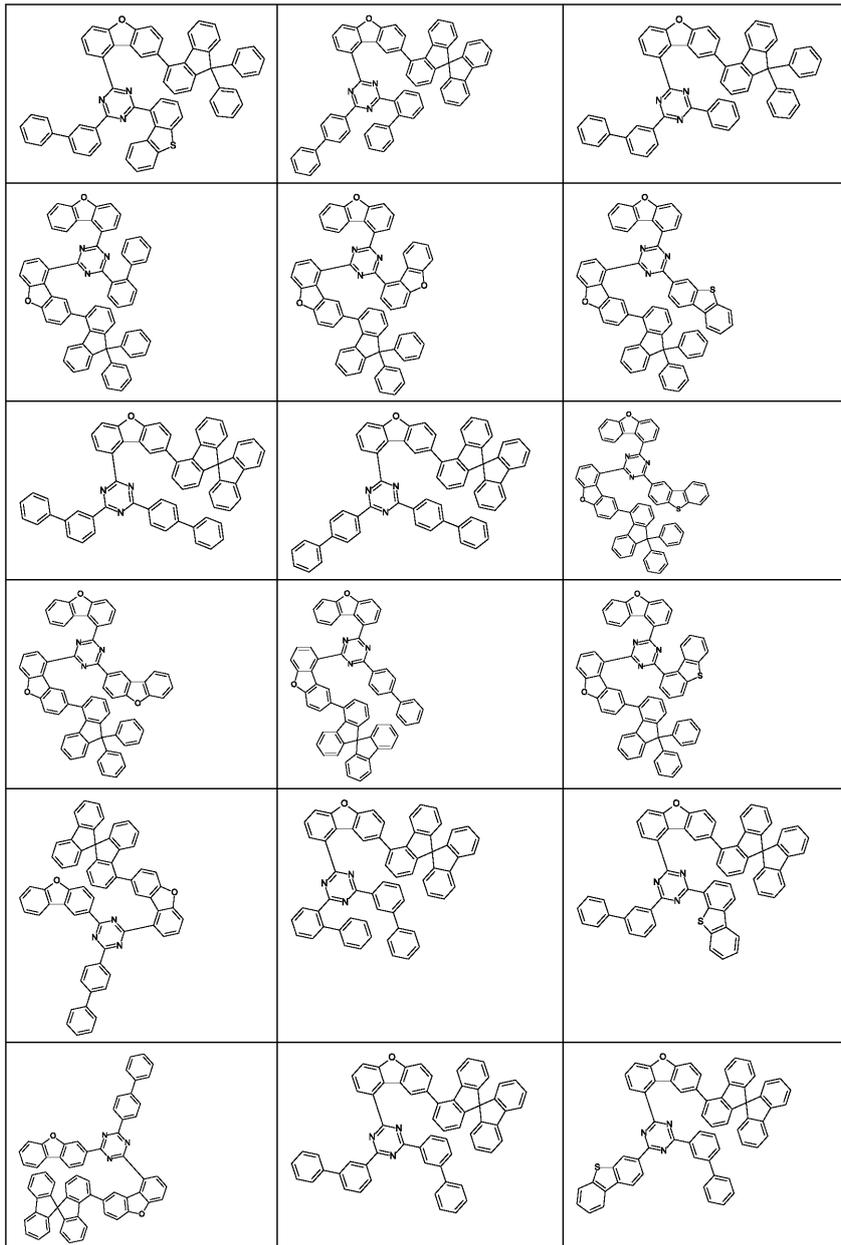
[0164]



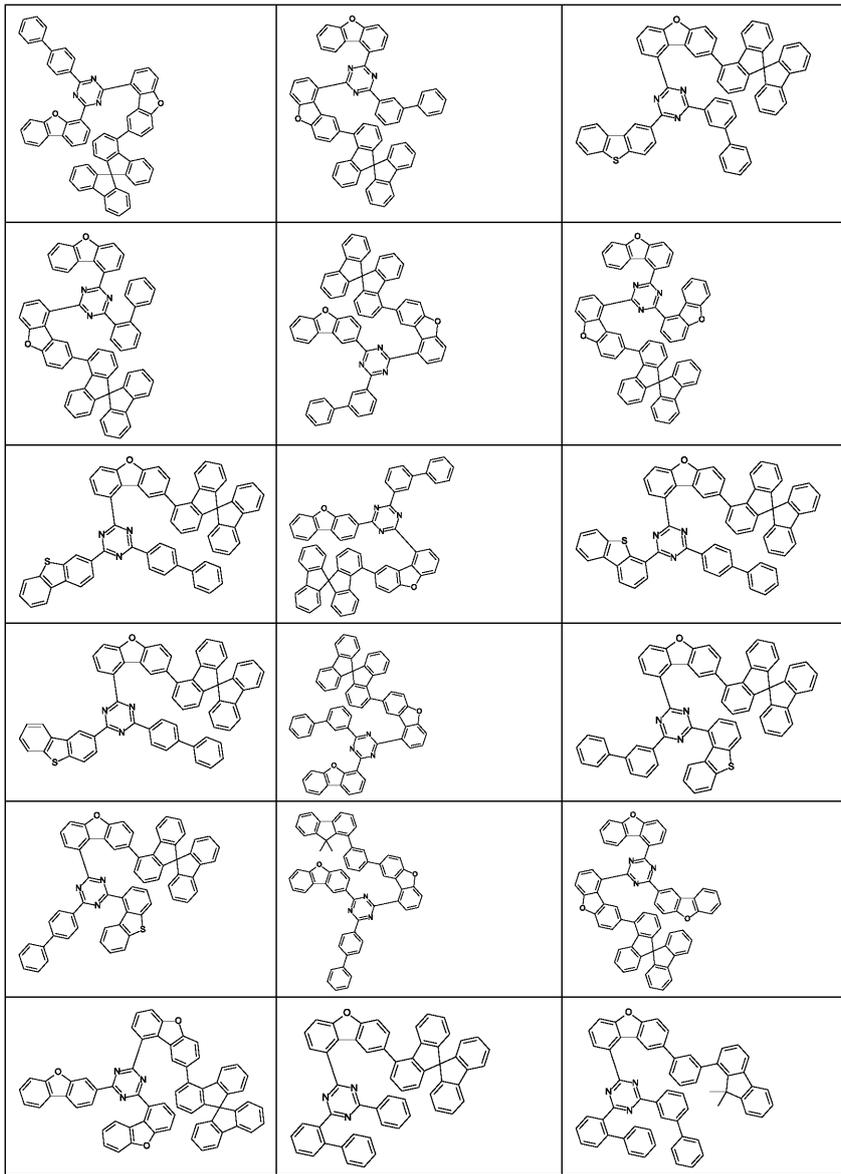
[0165]



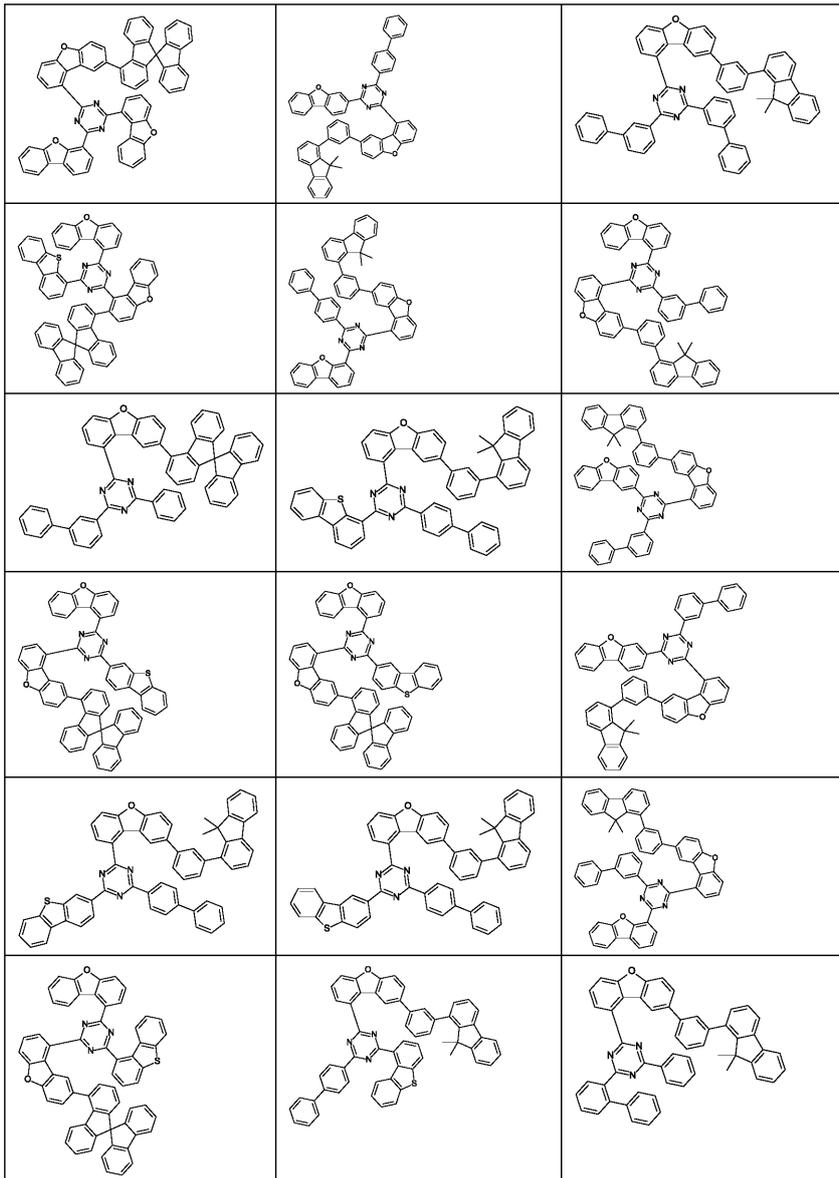
[0166]



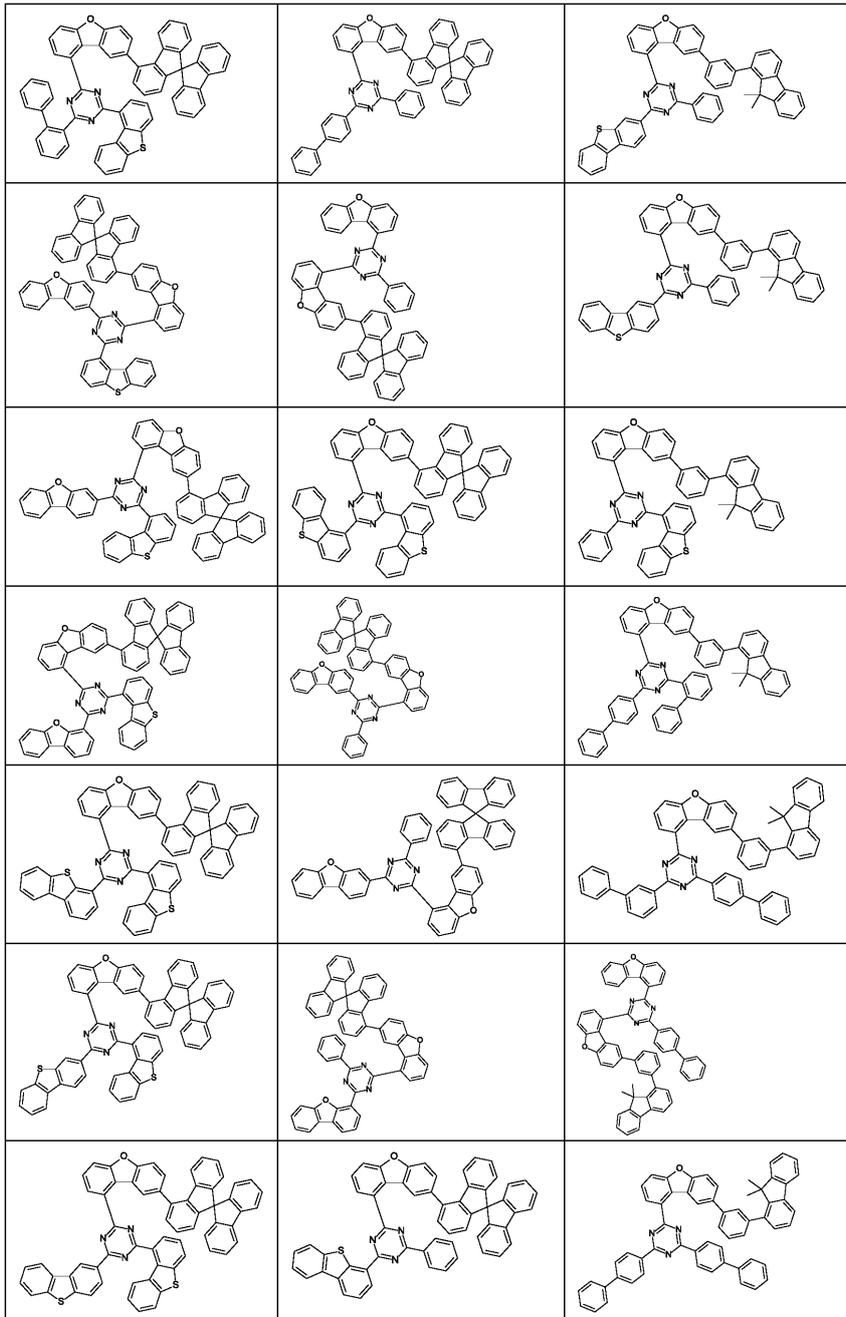
[0167]



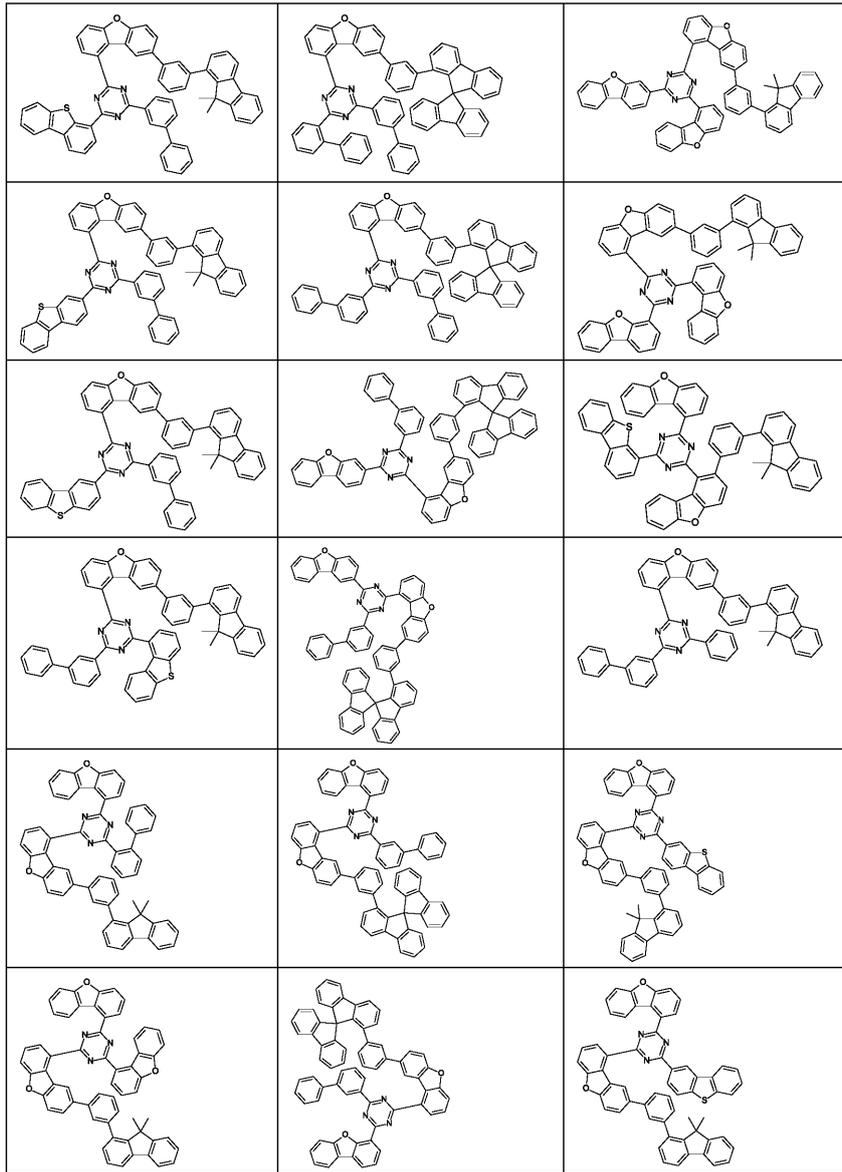
[0168]



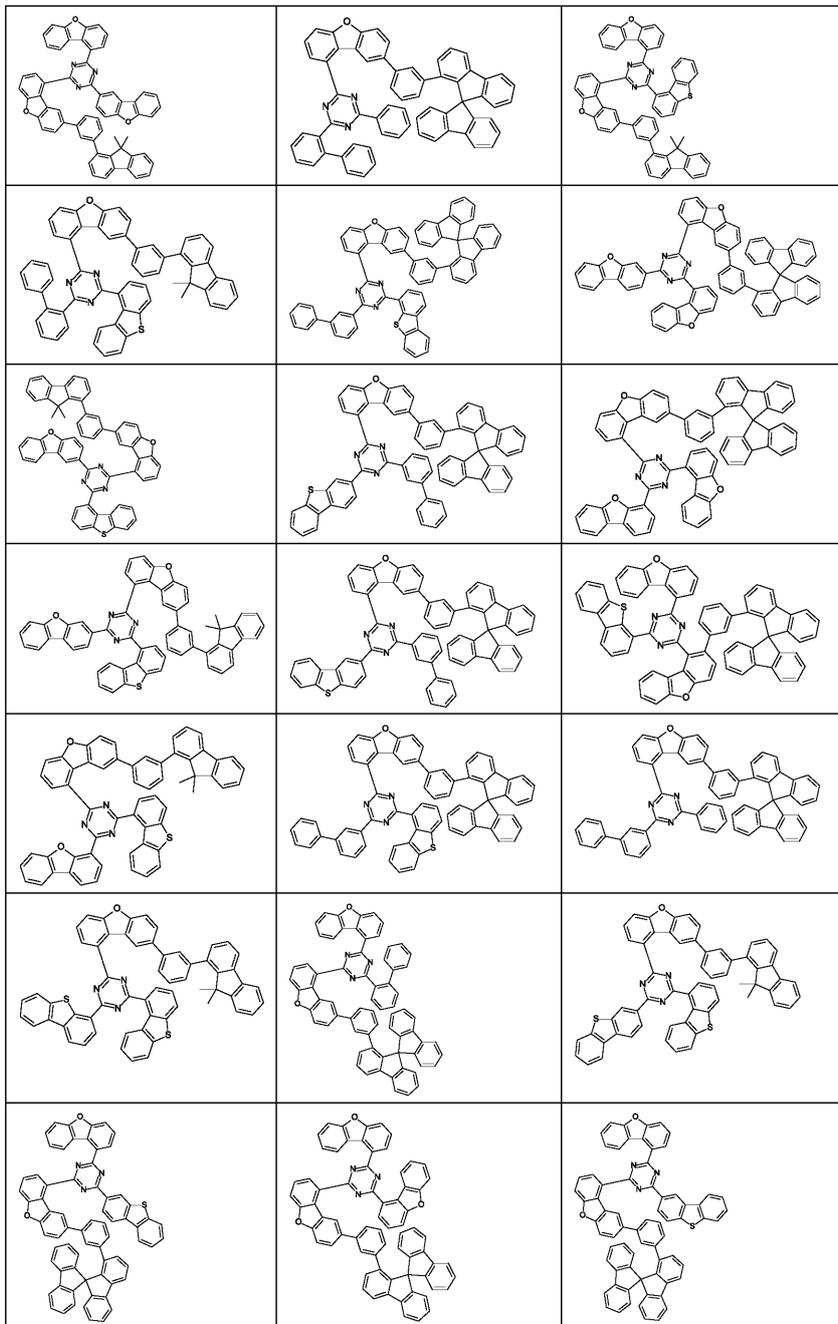
[0169]



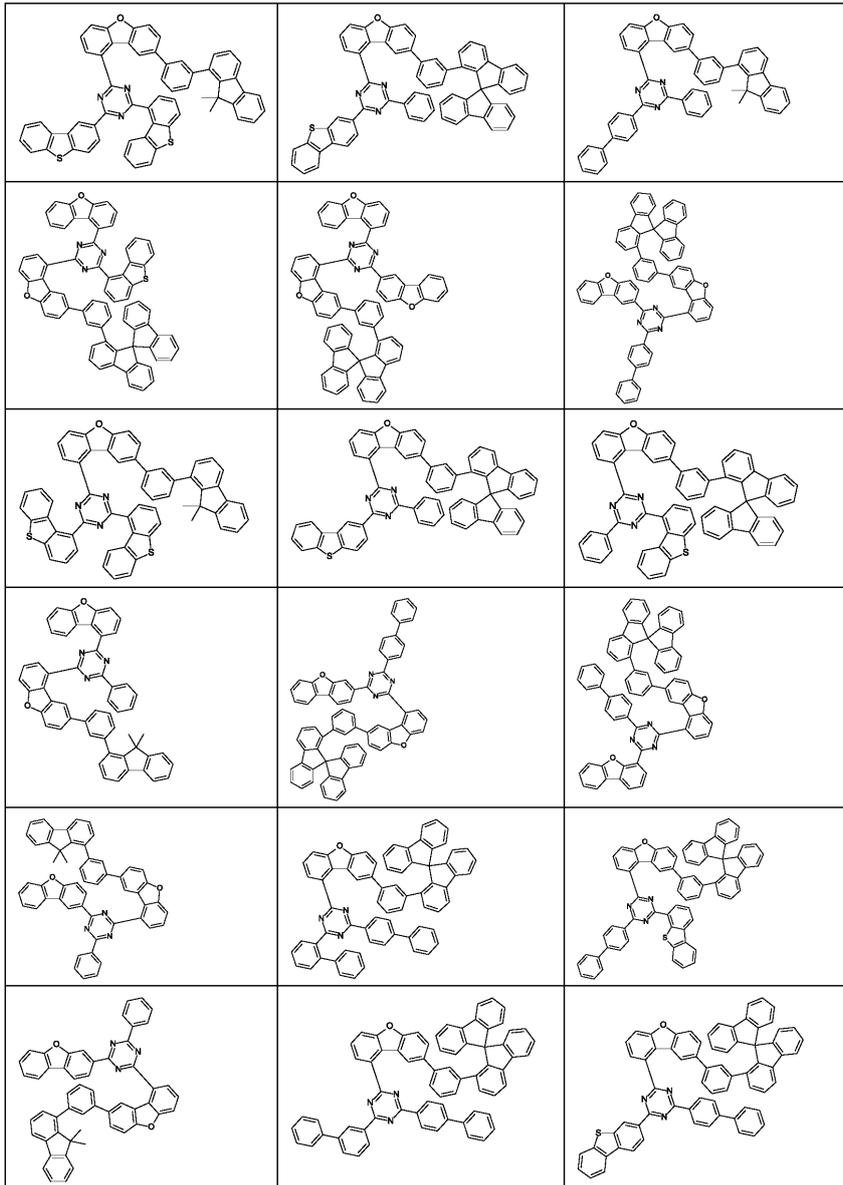
[0170]



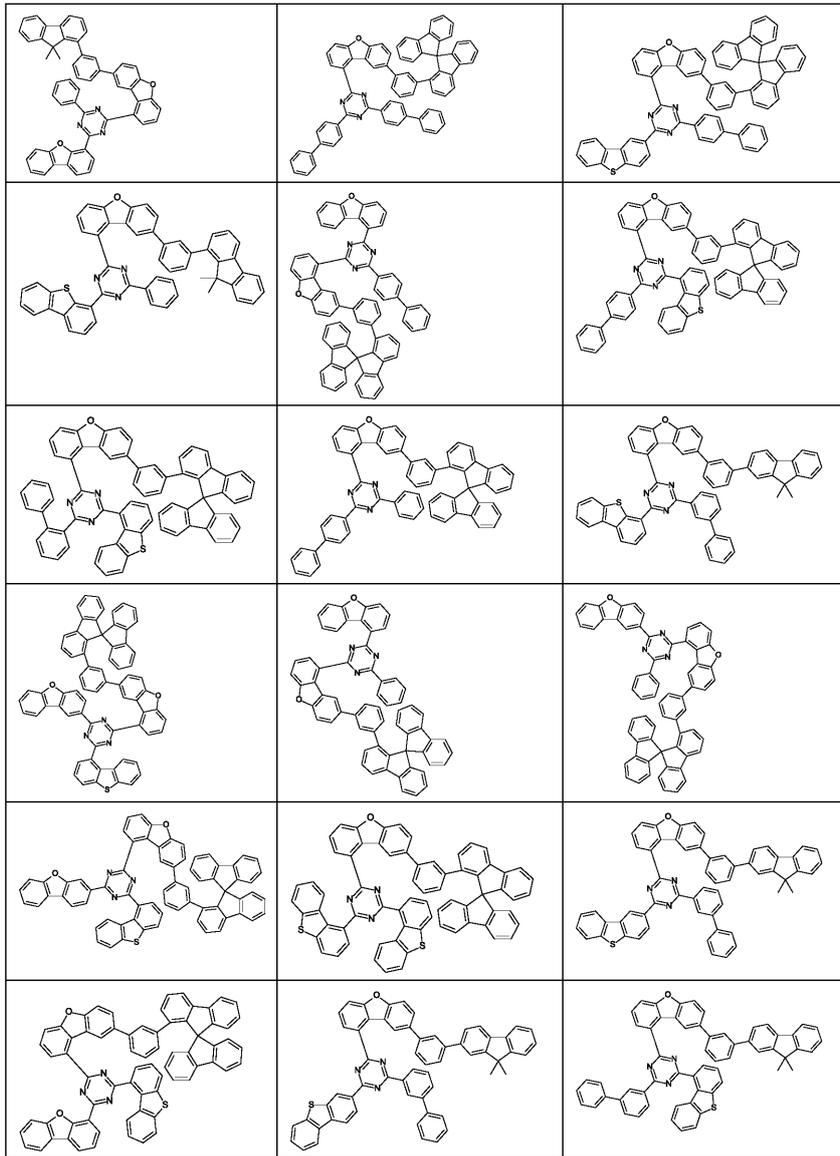
[0171]



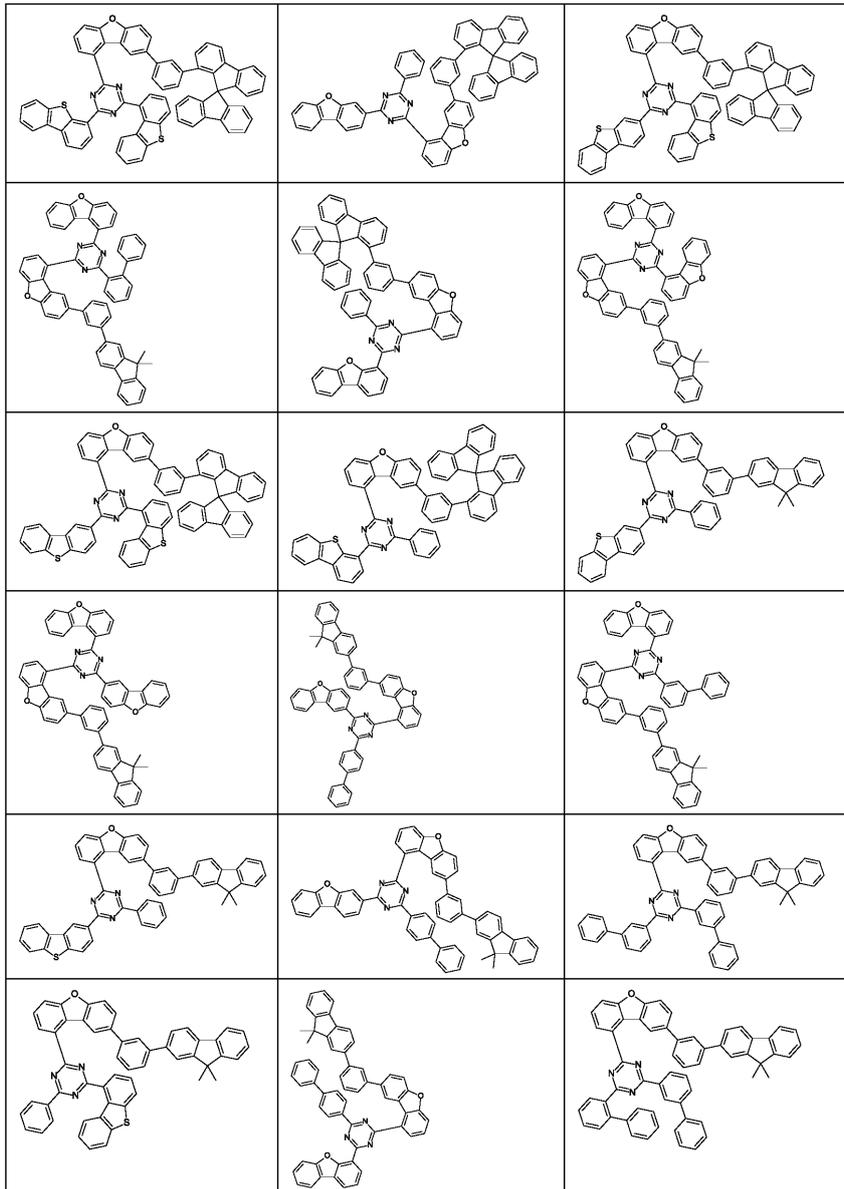
[0172]



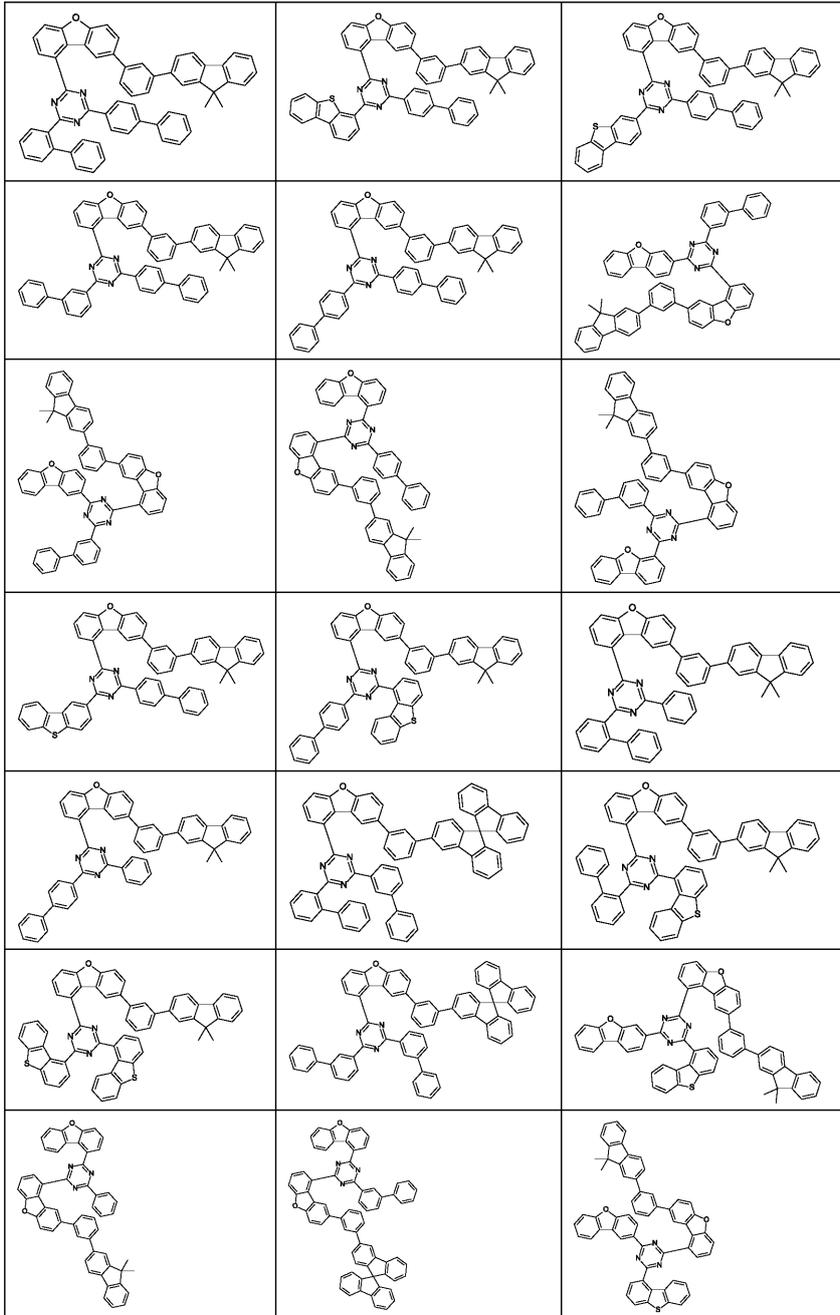
[0173]



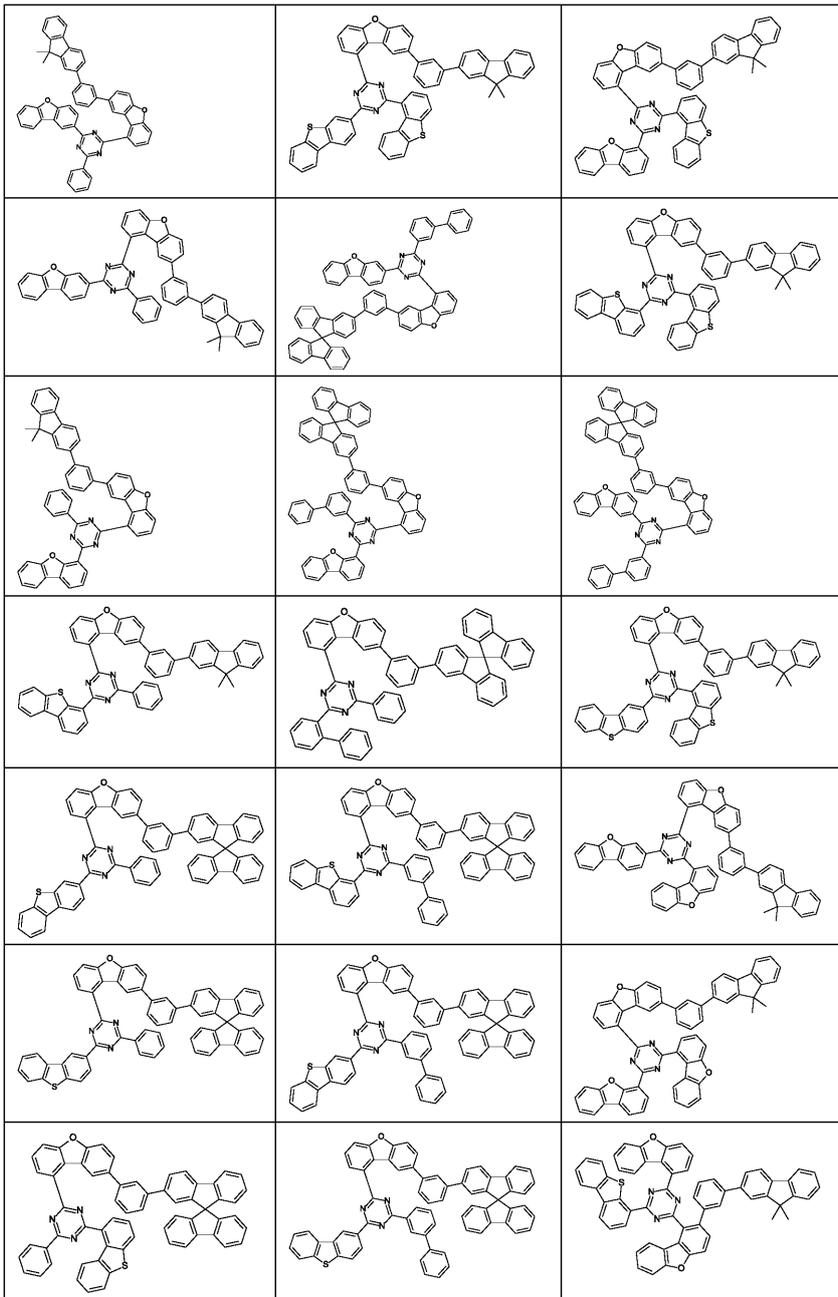
[0174]



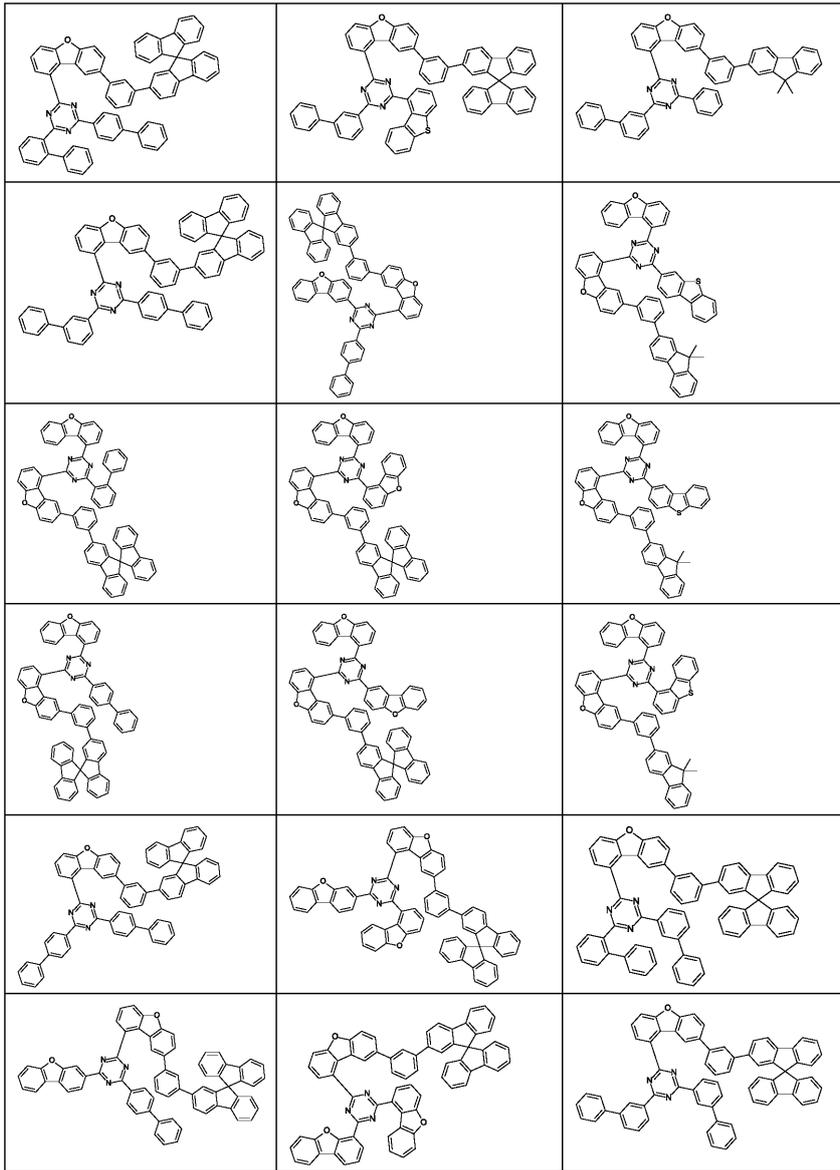
[0175]



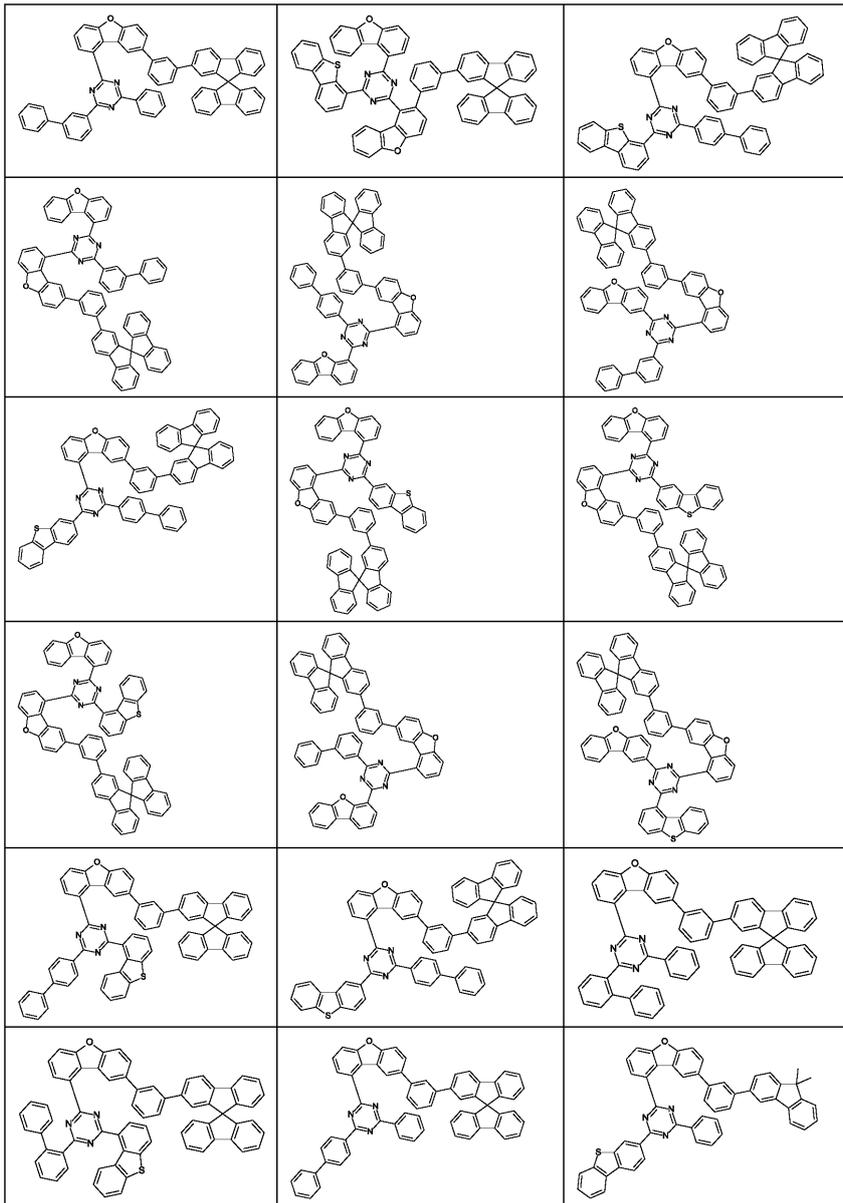
[0176]



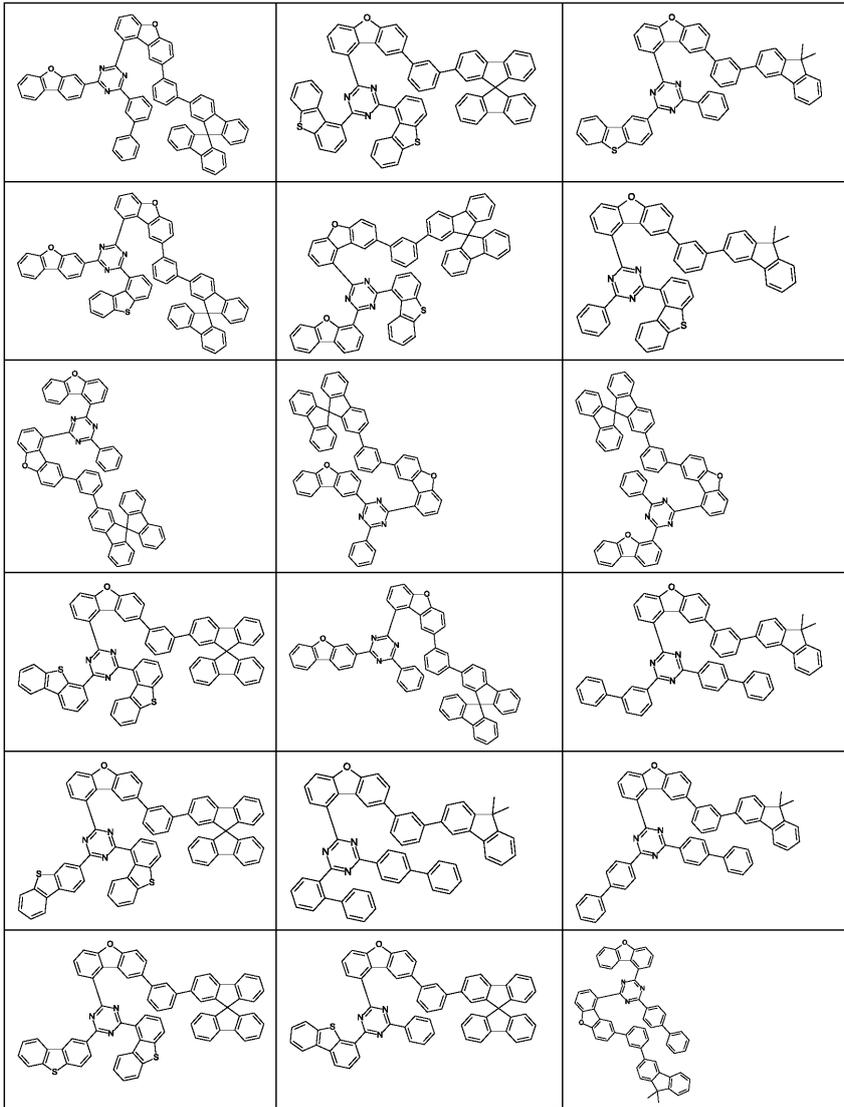
[0177]



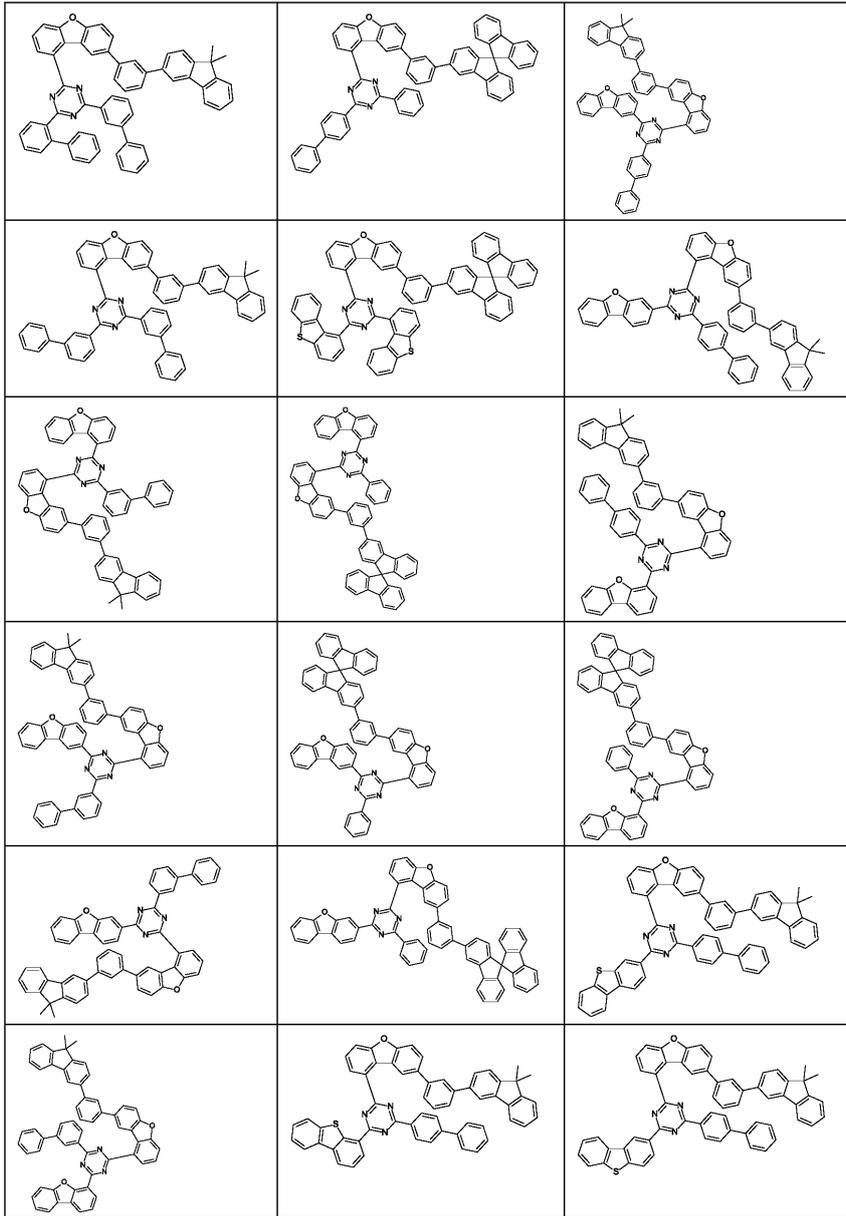
[0178]



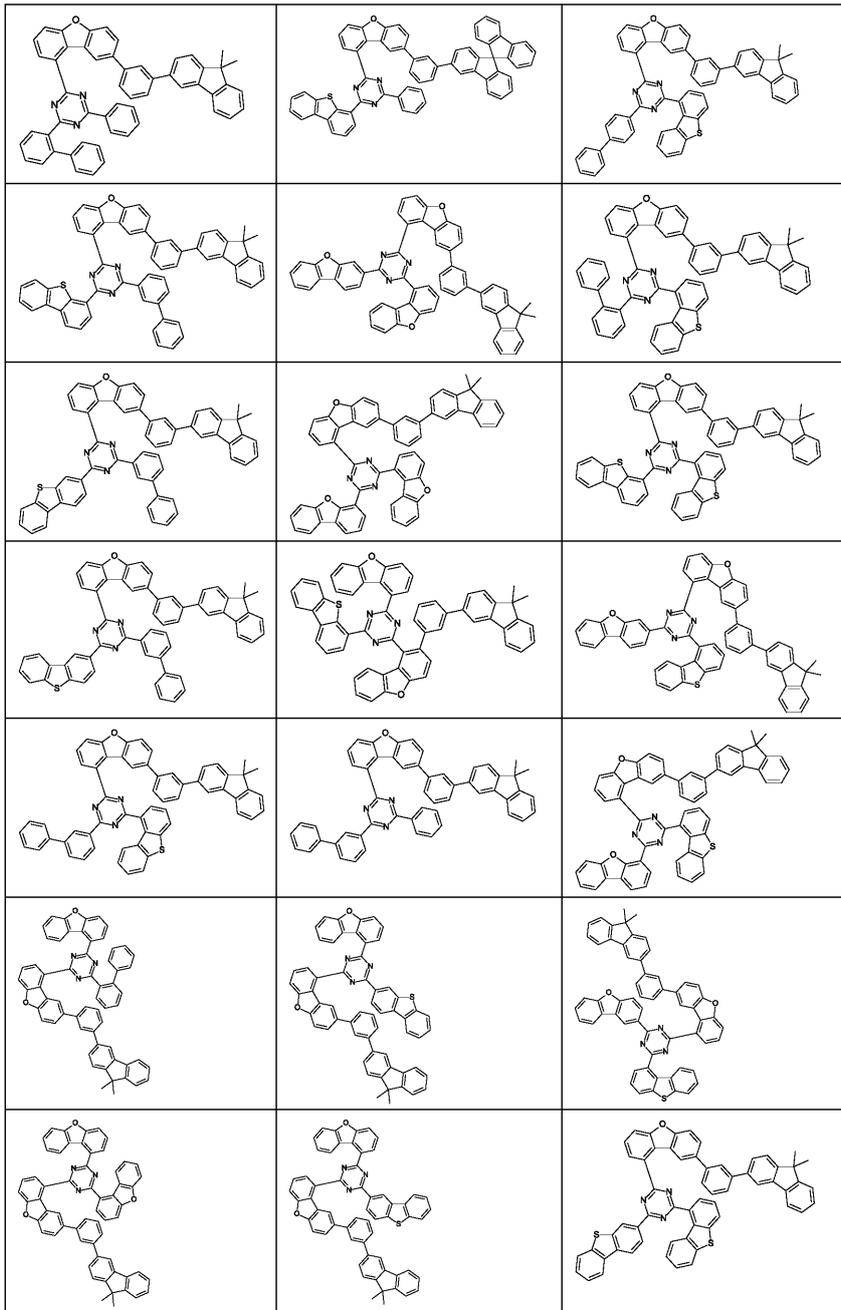
[0179]



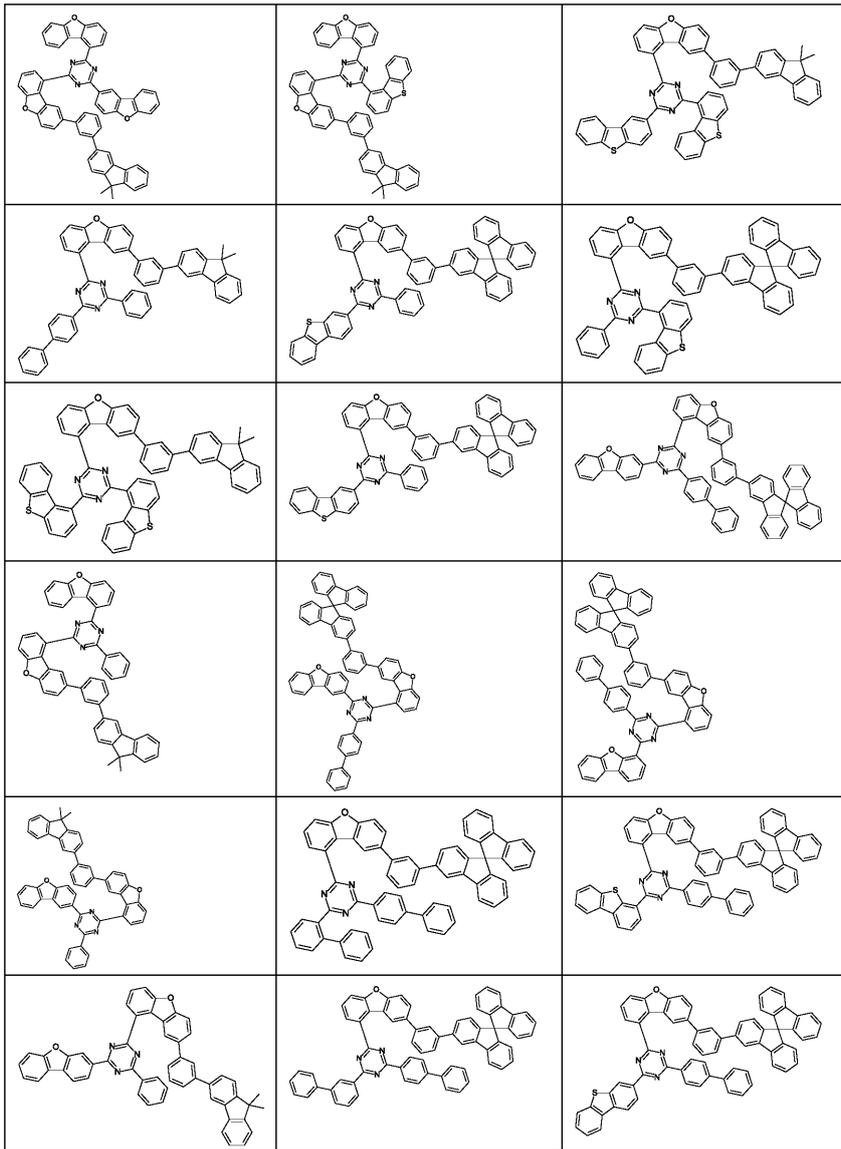
[0180]



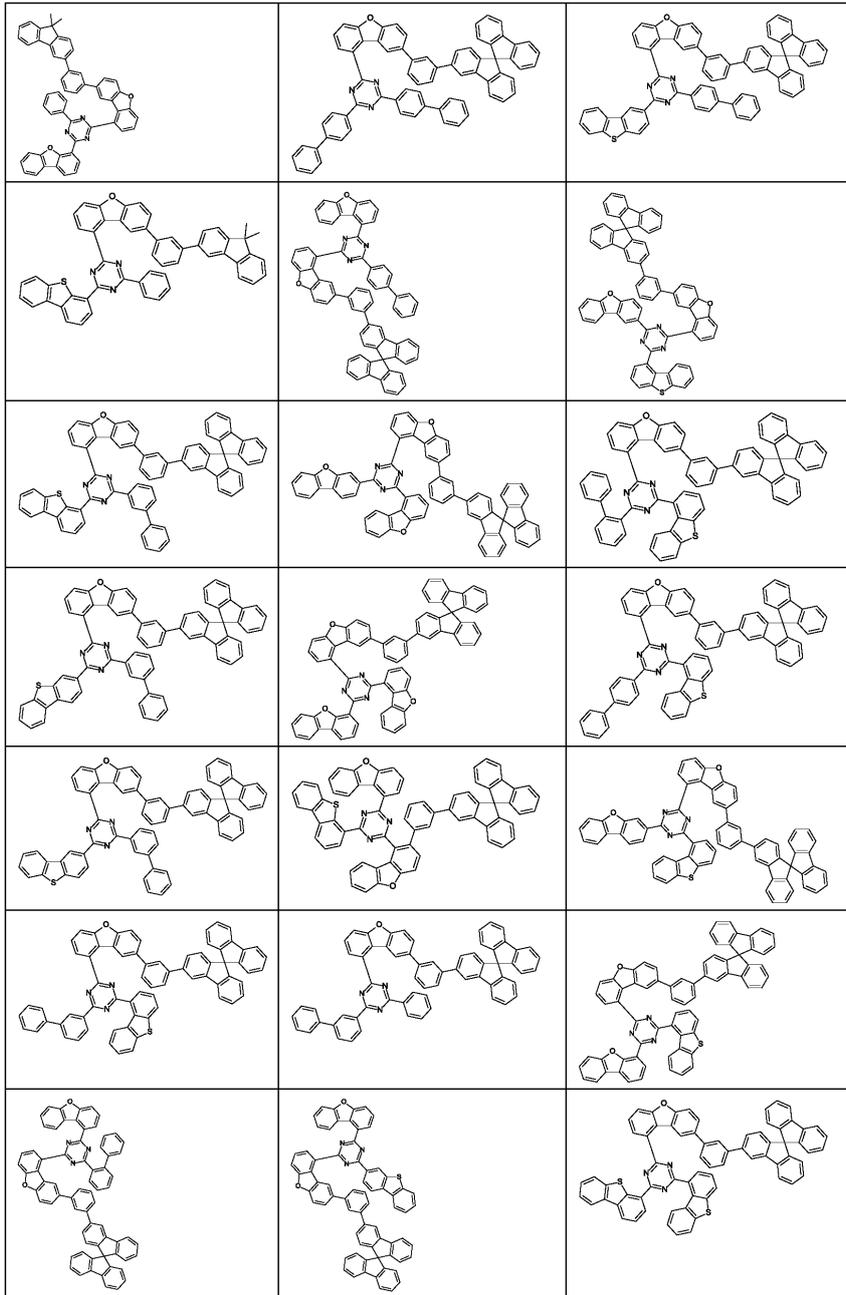
[0181]



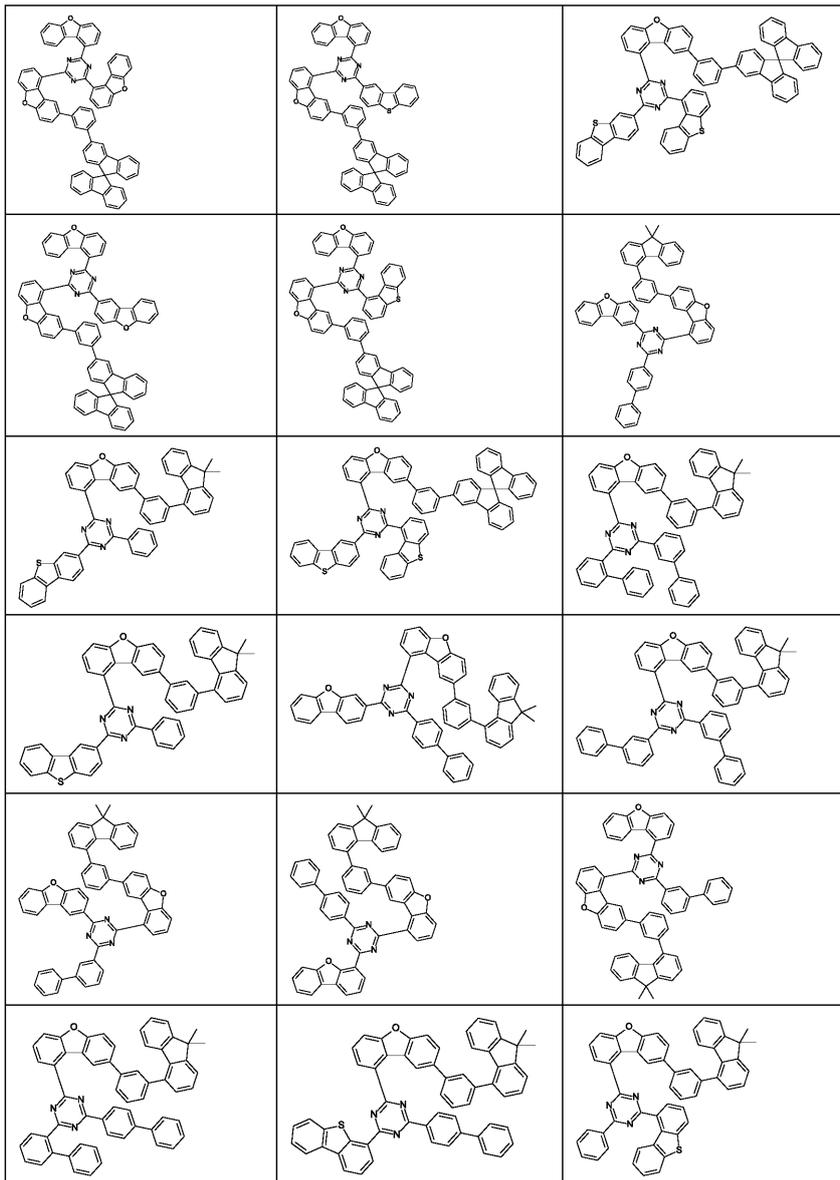
[0182]



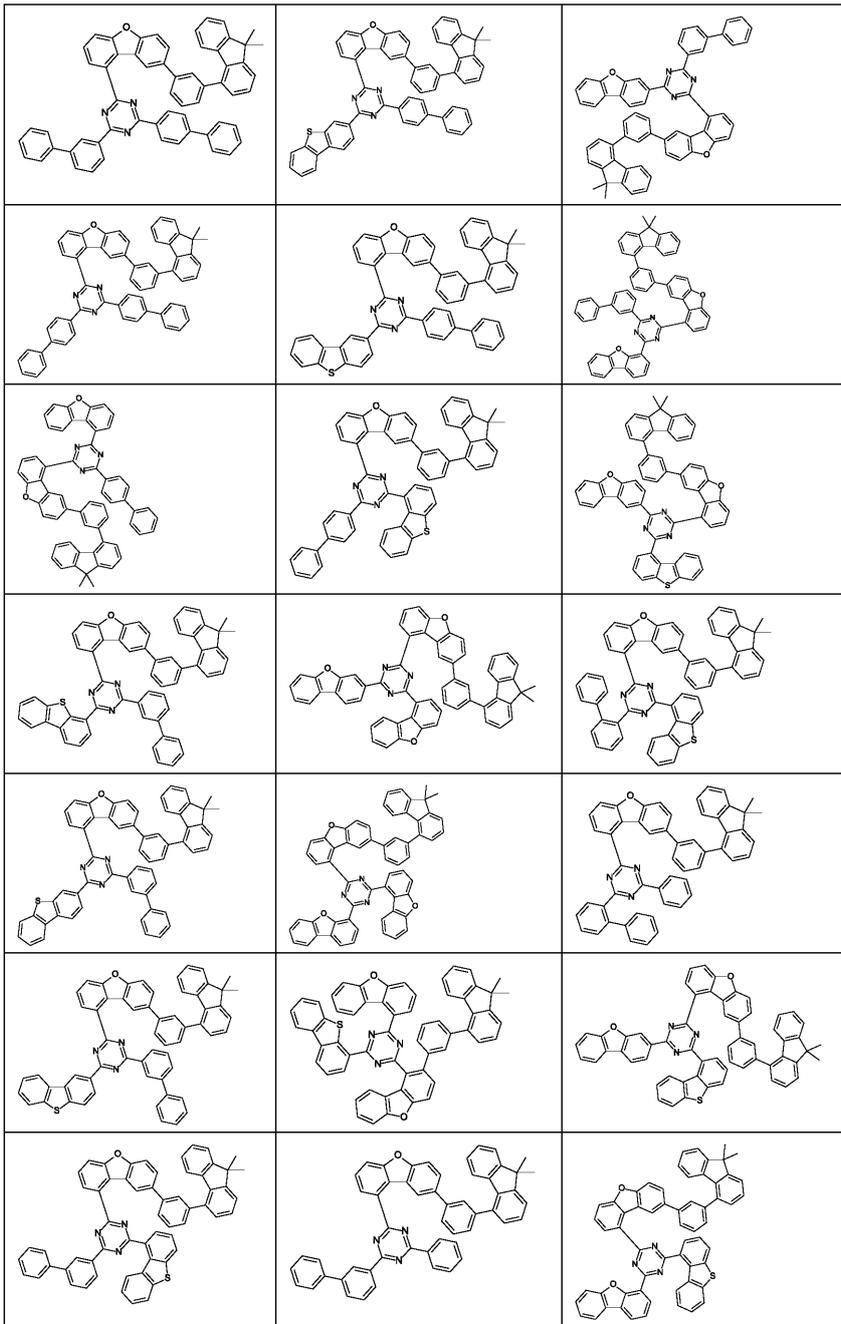
[0183]



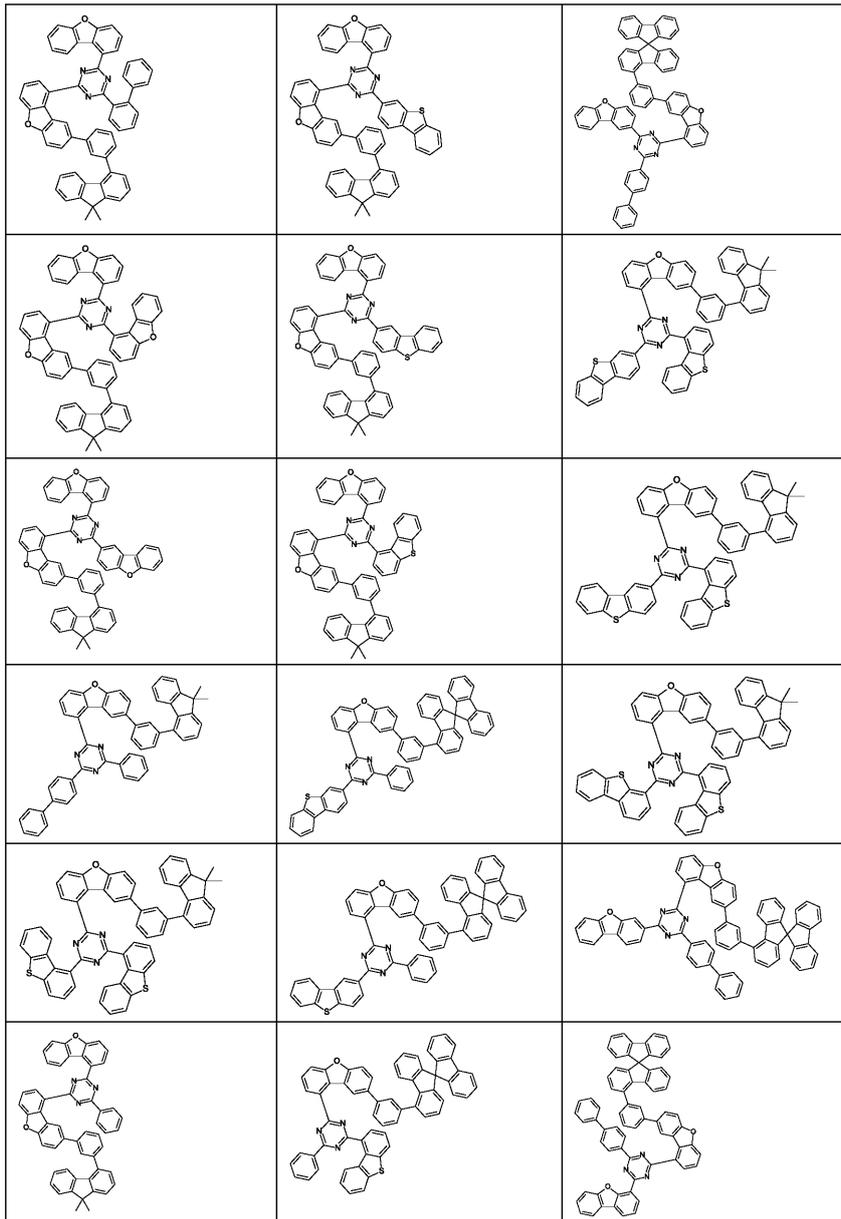
[0184]



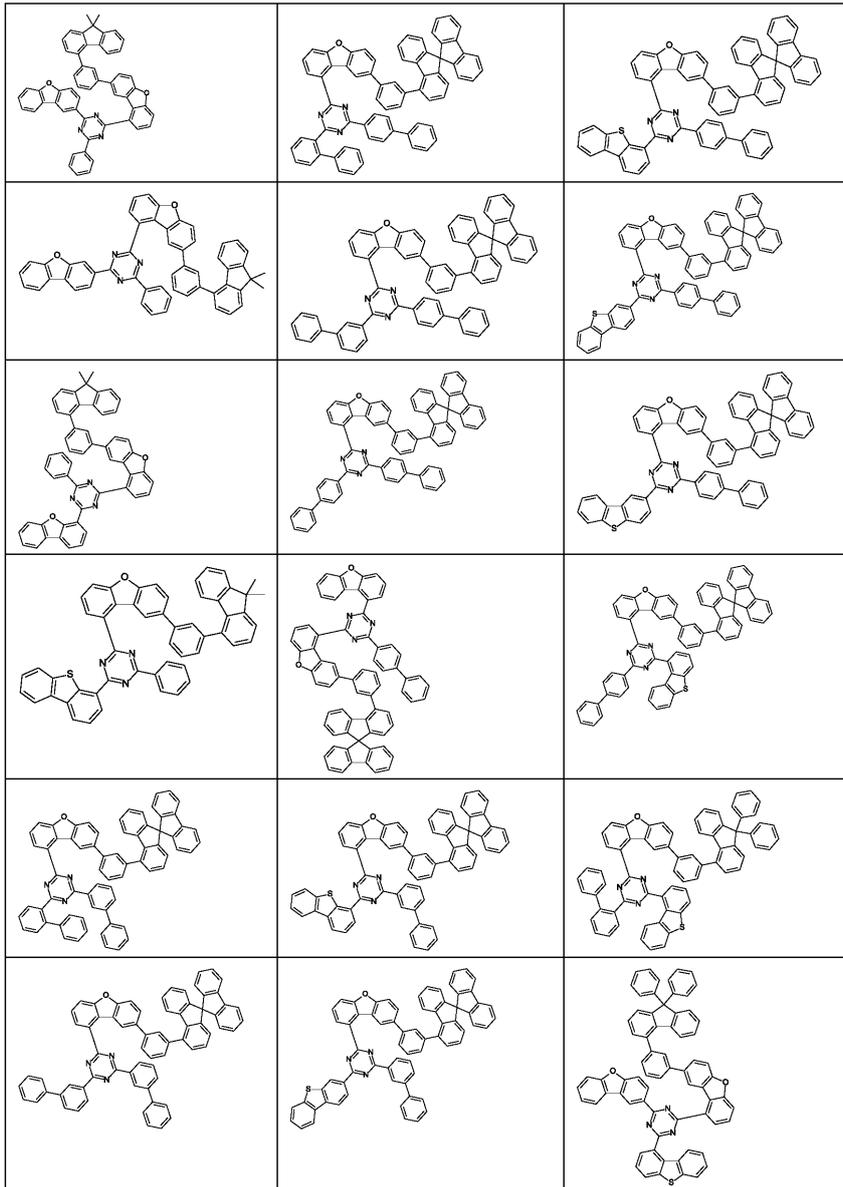
[0185]



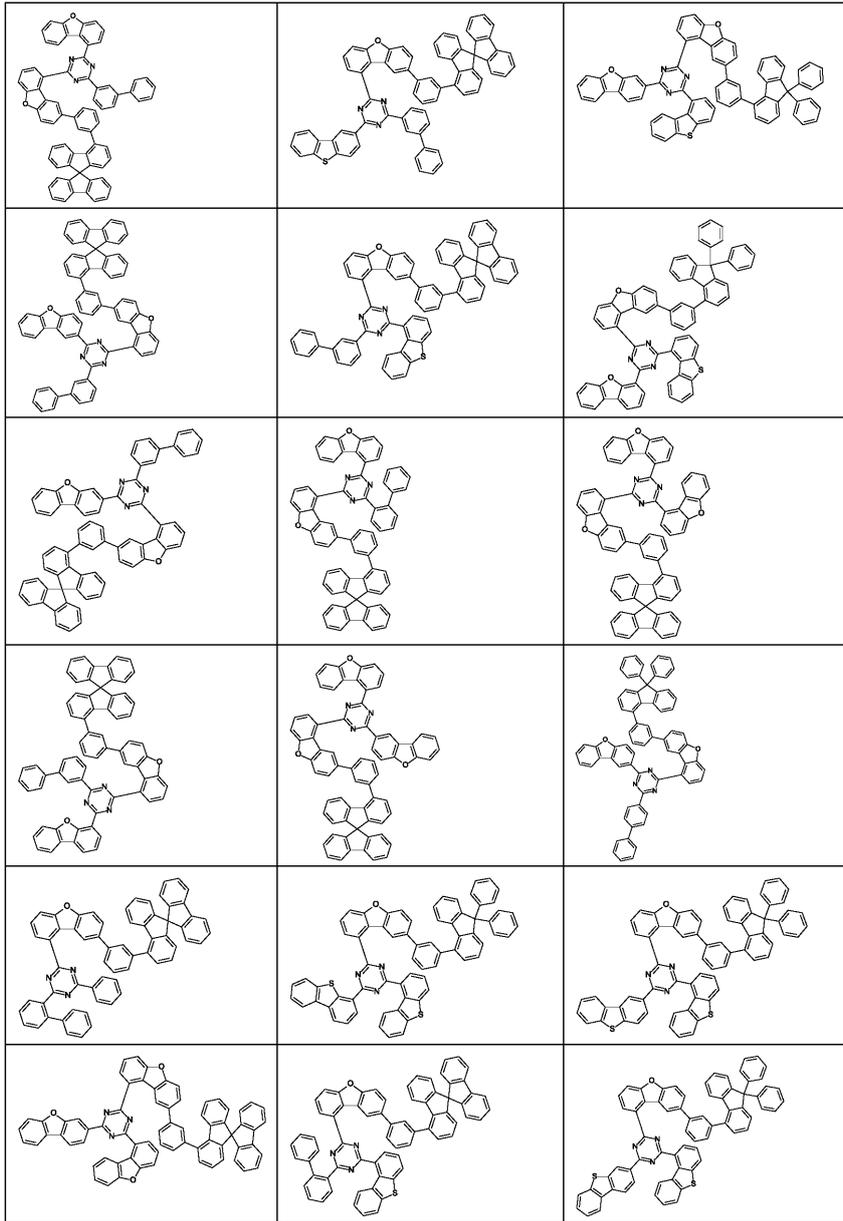
[0186]



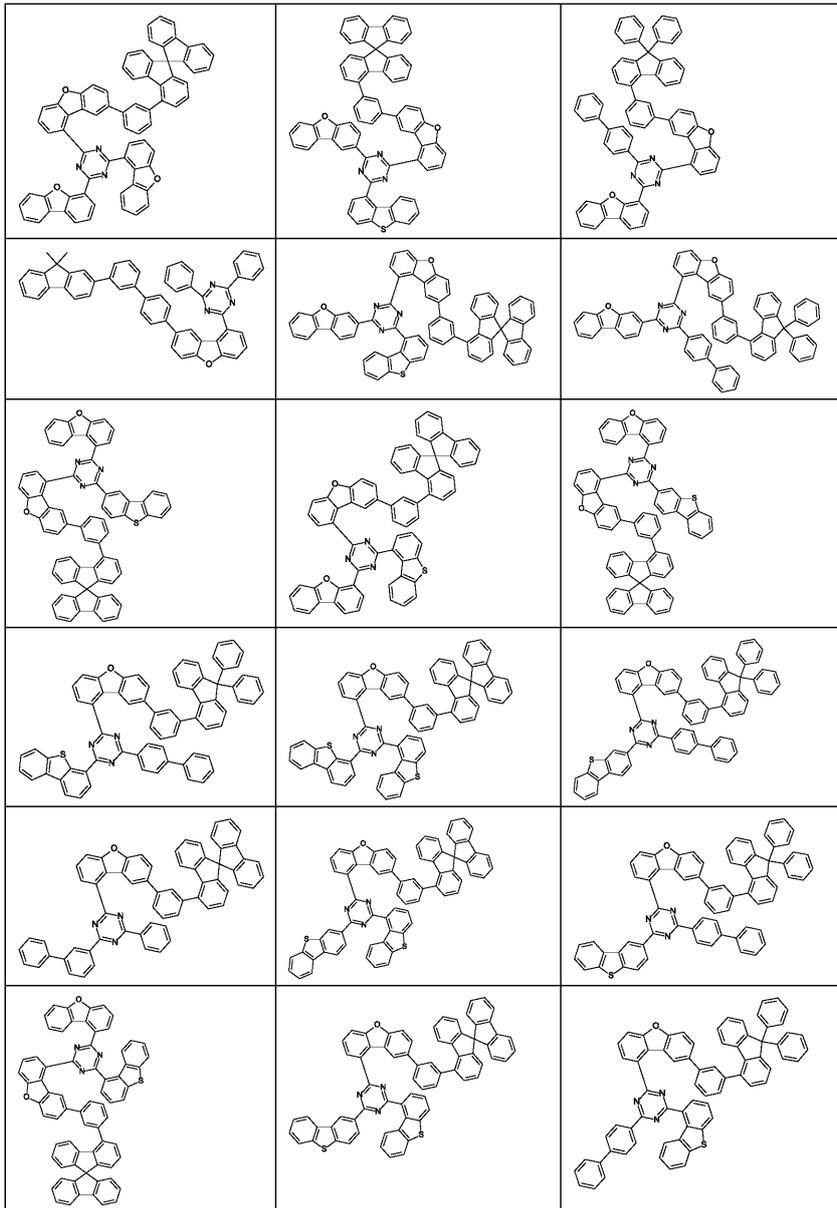
[0187]



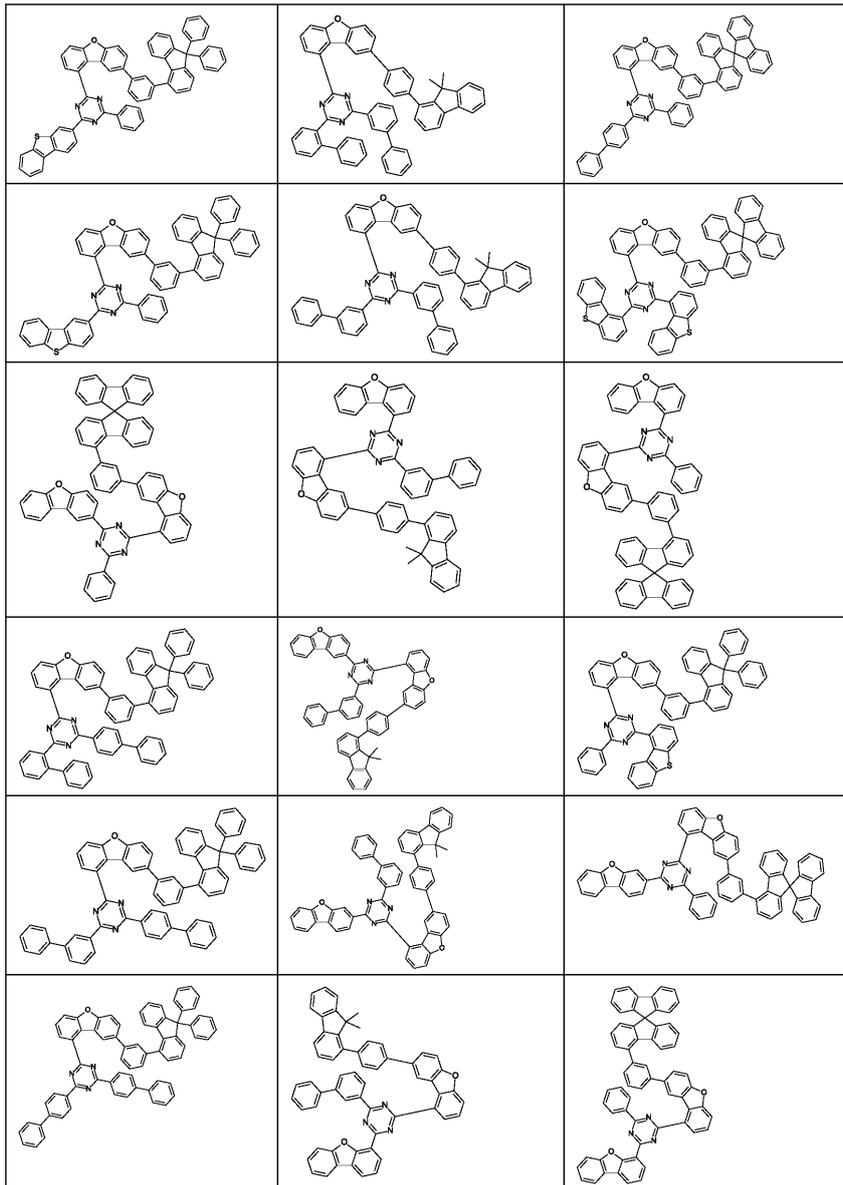
[0188]



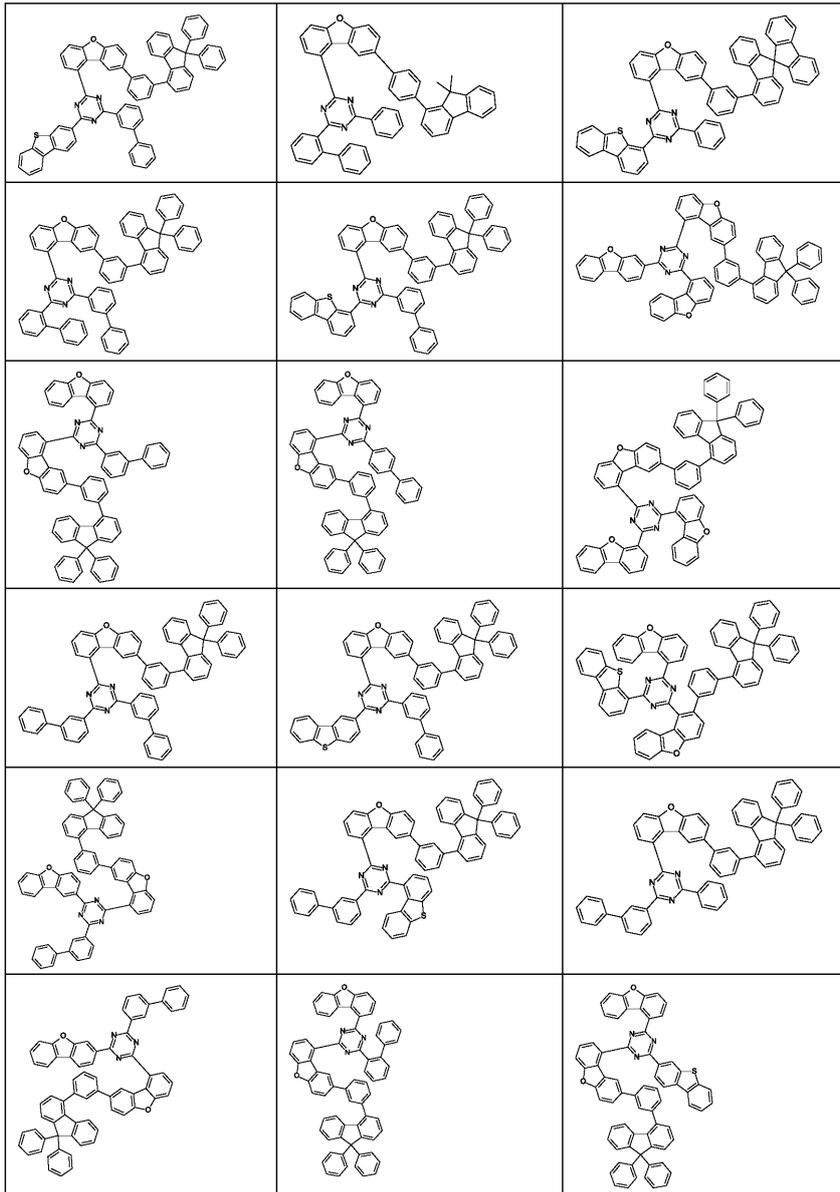
[0189]



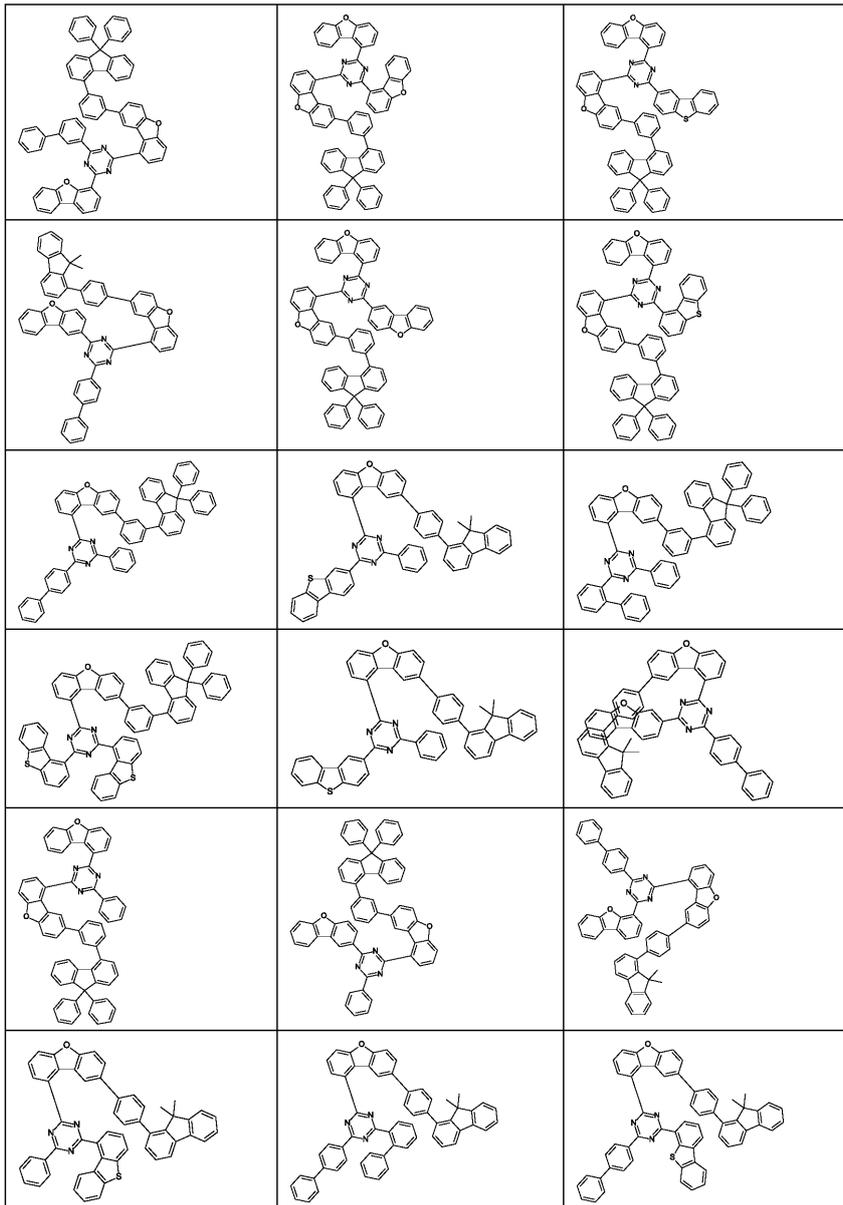
[0190]



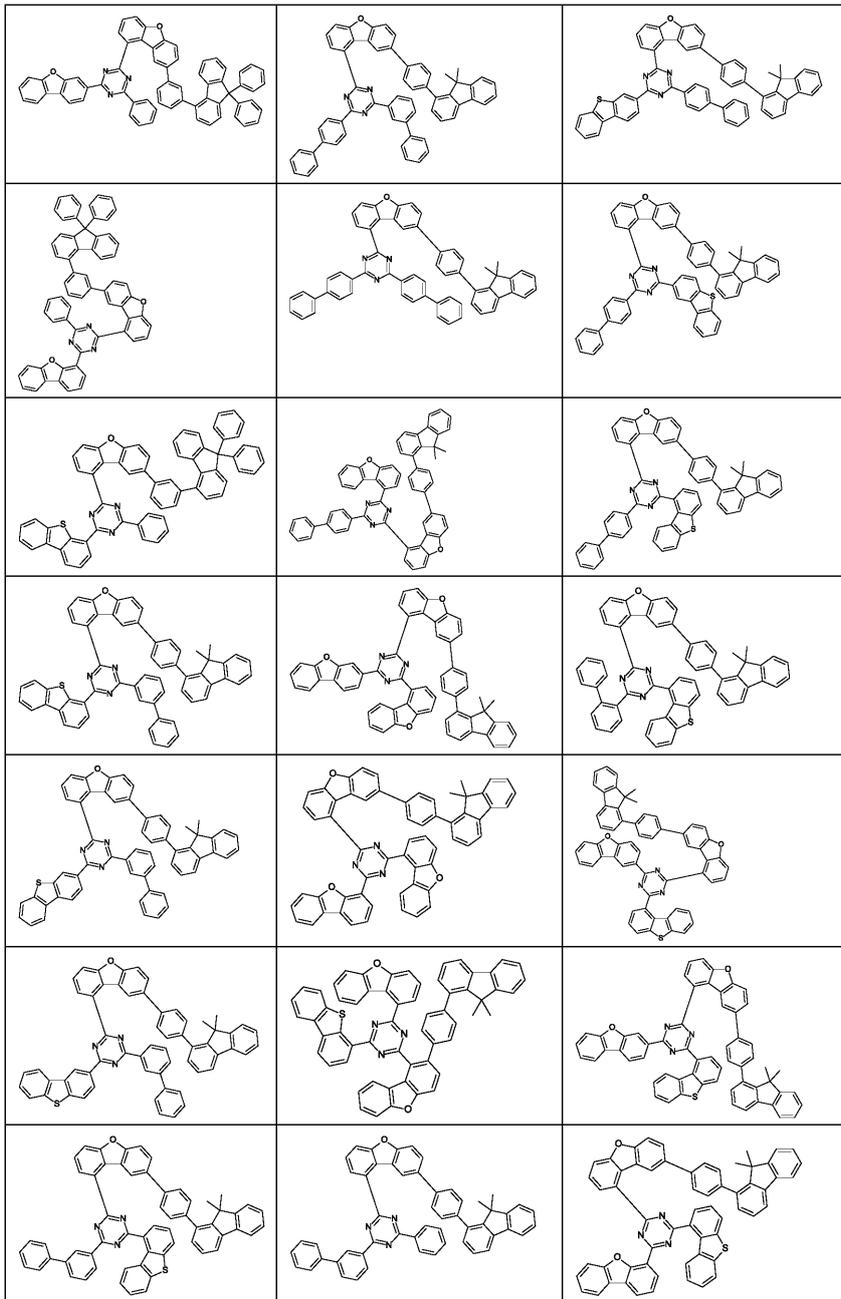
[0191]



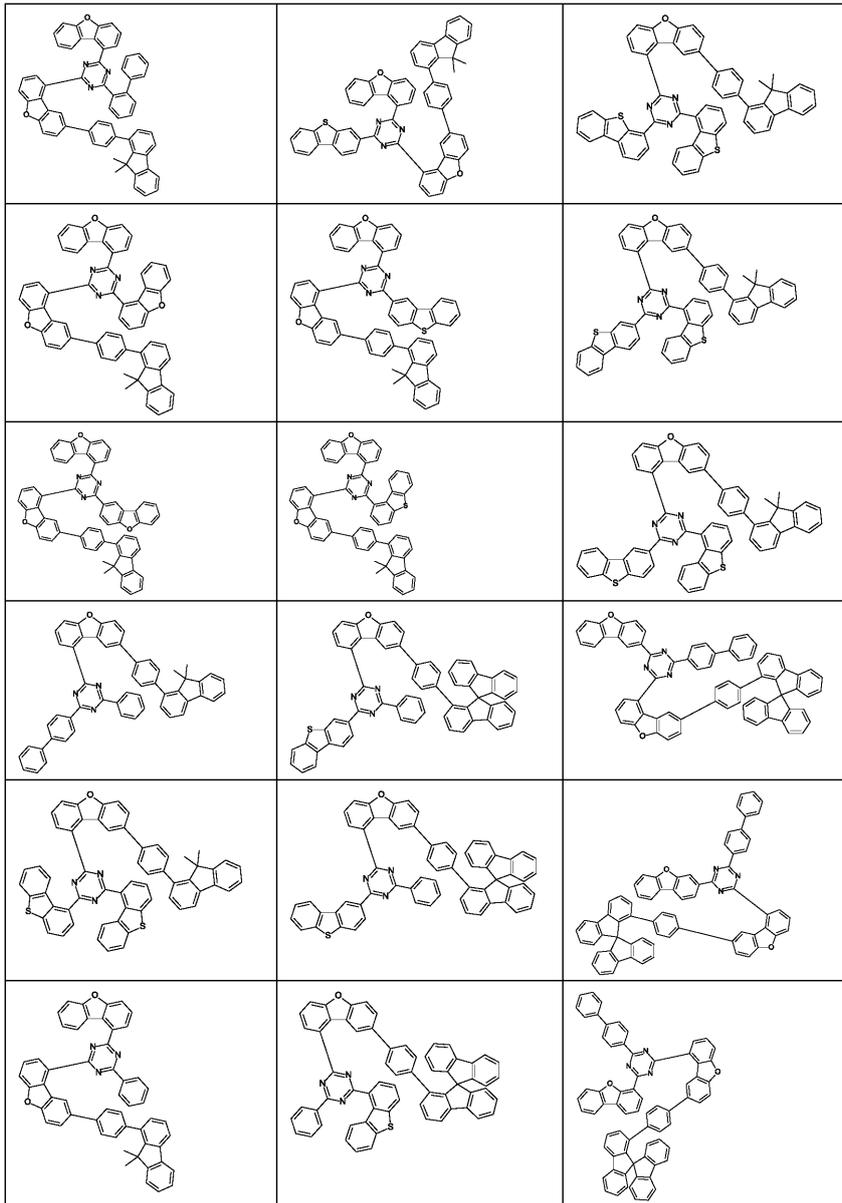
[0192]



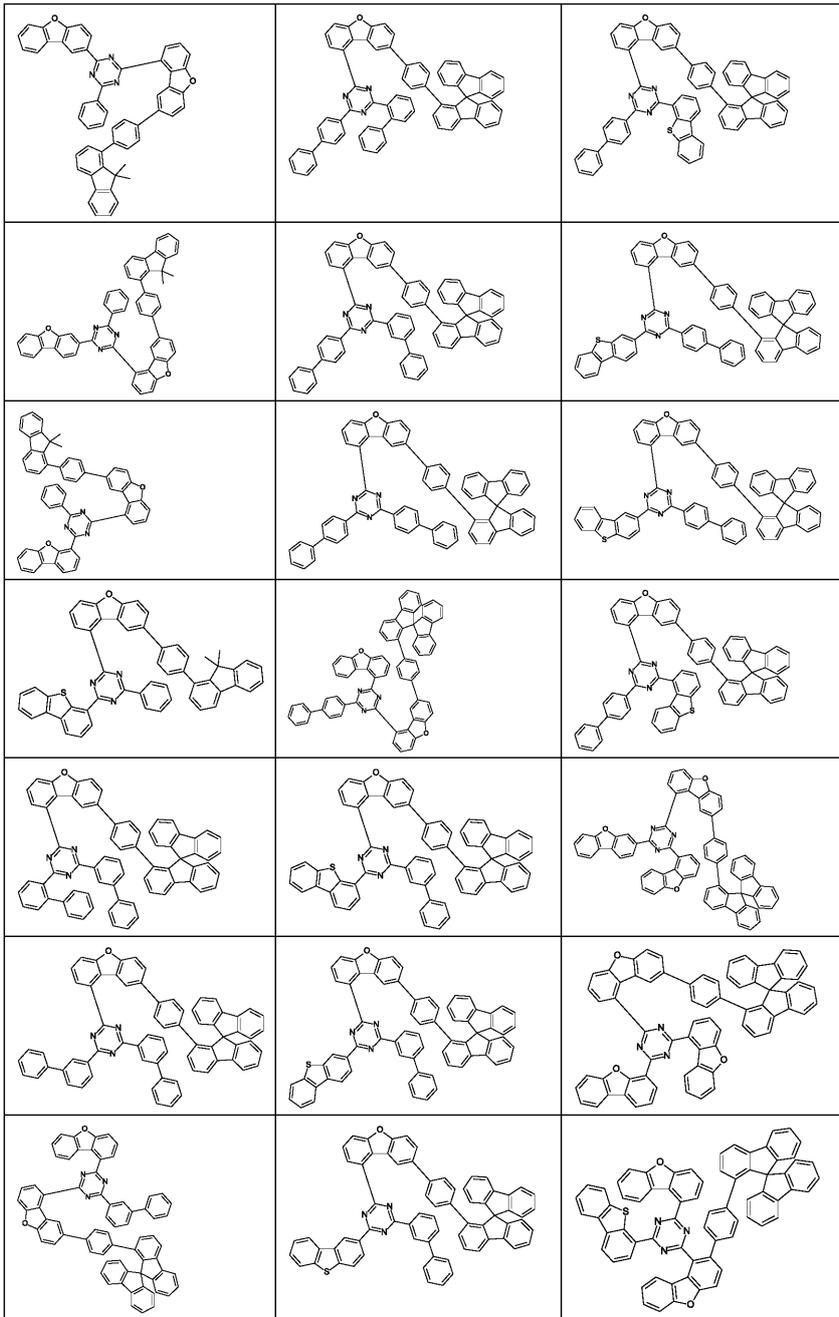
[0193]



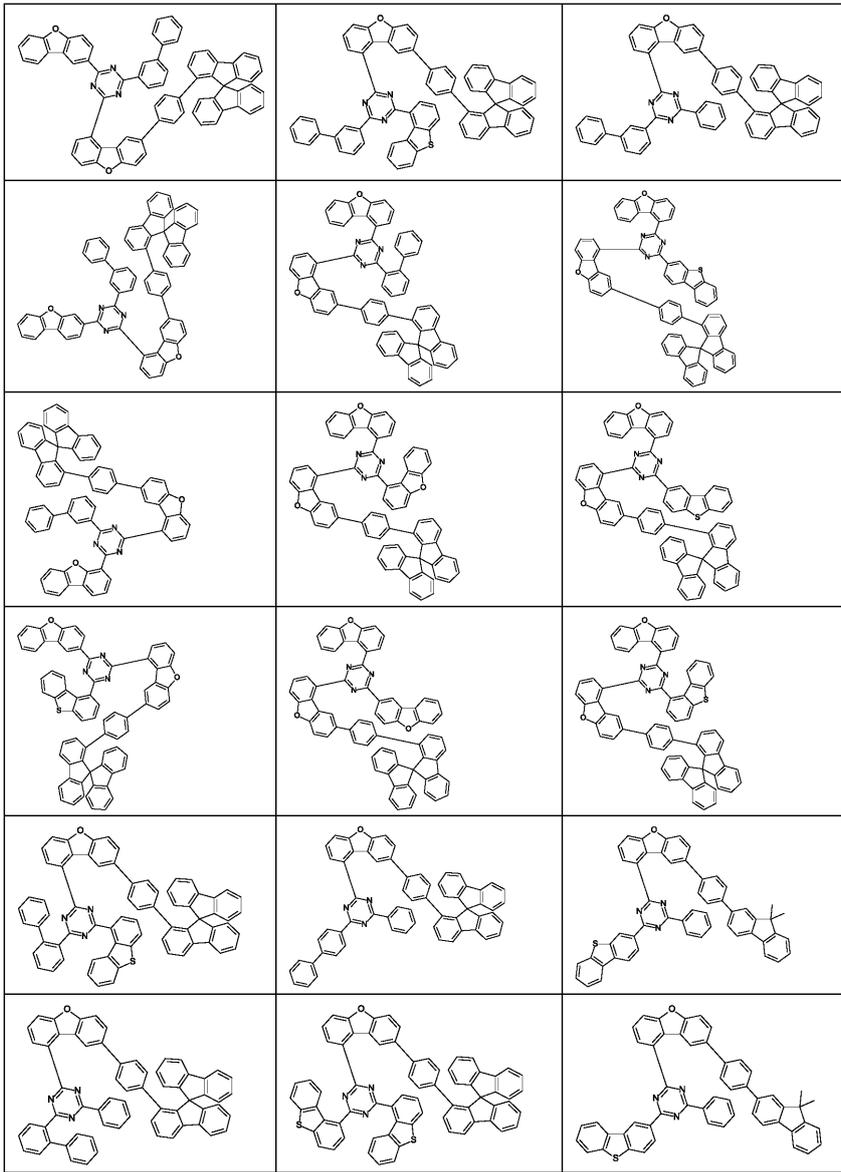
[0194]



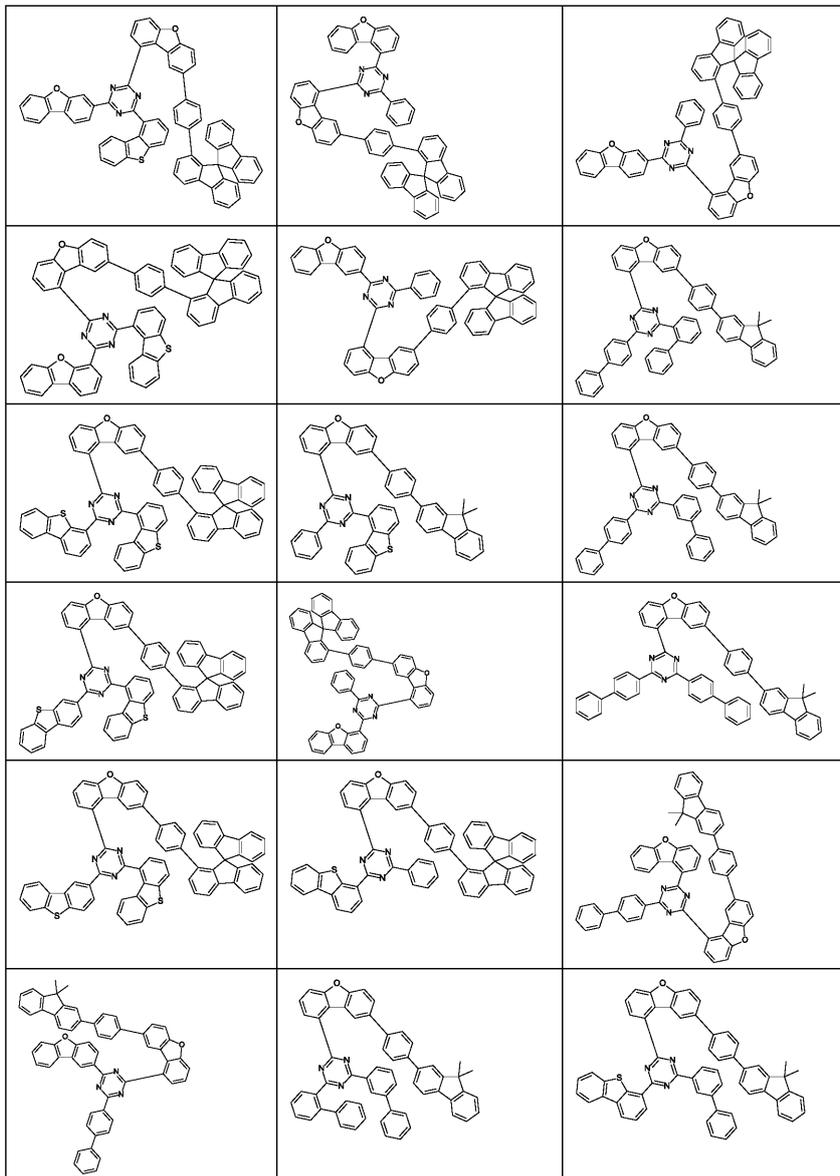
[0195]



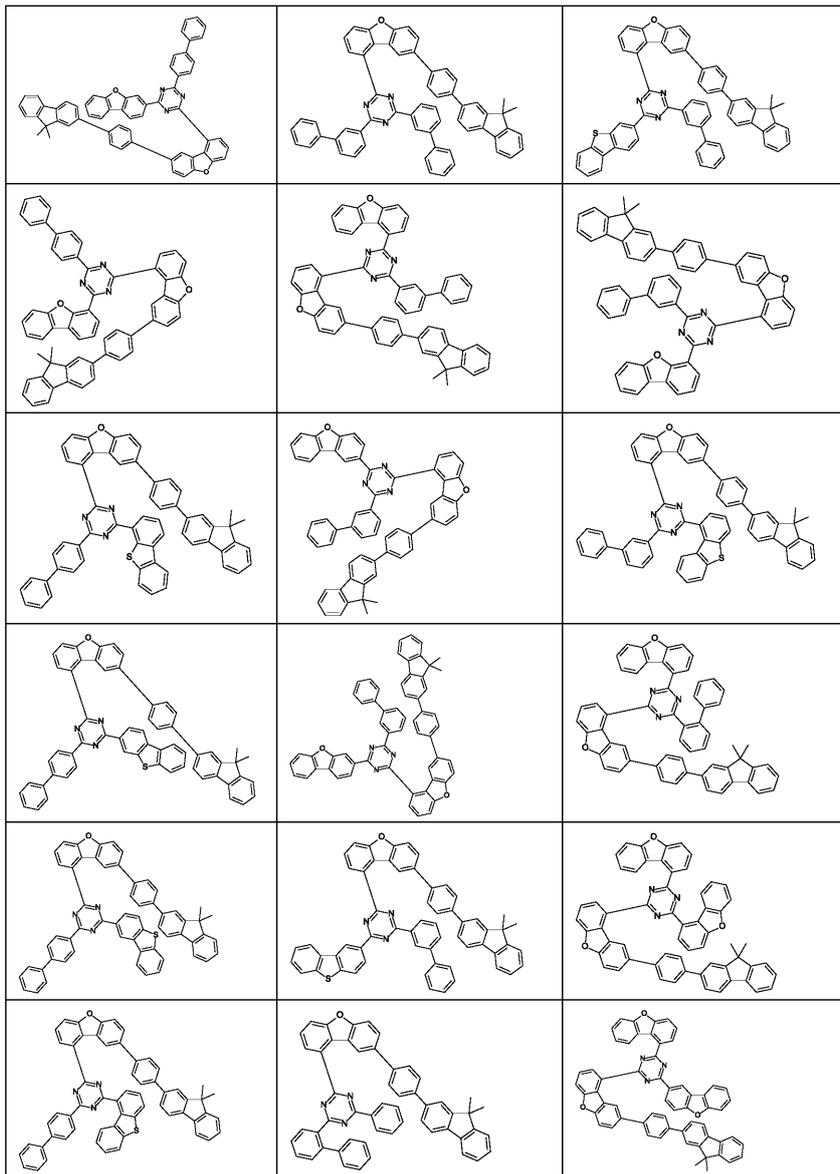
[0196]



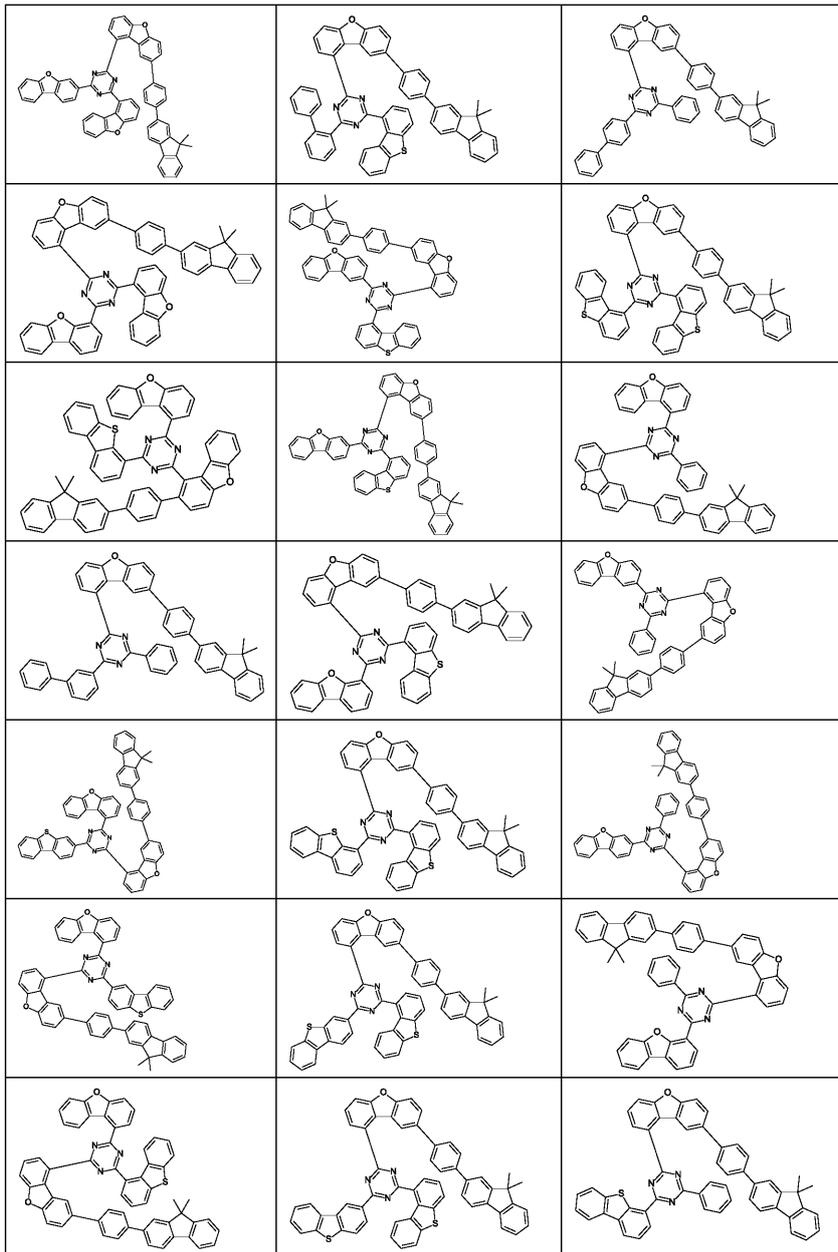
[0197]



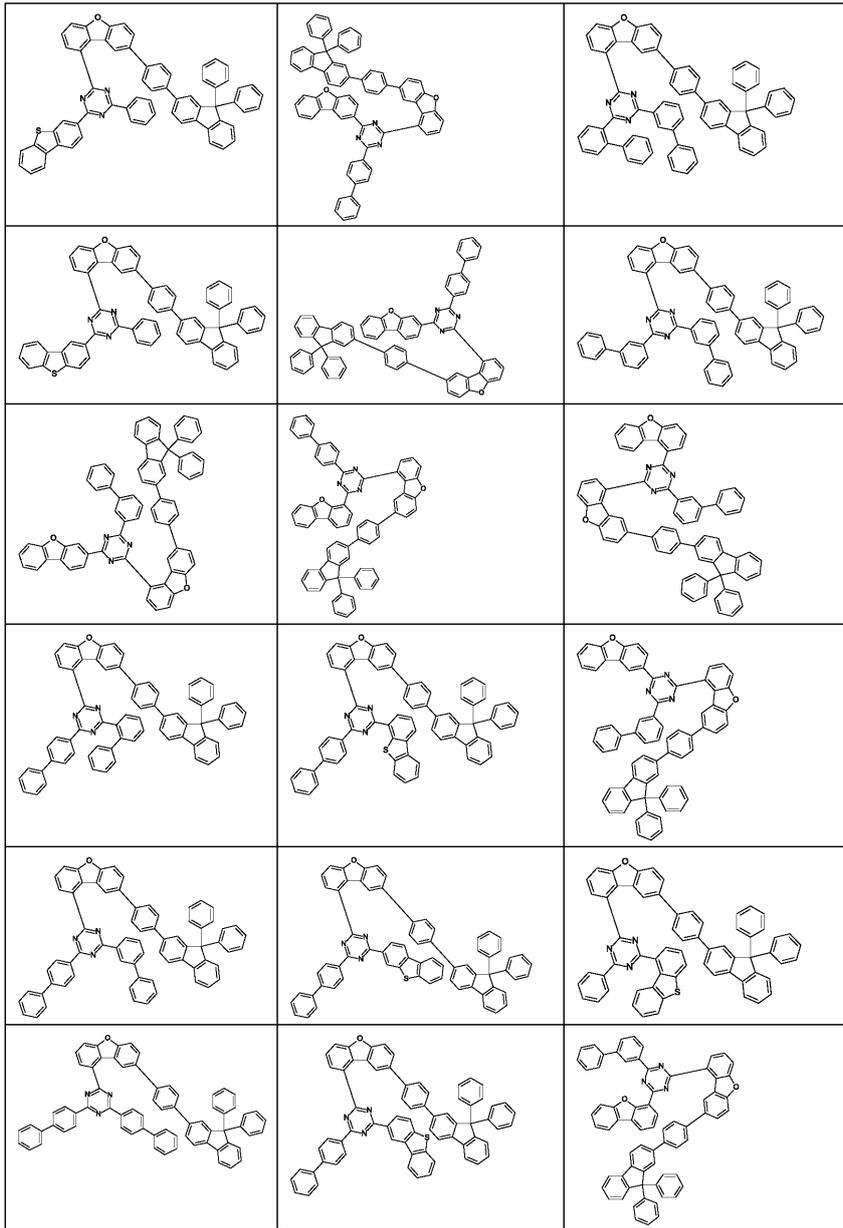
[0198]



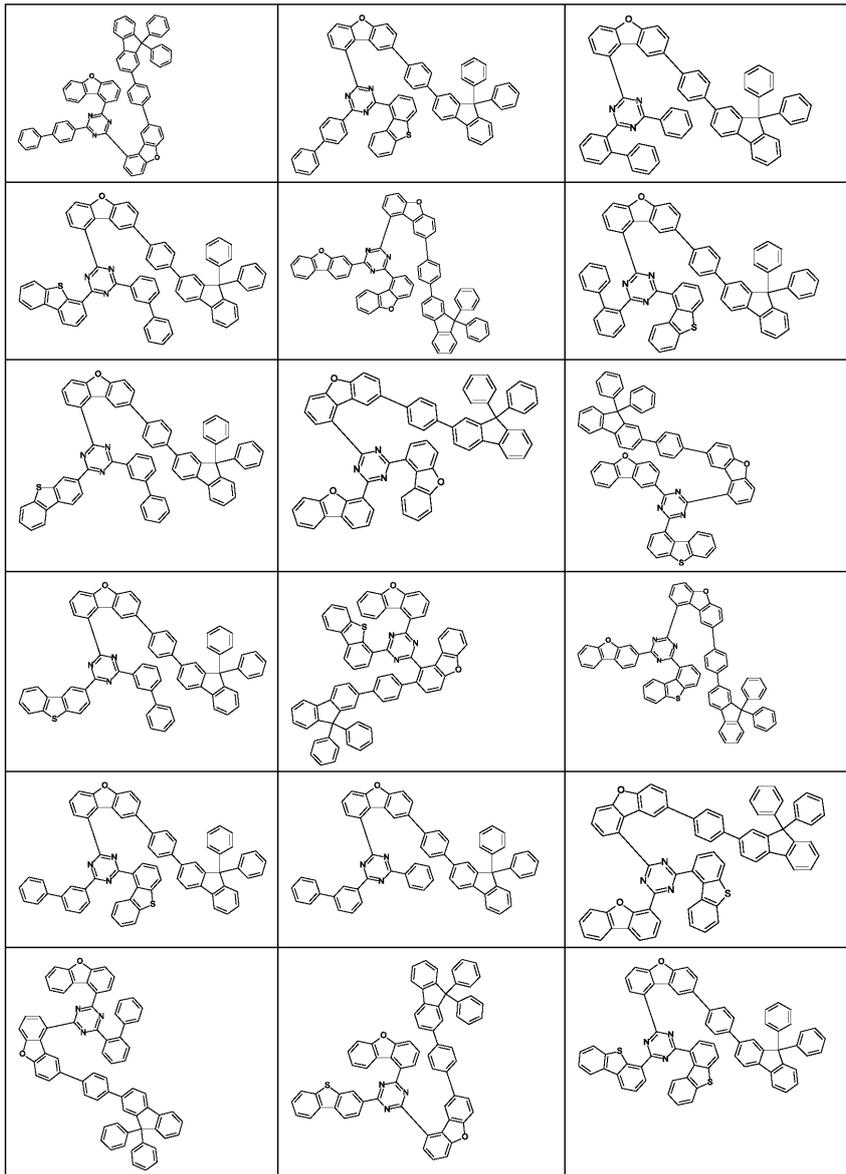
[0199]



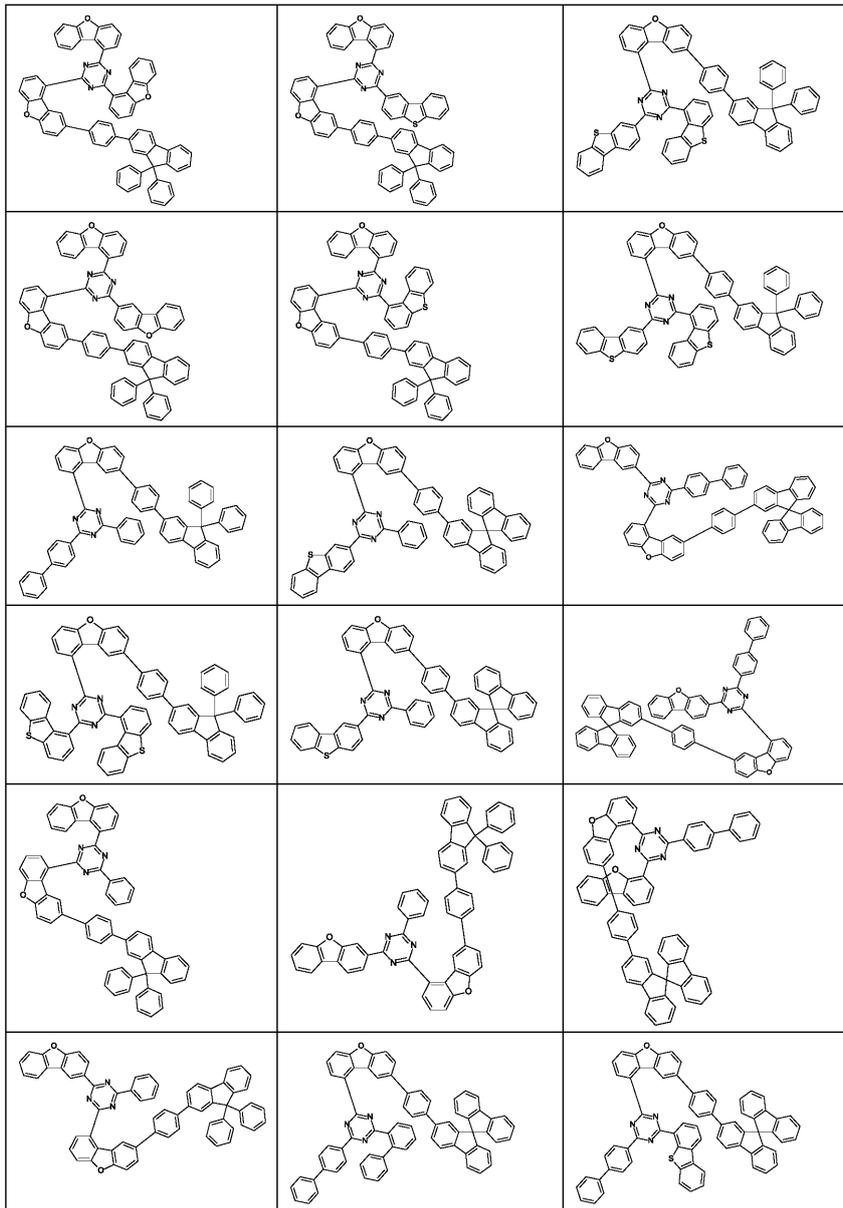
[0200]



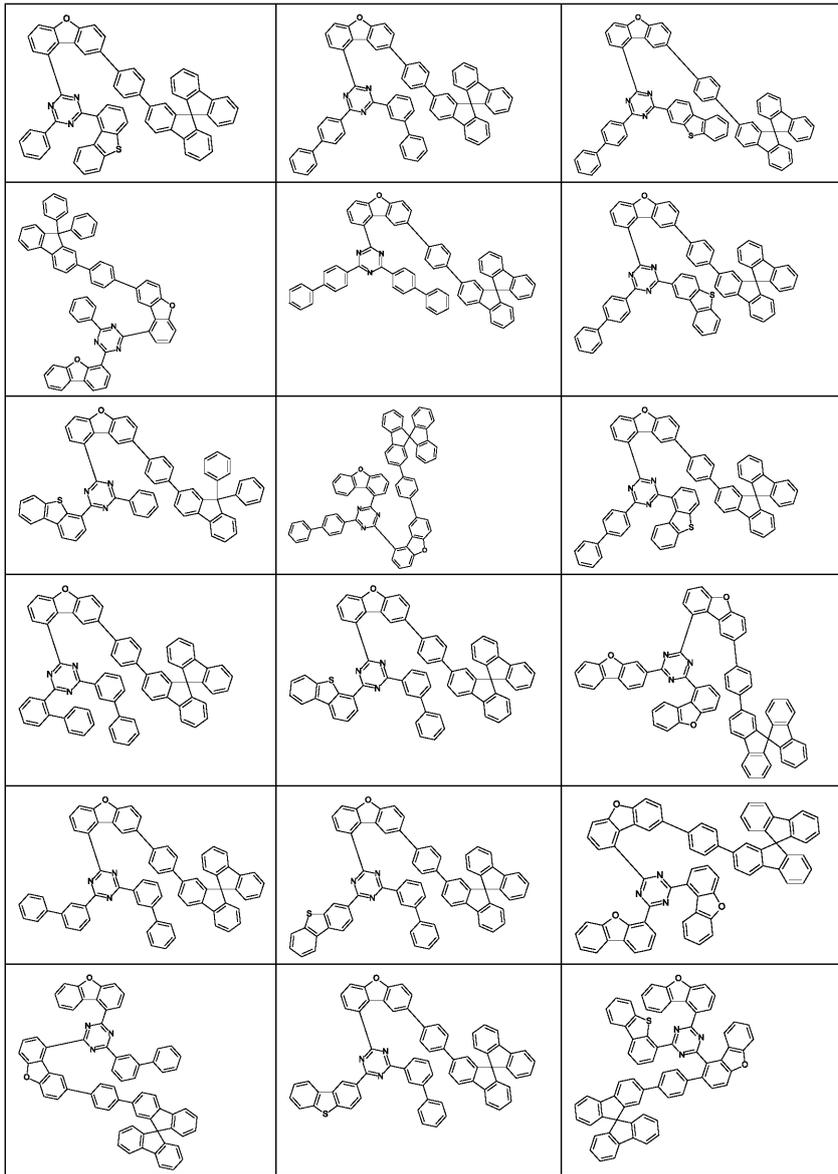
[0201]



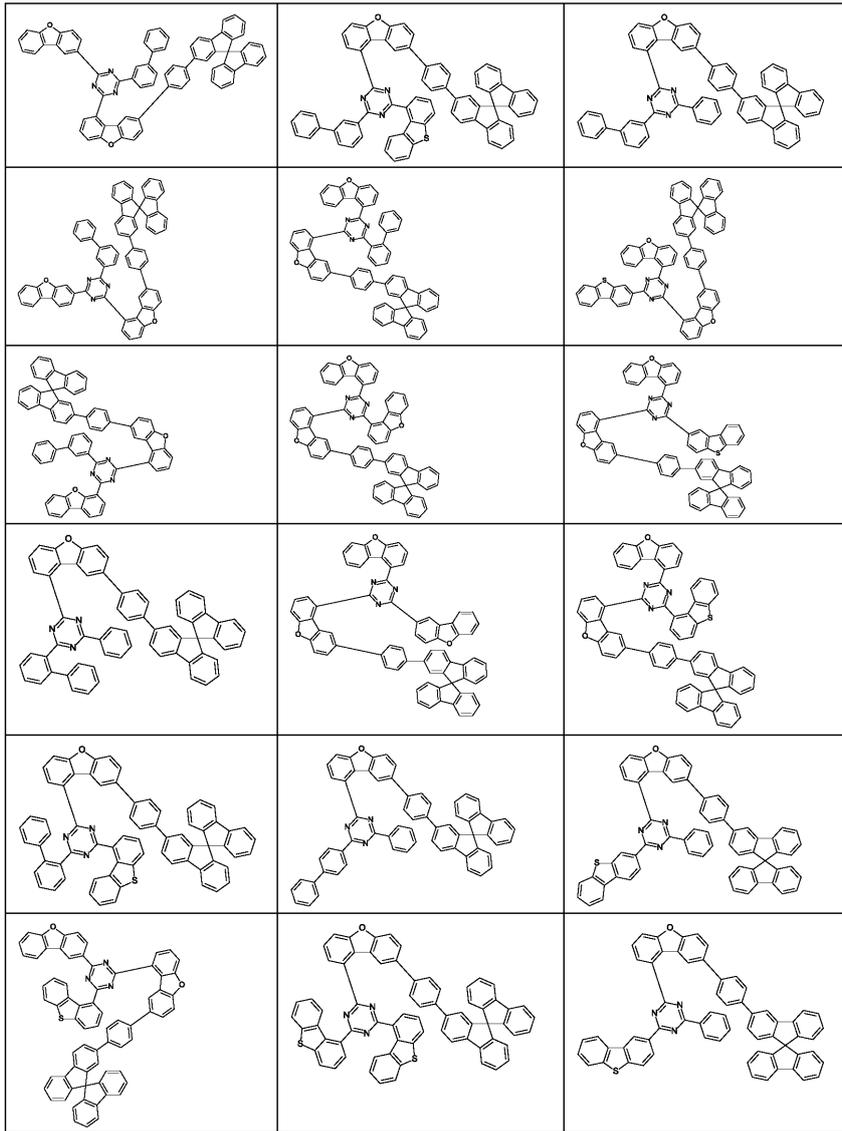
[0202]



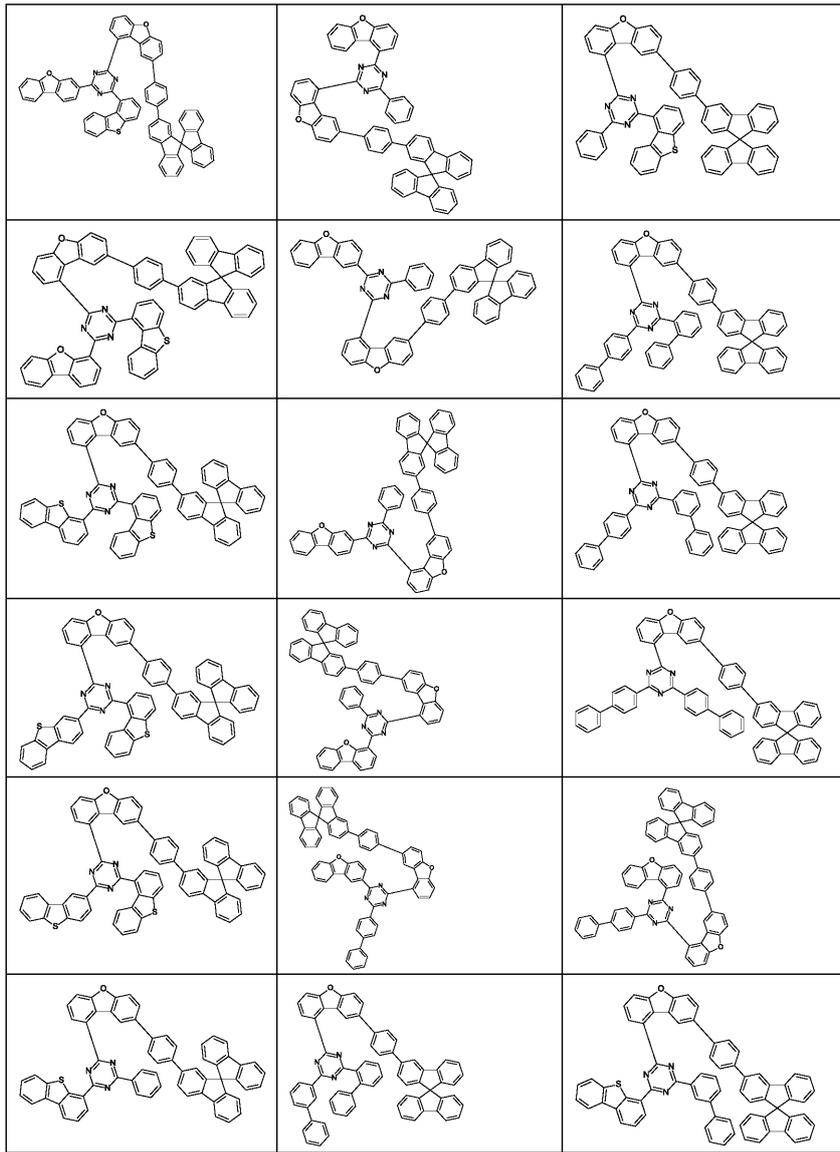
[0203]



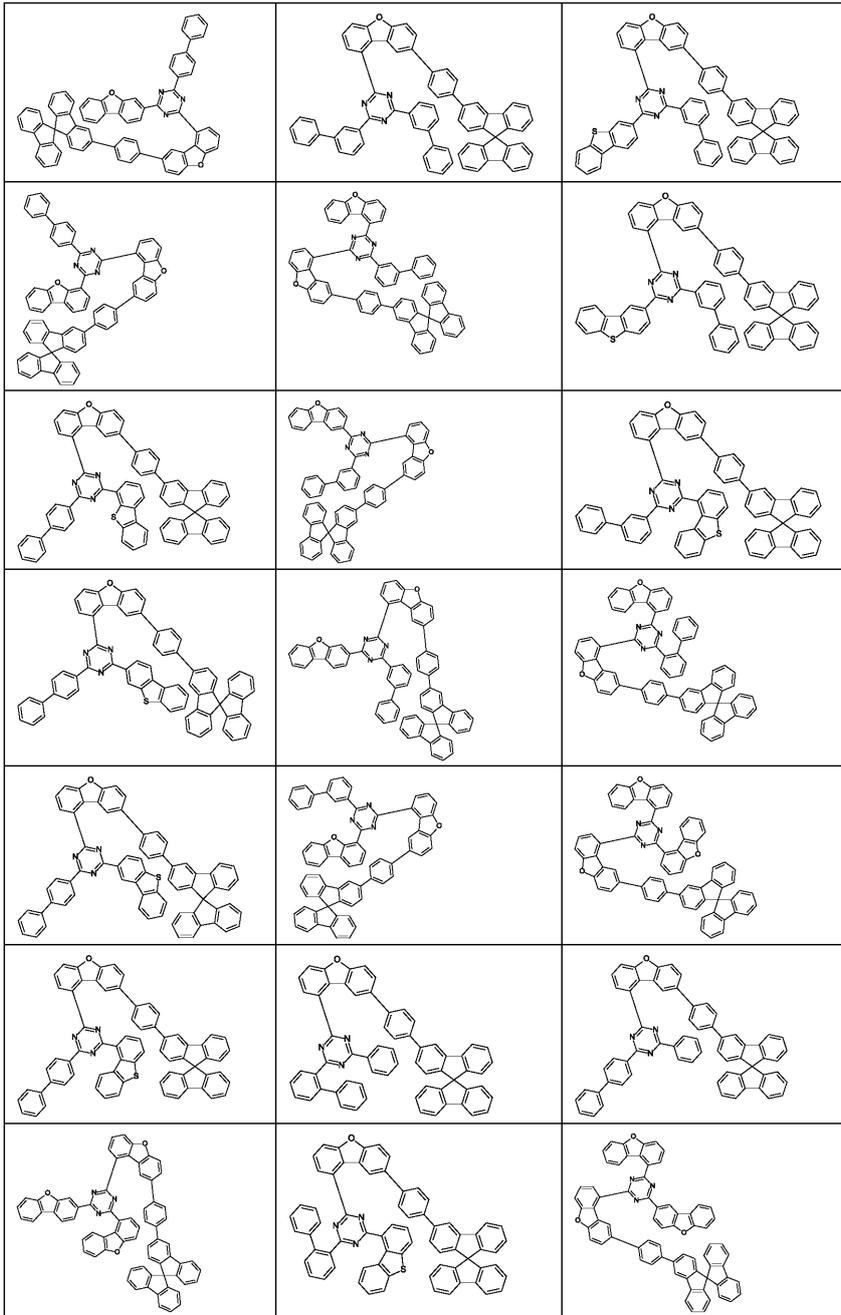
[0204]



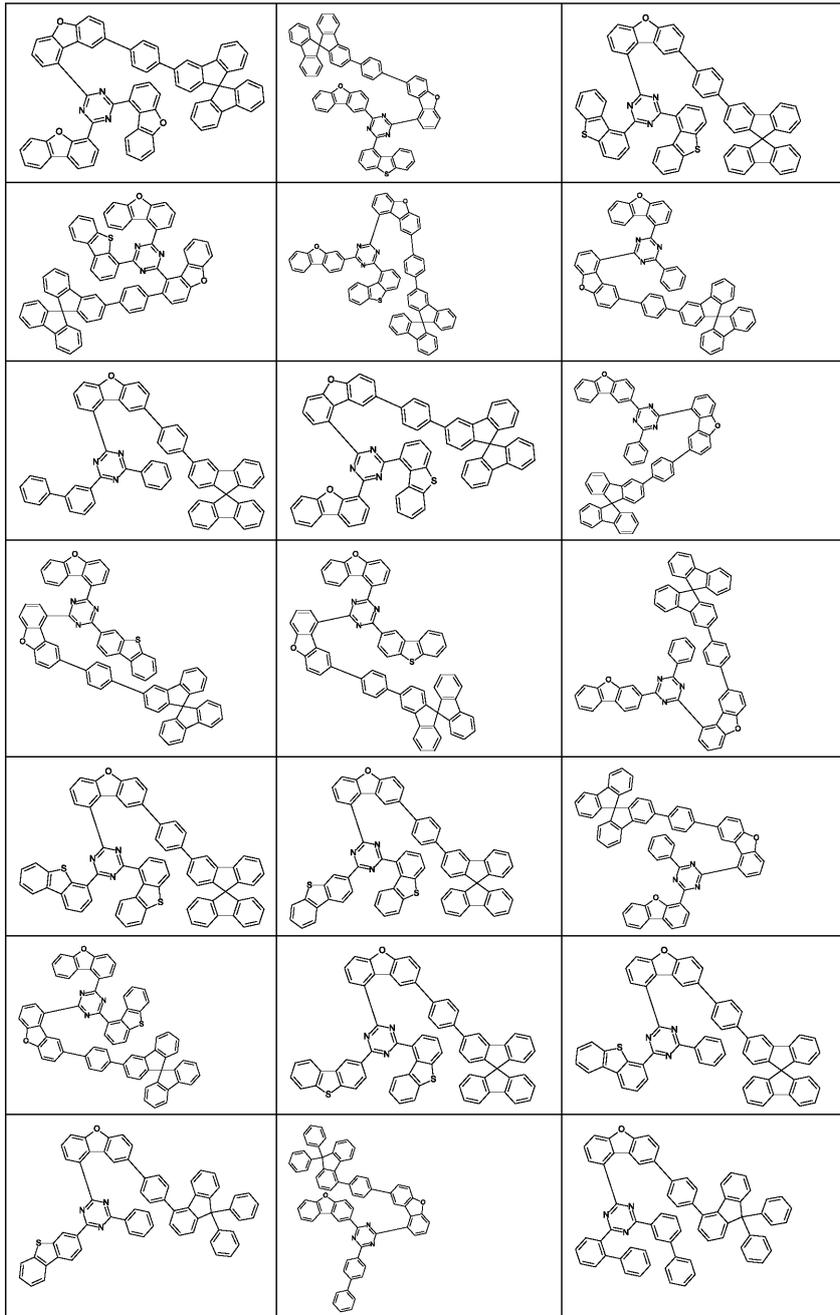
[0205]



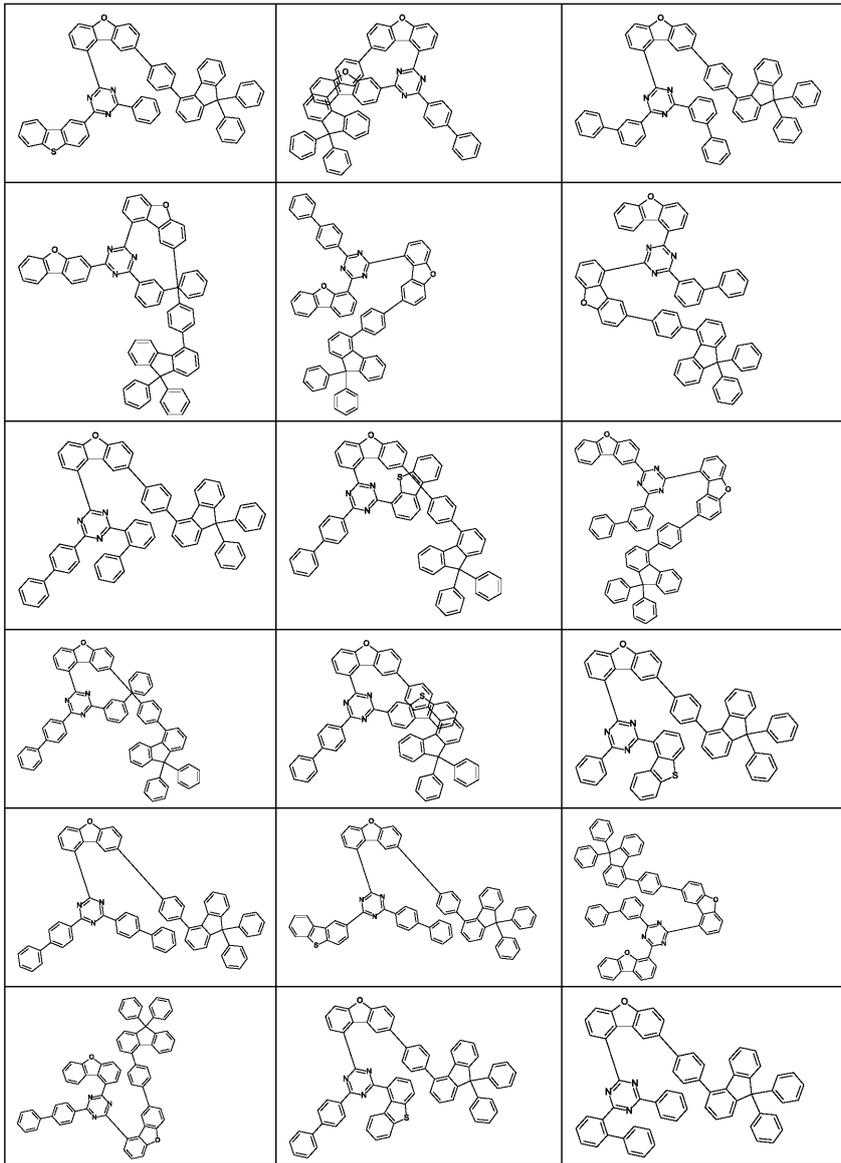
[0206]



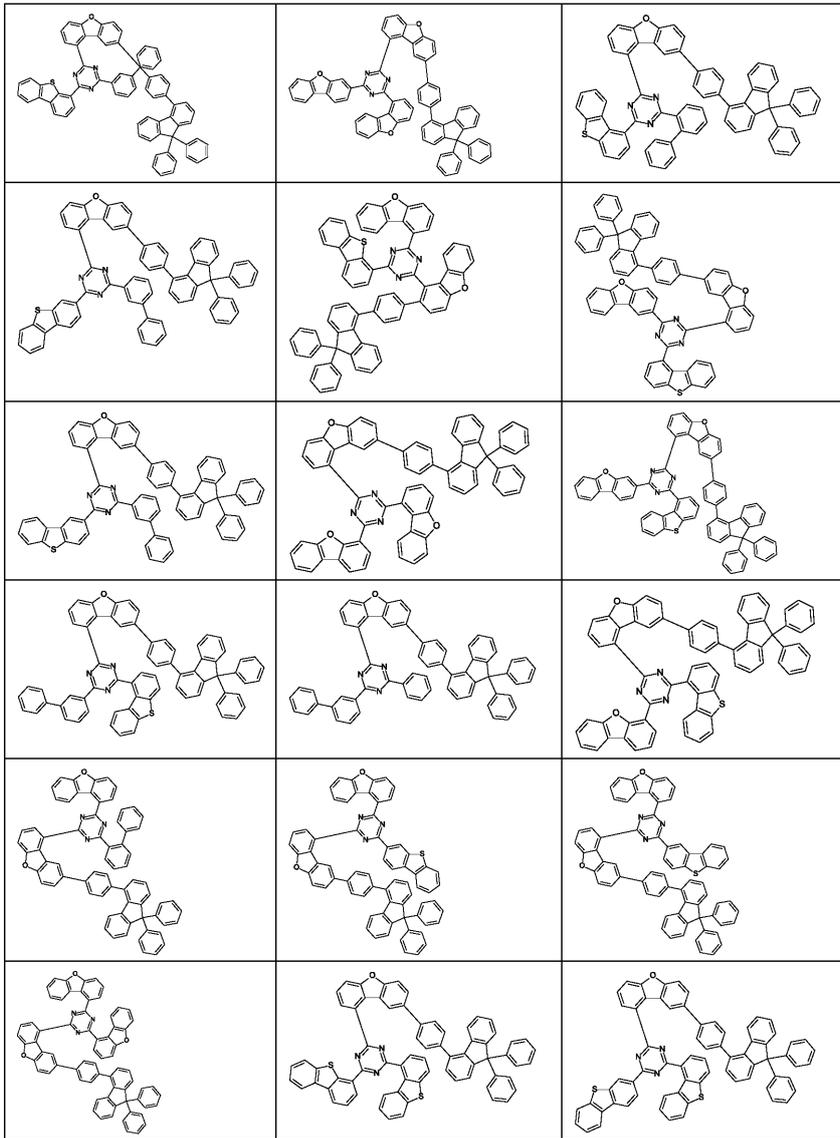
[0207]



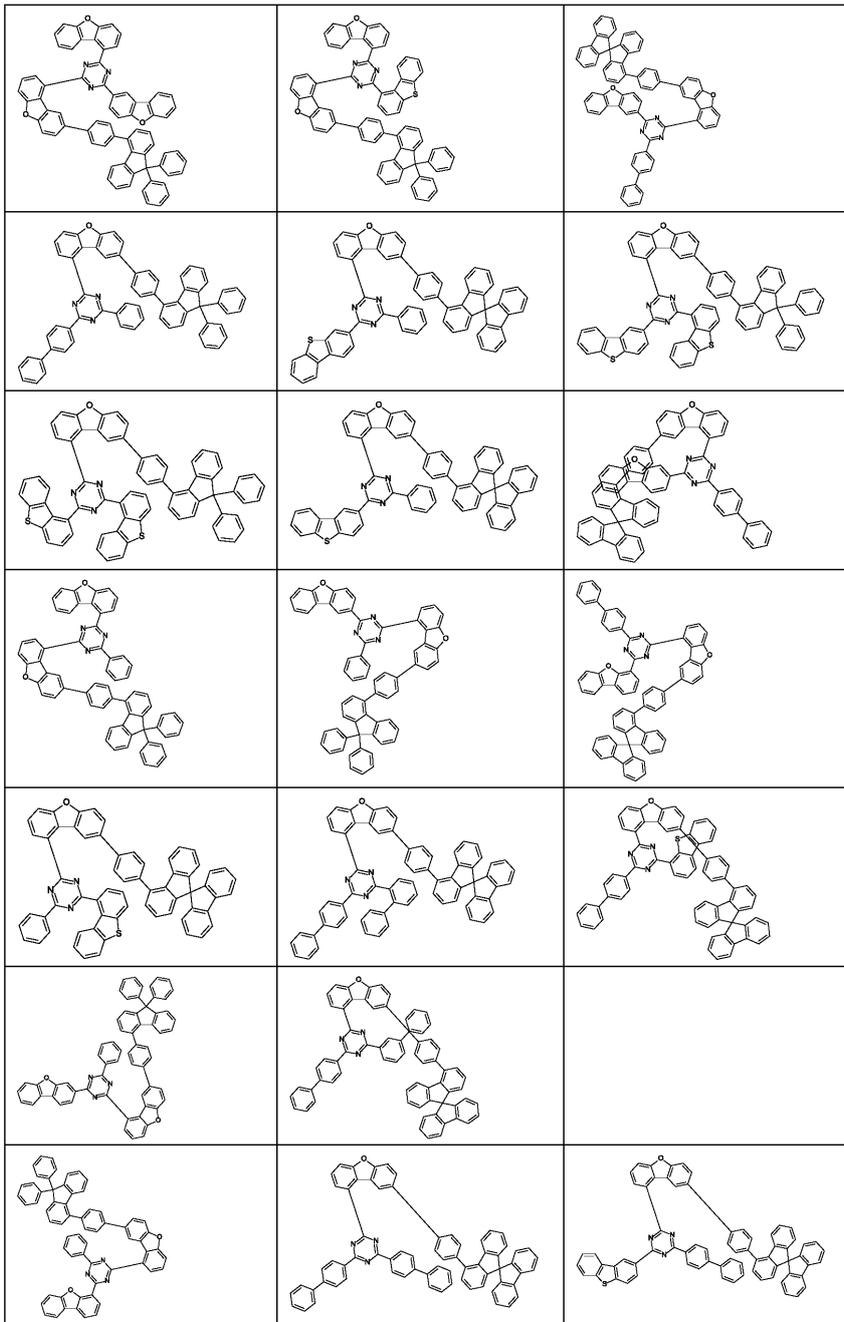
[0208]



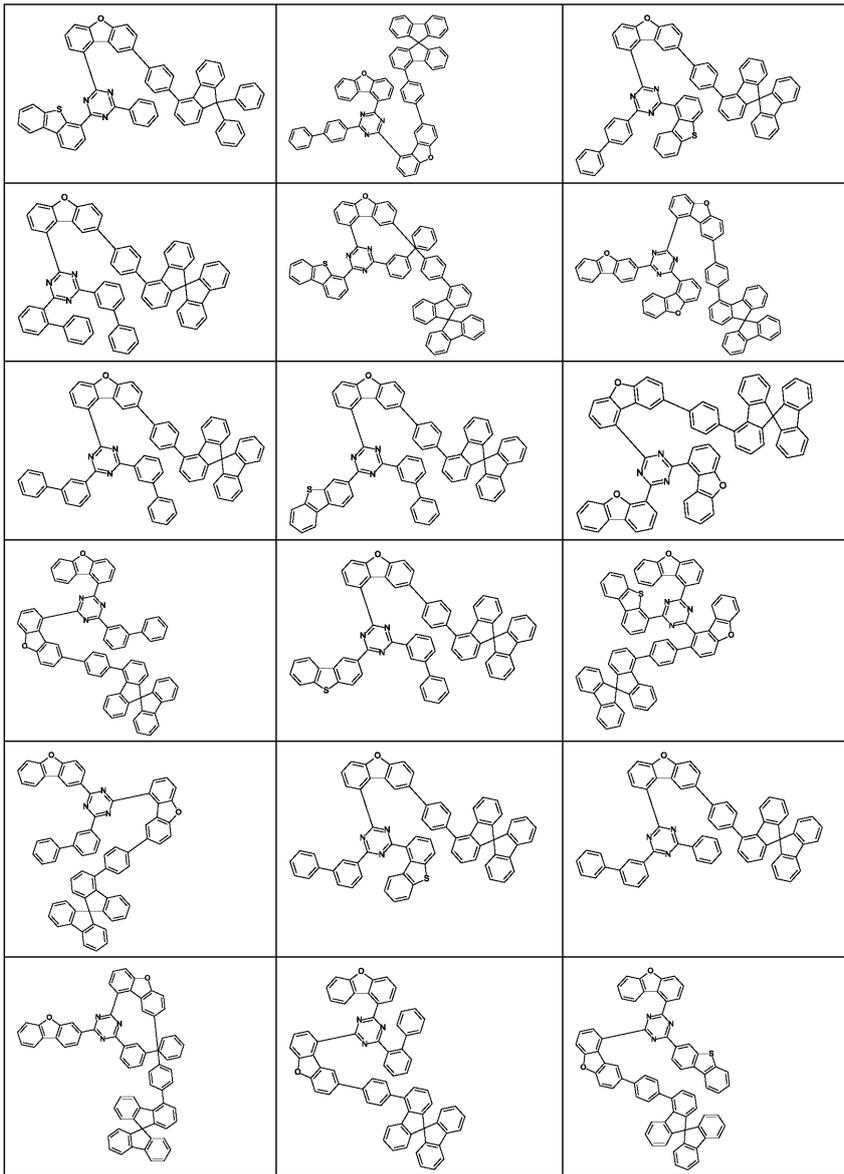
[0209]



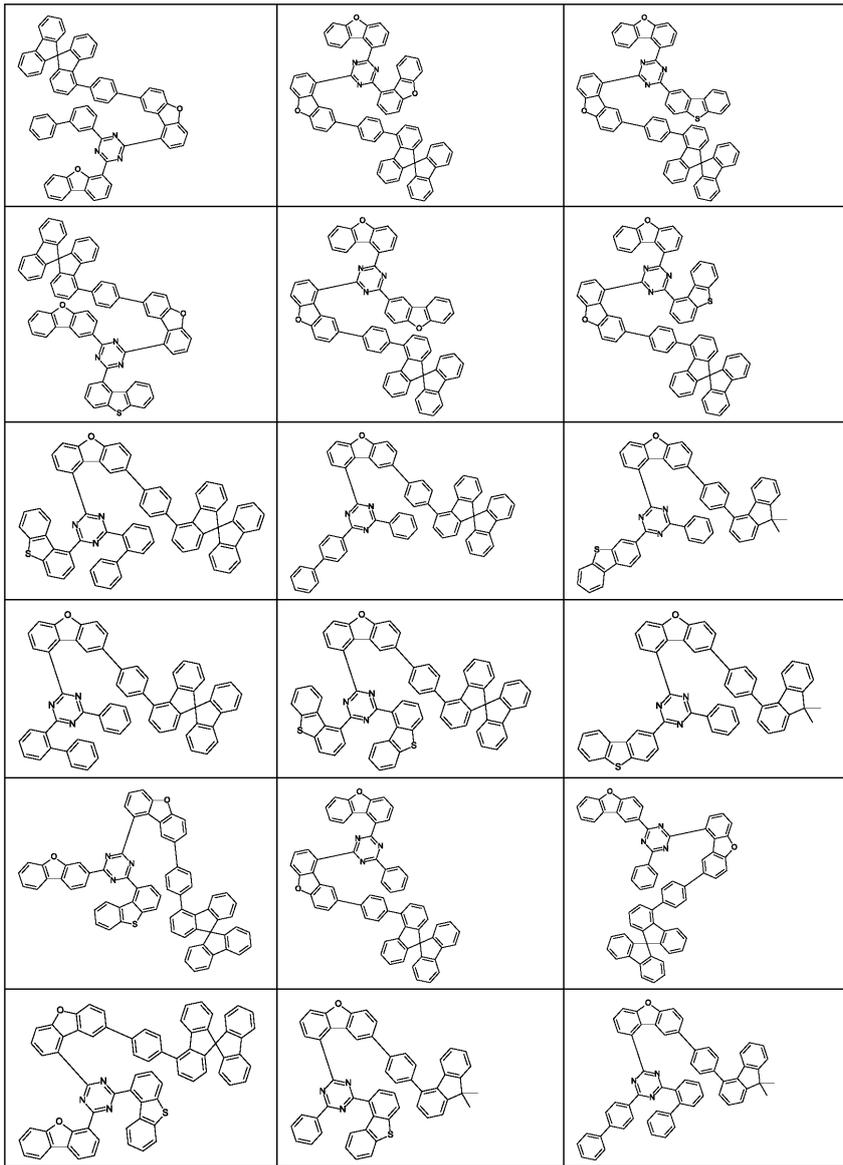
[0210]



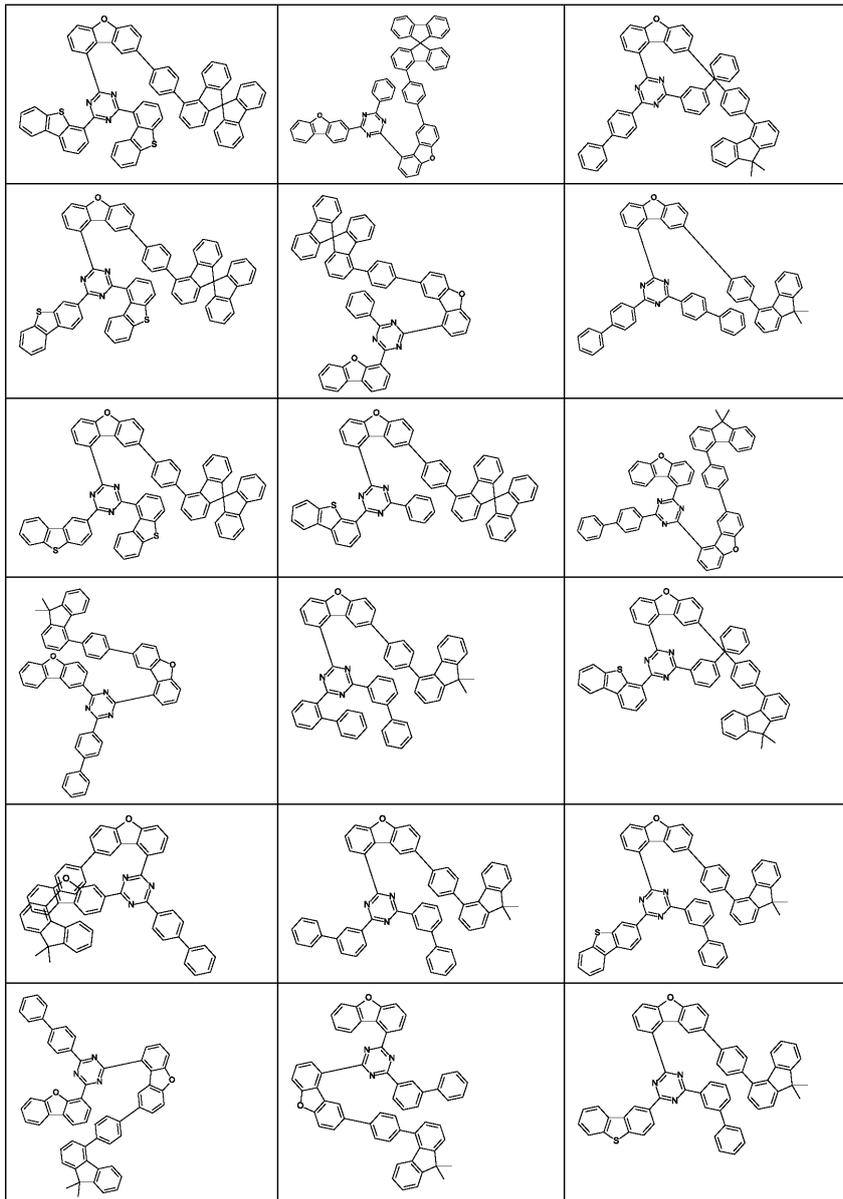
[0211]



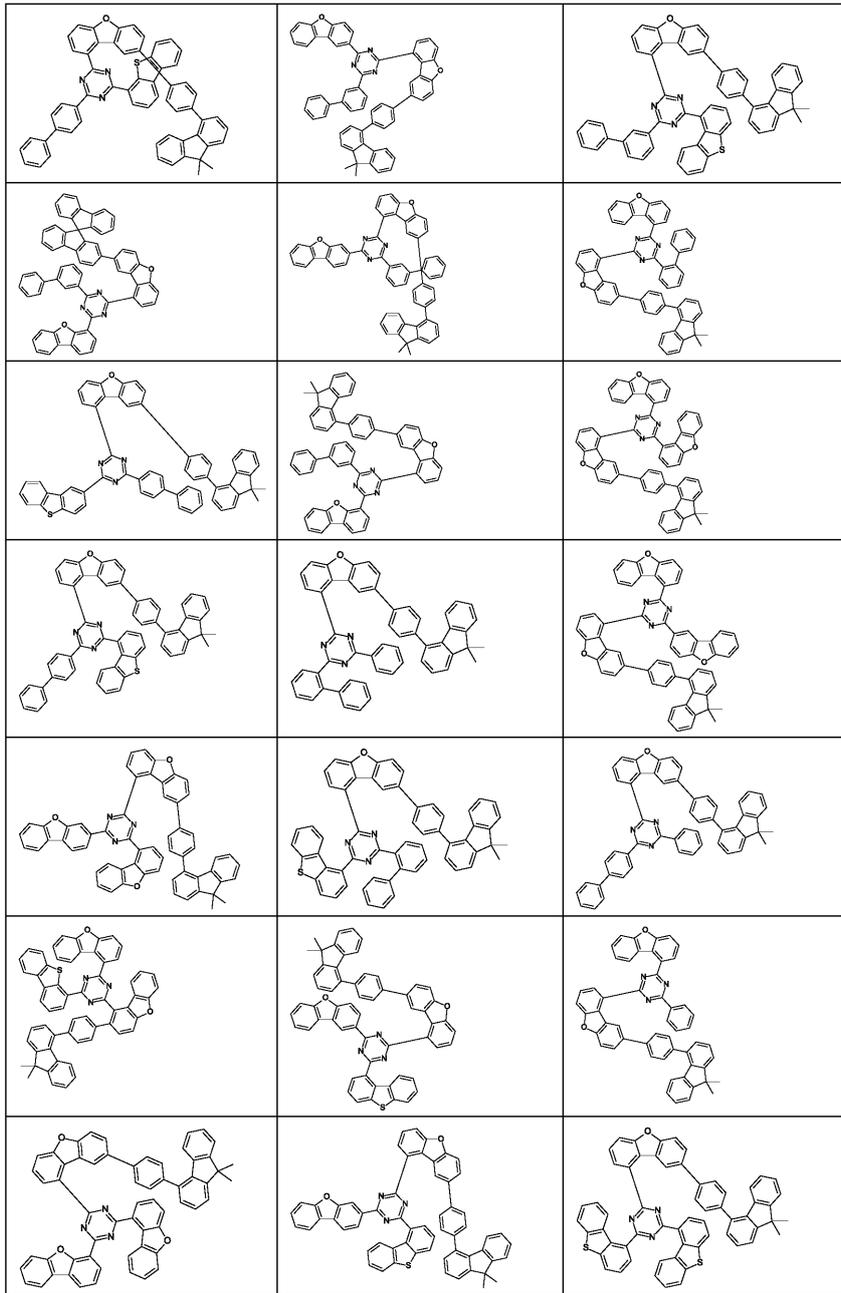
[0212]



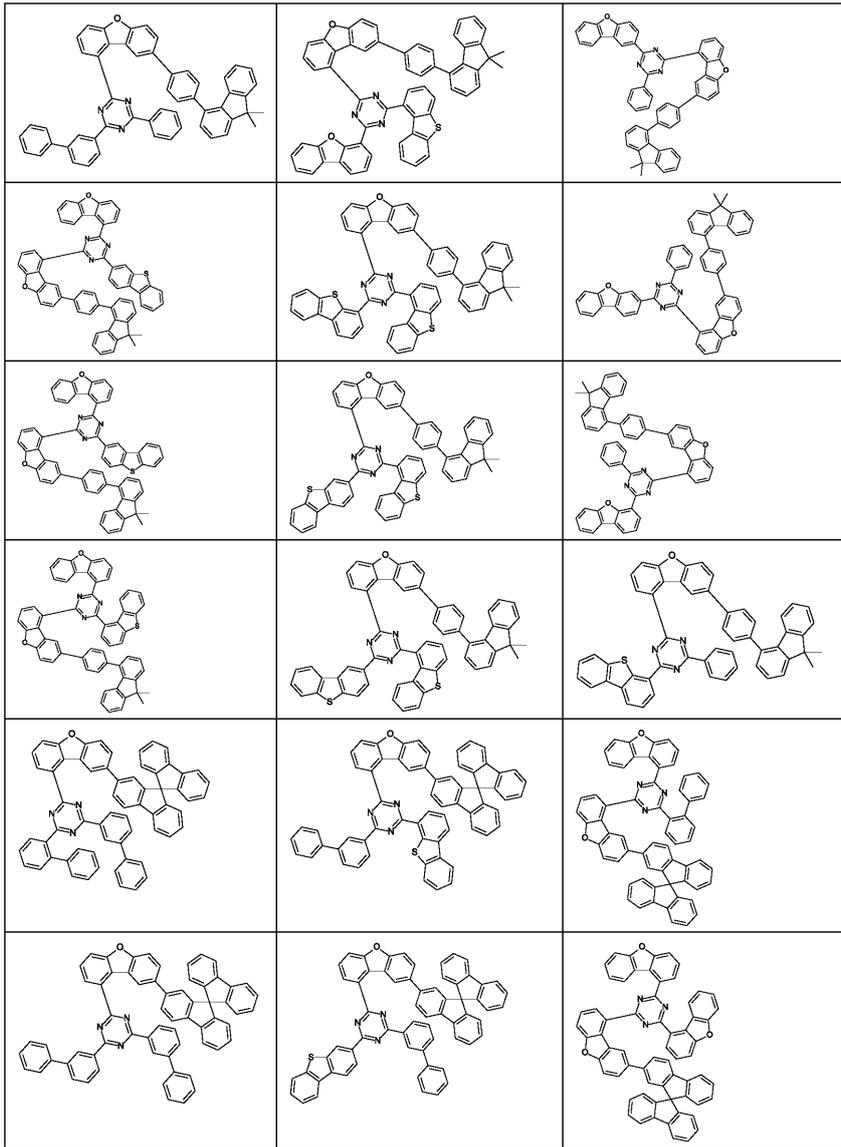
[0213]



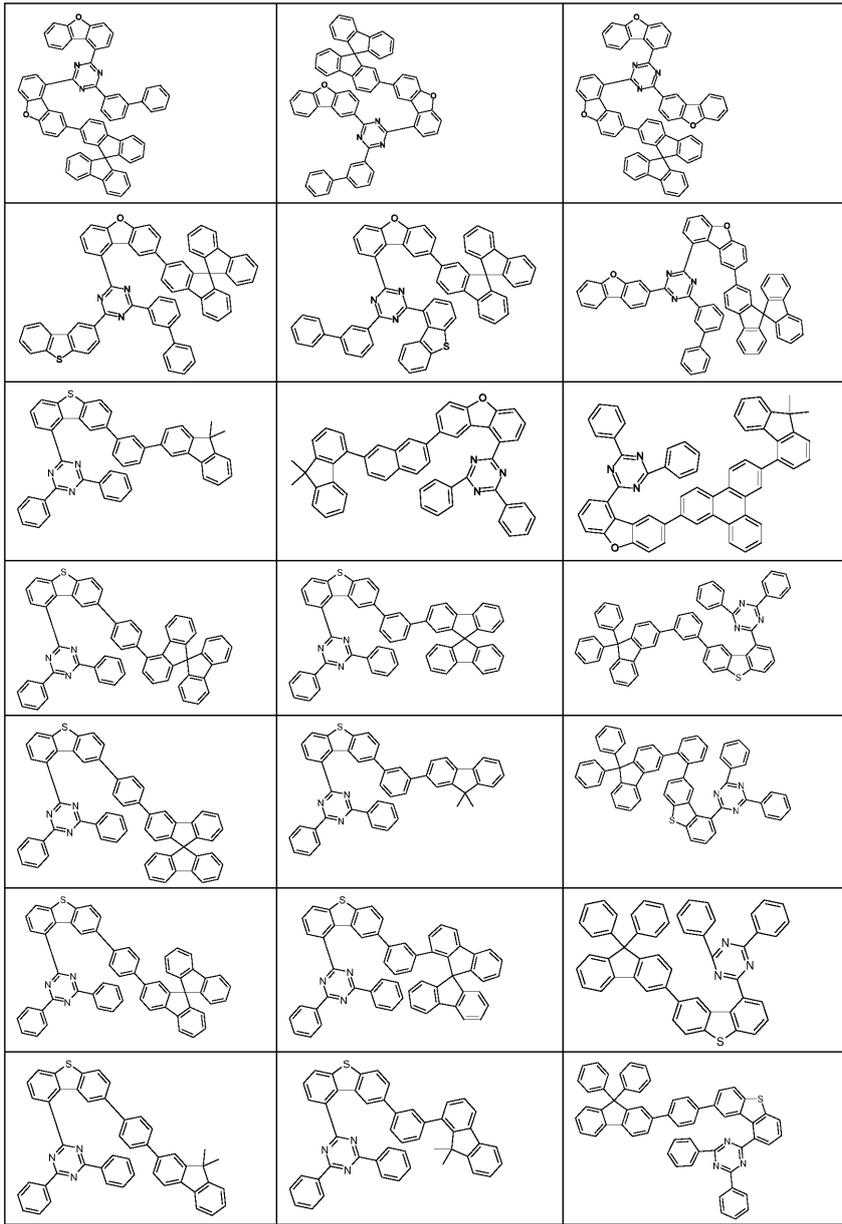
[0214]



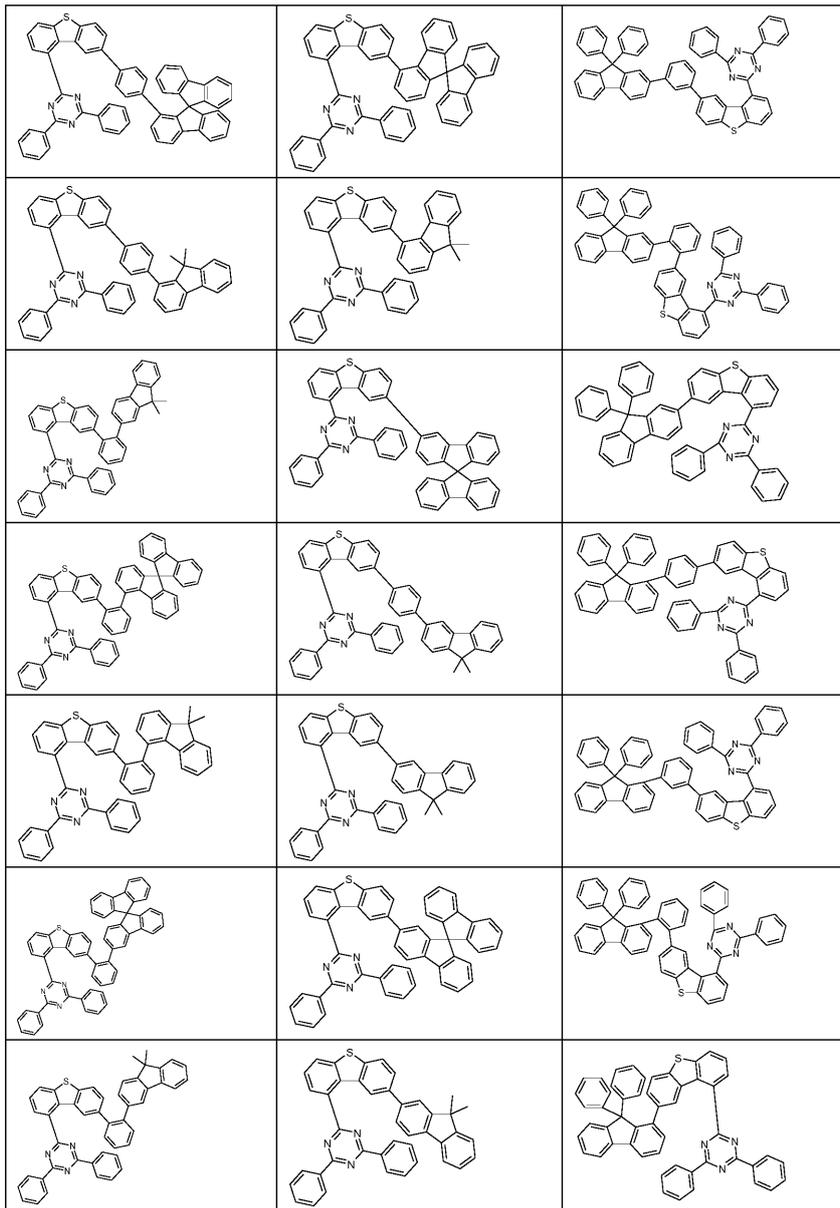
[0215]



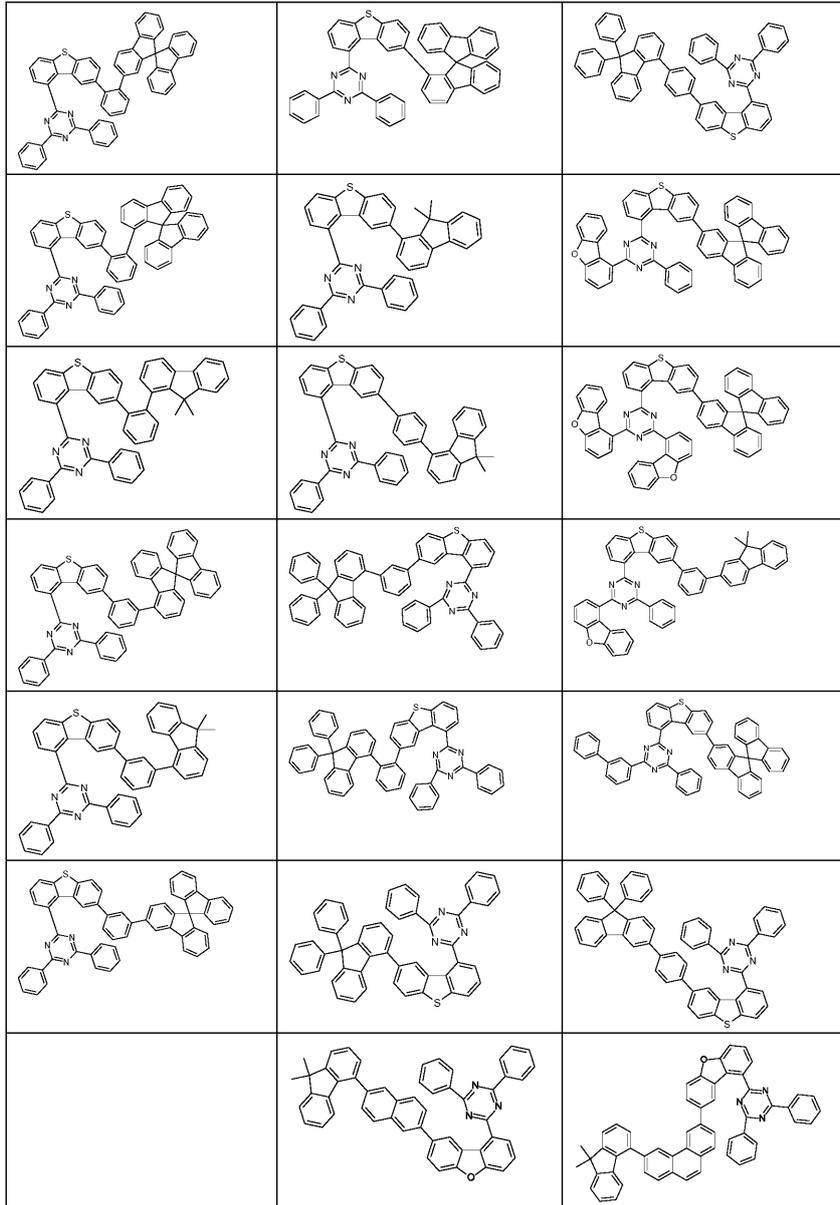
[0216]



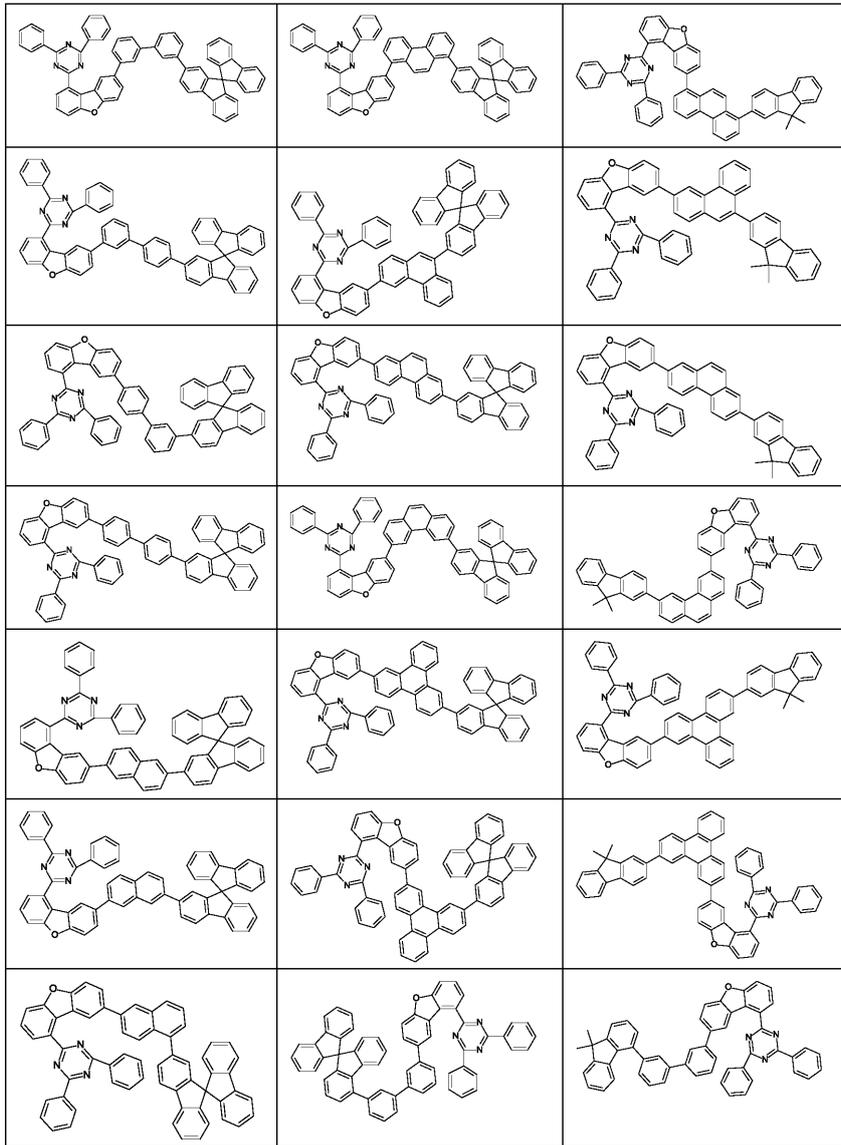
[0217]



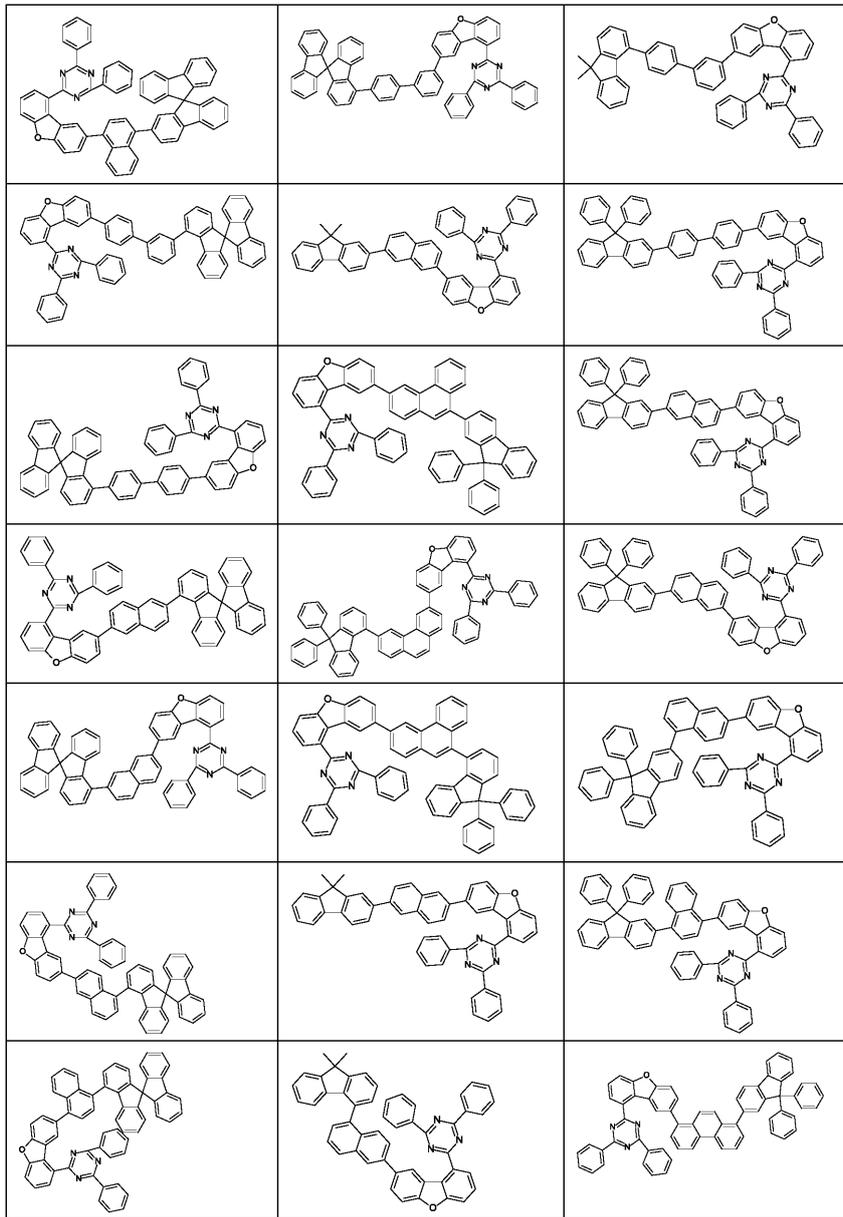
[0218]



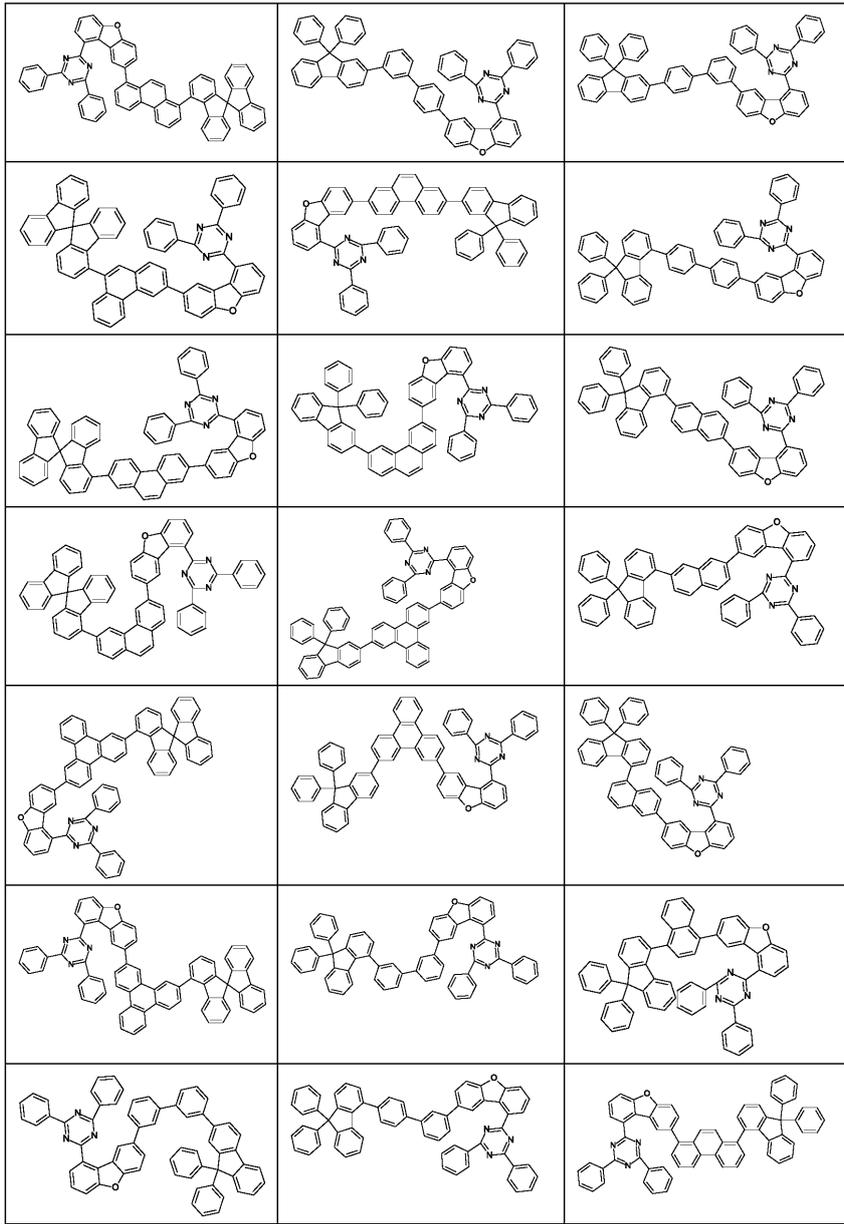
[0219]



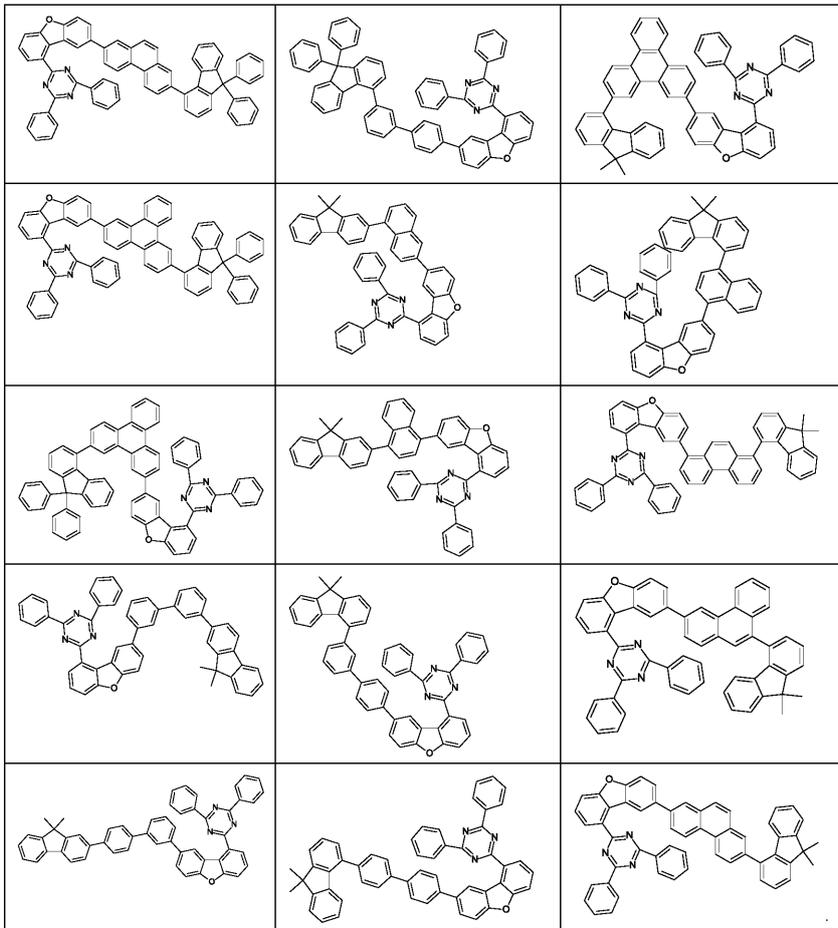
[0220]



[0221]



[0222]

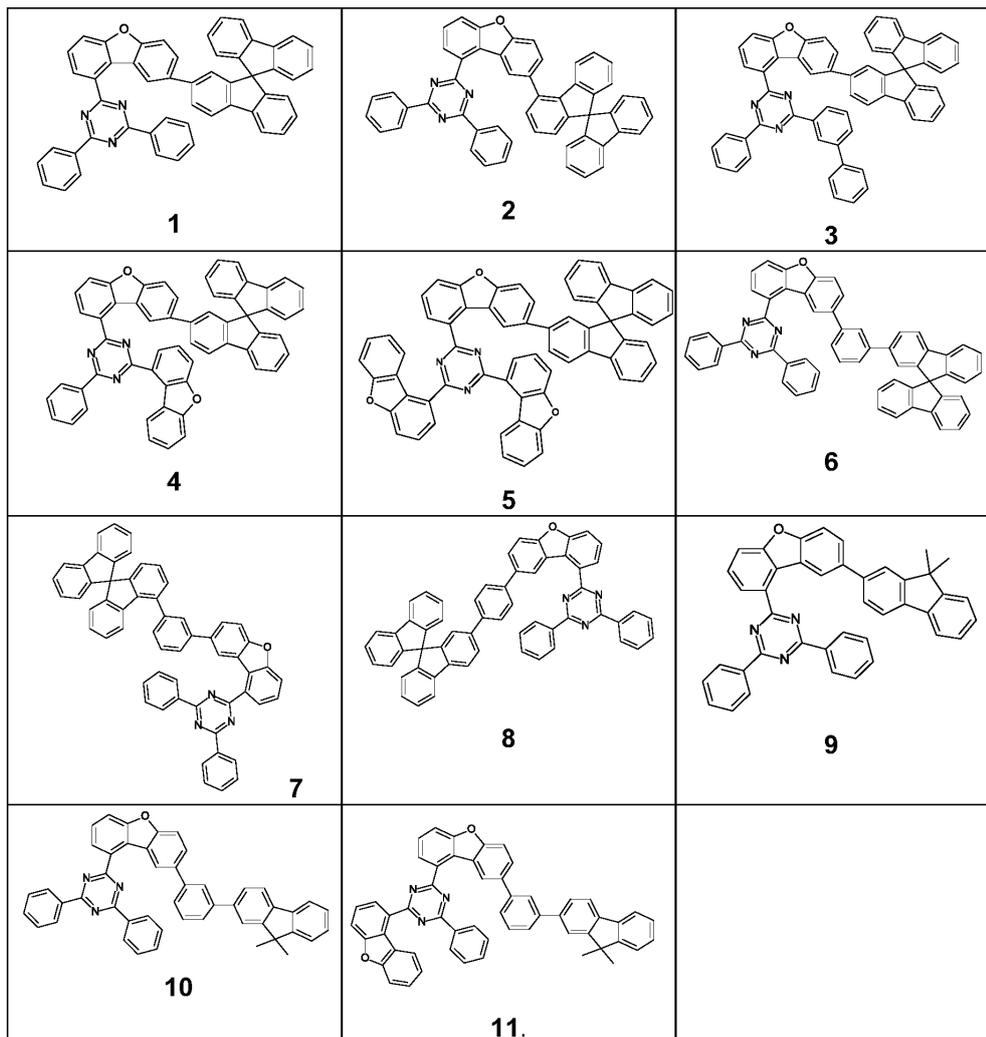


[0223]

[0224]

본 발명에 따라 선택되는 식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e), (1f), (1g), (1h), (1i), (1j) 또는 (1k) 의 특히 적합한 화합물은 표 2의 화합물 1 내지 11 이다.

[0225] 표 2



[0226]

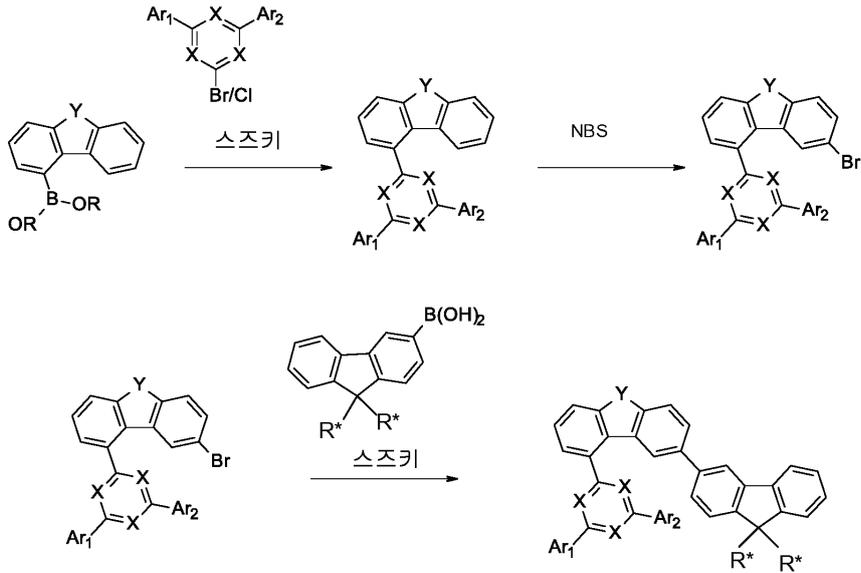
[0227]

식 (1) 의 화합물 또는 식 (1a) 내지 (1k) 의 바람직한 화합물 및 화합물 1 내지 11 의 제조는 당업자에게 알려져 있다. 화합물은 당업자에게 알려진 합성 단계, 예를 들어 할로겐화, 바람직하게는 브롬화, 그리고 후속 유기금속 커플링 반응, 예를 들어 Suzuki 커플링, Heck 커플링 또는 Hartwig-Buchwald 커플링에 의해 제조될 수도 있다. 식 (1) 의 화합물 또는 식 (1a) 내지 (1k) 의 바람직한 화합물 및 화합물 1 내지 11 의 제조는 특히 WO 2015/169412, 특히 63 페이지 및 77 ~ 114 페이지의 합성 예로부터 추론될 수 있다.

[0228]

L 이 단일 결합인 식 (1) 내지 (1f) 의 화합물은 아래 스킴 1에 따라 제조될 수 있으며, 여기서 X, Y, R<sup>\*</sup>, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub> 는 위에 주어진 정의 중 하나를 가지며 스킴 1에서 R 은 1 내지 4 개의 탄소 원자를 갖는 알킬기이다.

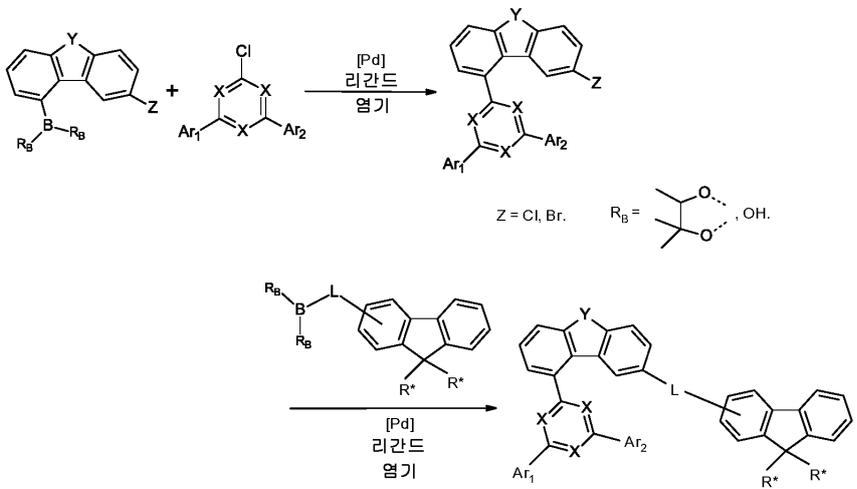
[0229] 스킴 1:



[0230]

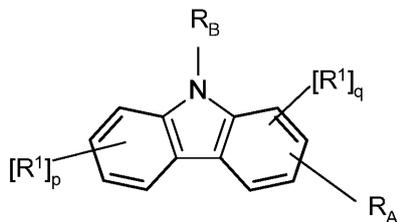
[0231] L 이 링커 기인 식 (1) 내지 (1k) 의 화합물은 아래 스킴 2에 따라 제조될 수 있으며, 여기서 X, Y, R\*, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub> 는 위에 주어진 정의 중 하나를 가진다.

[0232] 스킴 2:



[0233]

[0234] 정공 수송 호스트는 식 (2) 을 따르고



식 (2)

[0235]

[0236] 식중 사용되는 기호 및 지수는 다음과 같다:

[0237] RA는 H, -L<sub>3</sub>-Ar<sub>4</sub> 또는 -L<sub>1</sub>-N(Ar)<sub>2</sub> 이고;

- [0238]  $R_B$ 는  $Ar_3$  또는  $-L_2-N(Ar)_2$  이고;
- [0239]  $L_1, L_2$  는 각각 경우에 동일하거나 상이하고, 단일 결합, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^3$  라디칼에 의해 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고;
- [0240]  $L_3$  은 단일 결합, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^3$  라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 여기서 카르바졸 상의 하나의 치환기  $R^1$  은 치환기  $R^3$  와 고리를 형성할 수도 있다.
- [0241]  $Ar_3$ 은 하나 이상의  $R^3$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 또는 10 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템이고;
- [0242]  $Ar_4$ 는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 하나 이상의  $R^4$  라디칼로 치환될 수도 있는 비치환 또는 치환된 9-아릴 카르바졸릴 또는 비치환 또는 치환된 카르바졸-9-일이고, 여기서 하나 이상의 경우 2 개의  $R^4$  라디칼의 각각 또는 하나의  $R^4$  라디칼과 함께 하나의  $R^1$  라디칼은 독립적으로 단환 또는 다환, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리를 형성할 수도 있으며, 여기서 아릴은 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고  $R^3$  로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고;
- [0243]  $R^1$  은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, CN,  $NO_2$ ,  $N(Ar)_2$ ,  $N(R^2)_2$ ,  $C(=O)Ar$ ,  $C(=O)R^2$ ,  $P(=O)(Ar)_2$ ,  $P(Ar)_2$ ,  $B(Ar)_2$ ,  $Si(Ar)_3$ ,  $Si(R^2)_3$ , 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 (이들 각각은 하나 이상의  $R^2$  라디칼에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는  $R^2C=CR^2$ ,  $Si(R^2)_2$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=NR^2$ ,  $P(=O)(R^2)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NR^2$ ,  $O$ ,  $S$  또는  $CONR^2$  에 의해 대체될 수도 있고, 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는  $NO_2$  에 의해 대체될 수도 있음), 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각각의 경우 하나 이상의  $R^2$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^2$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^2$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬 기로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 동일한 탄소 원자 또는 인접한 탄소 원자에 결합된 2 개의 치환기  $R^0$  및/또는 R 및/또는  $R^1$  이 하나 이상의  $R^2$  라디칼에 의해 치환될 수 있는 단환 또는 다환의 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성하는 것이 선택적으로 가능하고;
- [0244]  $R^2$  는 각각의 경우 동일하거나 상이하게 H, D, F, Cl, Br, I, CN,  $NO_2$ ,  $N(Ar)_2$ ,  $NH_2$ ,  $N(R^3)_2$ ,  $C(=O)Ar$ ,  $C(=O)H$ ,  $C(=O)R^3$ ,  $P(=O)(Ar)_2$ , 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 2 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알킬닐기 (이들 각각은 하나 이상의  $R^3$  라디칼로 치환될 수도 있고, 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는  $HC=CH$ ,  $R^3C=CR^3$ ,  $C\equiv C$ ,  $Si(R^3)_2$ ,  $Ge(R^3)_2$ ,  $Sn(R^3)_2$ ,  $C=O$ ,  $C=S$ ,  $C=Se$ ,  $C=NR^3$ ,  $P(=O)(R^3)$ ,  $SO$ ,  $SO_2$ ,  $NH$ ,  $NR^3$ ,  $O$ ,  $S$ ,  $CONH$  또는  $CONR^3$  으로 대체될 수도 있고 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는  $NO_2$  로 대체될 수도 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각각의 경우 하나 이상의  $R^3$  라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^3$  라디칼로 치환될 수도 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기, 또는 이들 시스템의 조합으로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 여기서 둘 이상의 인접 치환기  $R^2$  가 하나 이상의  $R^3$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 단환 또는 다환의,

지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성하는 것이 선택적으로 가능하고;

[0245]  $R^3$  은 각각의 경우에 동일하거나 상이하고, H, D, F, CN,  $N(Ar)_2$ , 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드로카르빌 라디칼, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (여기서 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I 또는 CN 으로 대체될 수도 있고, 각각 1 내지 4 개의 탄소 원자를 갖는 하나 이상의 알킬기에 의해 치환될 수도 있음) 으로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 둘 이상의 인접한  $R^3$  치환기는 함께 단환 또는 다환의 지방족 고리 시스템을 형성하는 것이 가능하고;

[0246]  $R^4$  는 각각의 경우에 동일하거나 상이하고, H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드로카르빌 라디칼, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (여기서 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, 1 내지 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지형 알킬기 또는 CN 에 의해 대체될 수도 있음) 으로 이루어지는 군에서 선택되고; 동시에, 둘 이상의 인접한  $R^4$  치환기는 함께 단환 또는 다환 고리 시스템을 형성할 수도 있고;

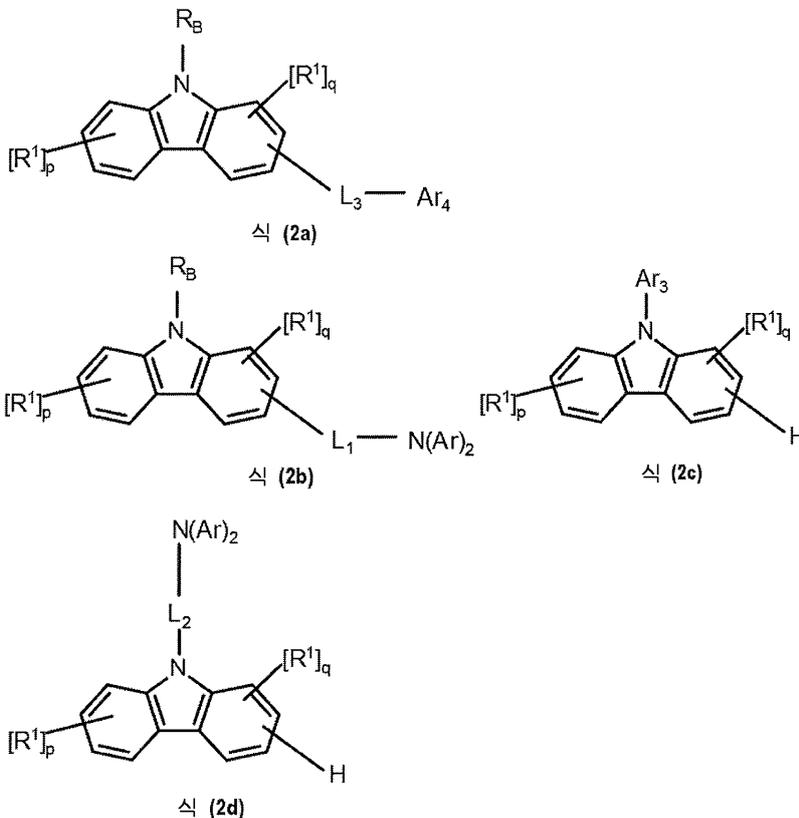
[0247] Ar 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하고, 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 비방향족  $R^3$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고; 동시에, 동일한 질소 원자, 인 원자, 또는 붕소 원자에 결합된 2 개의 Ar 라디칼은 또한  $N(R^3)$ ,  $C(R^3)_2$ , O 및 S 로부터 선택되는 브릿지 또는 단일 결합에 의해 서로 브릿지될 수도 있고,

[0248] q 는 각각의 경우에 독립적으로 0, 1, 2 또는 3 이고;

[0249] p 는 각각의 경우에 독립적으로 0, 1, 2, 3 또는 4이다.

[0250] 본 발명의 일 실시형태에서, 위에 설명된 바와 같이 식 (2) 의 화합물이 선택되고, 이는 위에 설명되거나 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e), (1f), (1g), (1h), (1i), (1j) 및 (1k) 의 화합물과 함께, 또는 표 1 에 있는 화합물 또는 화합물 1 내지 11 의 화합물과 함께 조성물에서 사용된다.

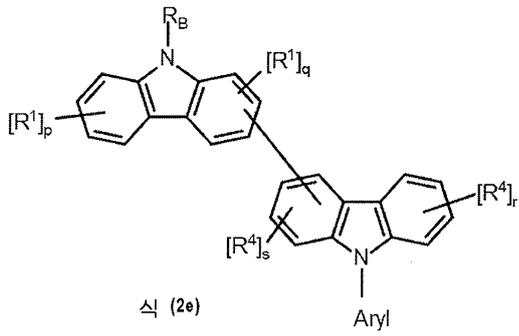
[0251] 식 (2) 의 화합물은 다음 식 (2a), (2b), (2c) 및 (2d) 로 표현될 수도 있고:



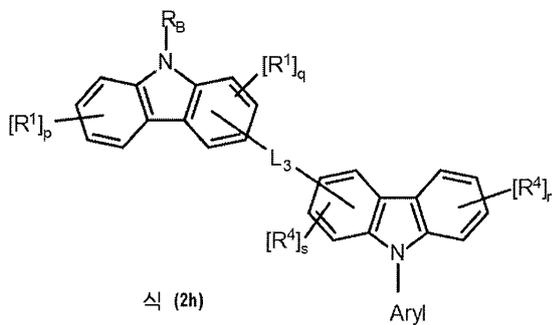
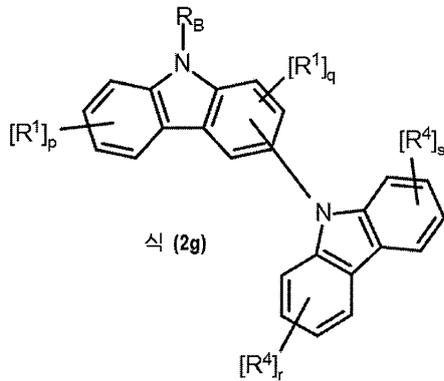
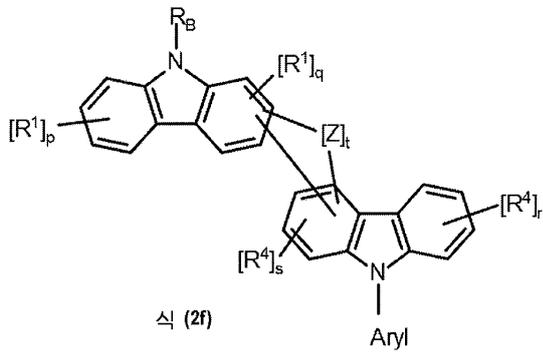
[0252]

[0253] 식중  $L_1$ ,  $L_2$ ,  $L_3$ , Ar,  $Ar_3$ ,  $Ar_4$ ,  $R^1$ , q 및 p 는 위에 주어진 정의 또는 이하에 주어진 정의를 갖는다.

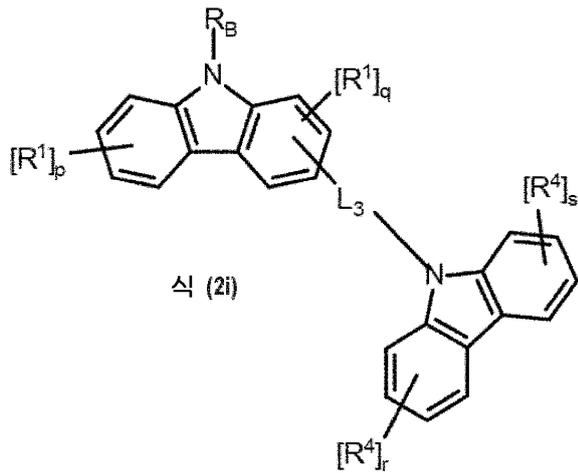
[0254] 식 (2a) 의 바람직한 화합물은 하기 식 (2e), (2f), (2g), (2h) 및 (2i) 의 화합물이다:



[0255]



[0256]



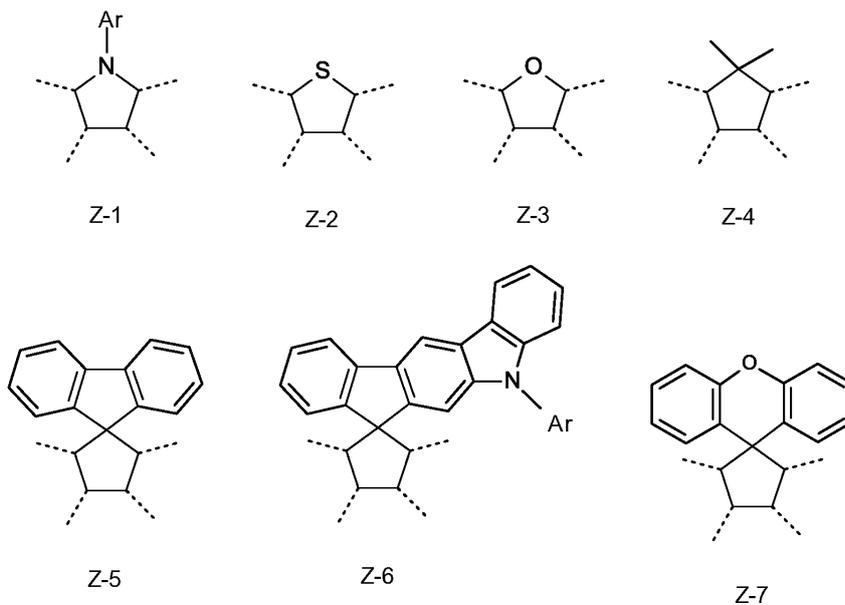
[0257]

[0258] 식중  $R_B$ , Ar,  $R^1$ ,  $R^4$ , q 및 p 는 위에 주어진 정의 또는 이하에 주어진 정의를 가지며, 식 (2h) 및 (2i) 에서  $L_3$  는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^3$  라디칼로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 여기서 카르바졸 상의 하나의 치환기  $R^1$  은 치환기  $R^3$  와 고리를 형성할 수도 있고, r 및 s 는 각각 독립적으로 0, 1, 2, 3 또는 4 이고, Z 는  $C(R^1)_2$ , N-Ar, O 또는 S 이고, t 는 0 또는 1 이다.

[0259] 식 (2a) 내지 (2i) 의 화합물에서, p, q, r 또는 s 가 1보다 큰 경우 H 는 치환기  $R^1$  의 정의에서 제외된다.

[0260] 따라서, 본 발명은 또한 위에 설명된 바와 같은 조성물을 제공하며, 여기서 식 (2) 의 화합물은 식 (2a), (2b), (2c), (2d), (2e), (2f), (2g), (2h) 및 (2i) 의 화합물 중 하나에 대응한다.

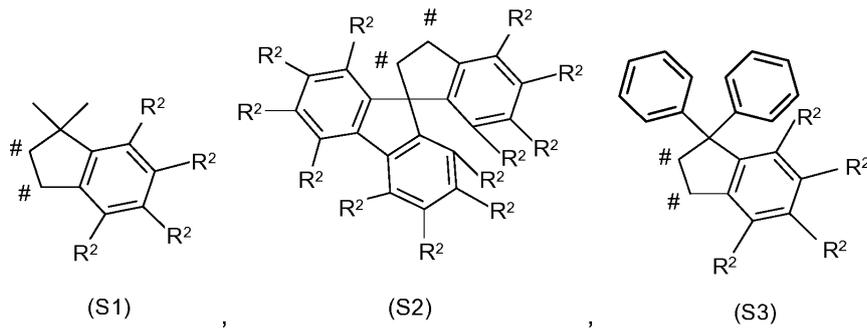
[0261] 식 (2), (2a), (2b), (2c), (2d), (2e), (2f), (2g), (2h) 및 (2i) 의 화합물에서, 하나의 치환기  $R^1$  및 하나의 치환기  $R^4$  는, 예를 들어, 식 (2f) 에서 [Z]<sub>t</sub> 에 의해서도 정의되는, 고리를 형성할 수도 있고, 바람직하게는 하기 고리 Z-1 내지 Z-7 를 형성하고, 여기서 각 경우에 점선은 카르바졸에 대한 결합을 나타낸다:



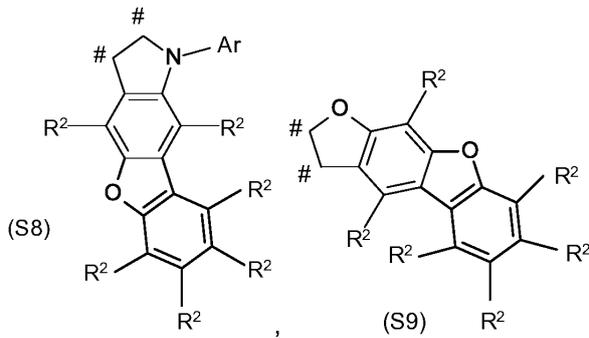
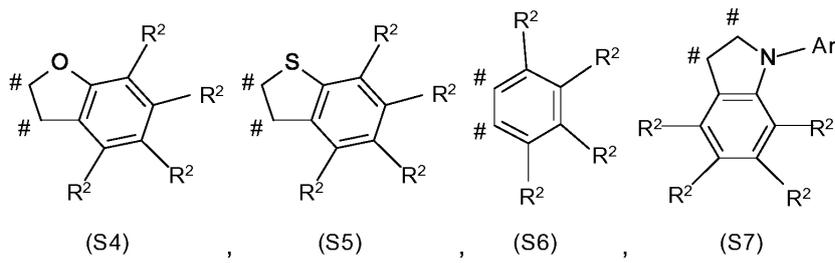
[0262]

[0263] 식 (2), (2a), (2b), (2c), (2d), (2e), (2f), (2g), (2h) 및 (2i) 의 화합물에서, 하나 이상의 경우에서 두 개의 치환기  $R^1$  는 함께 고리를 형성할 수도 있거나 또는 하나 이상의 경우에서 두 개의 치환기  $R^4$  는 하기 구조 (S1) 내지 (S9) 로부터 바람직하게 선택되는 고리를 함께 형성할 수도 있으며, 여기서 # 및 # 은 탄소 원자에

대한 각각의 결합 부위를 나타내고 구조는 각각 하나 이상의 치환기  $R^2$  에 의해 치환될 수도 있다:



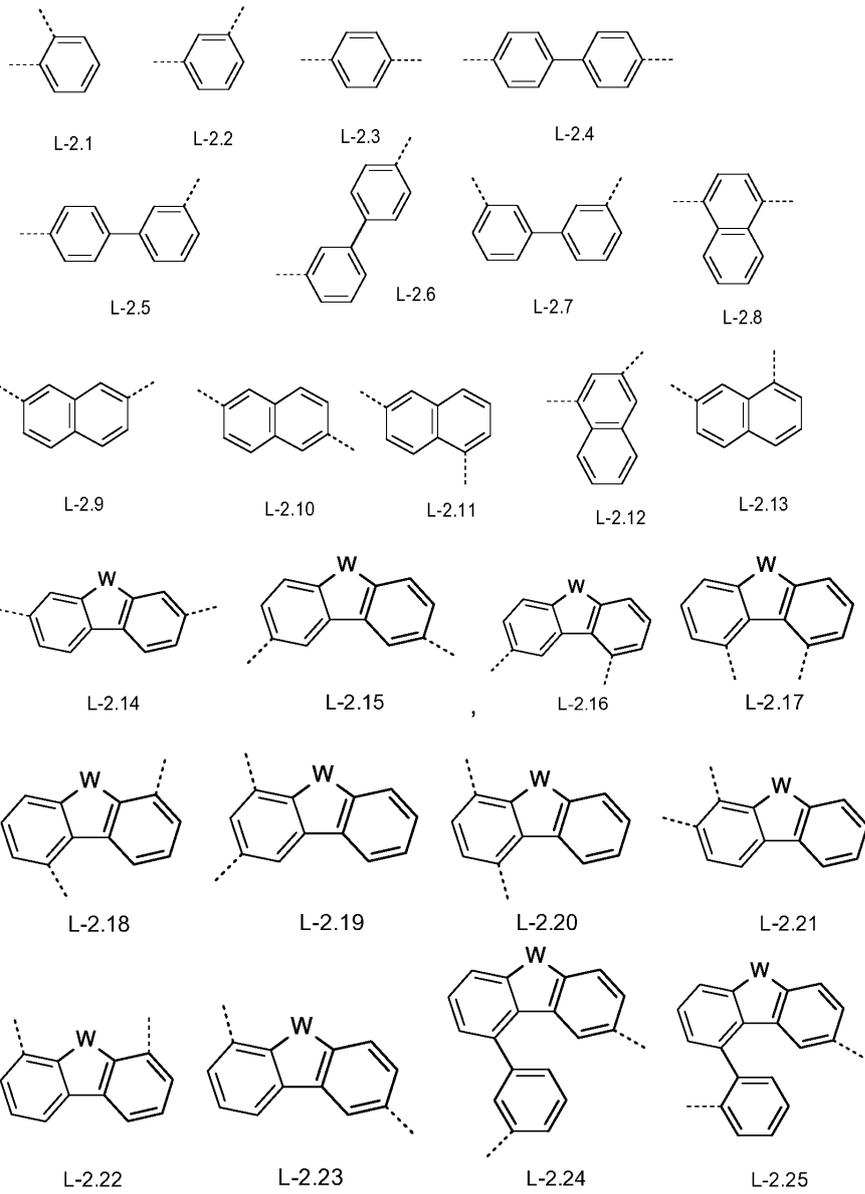
[0264]



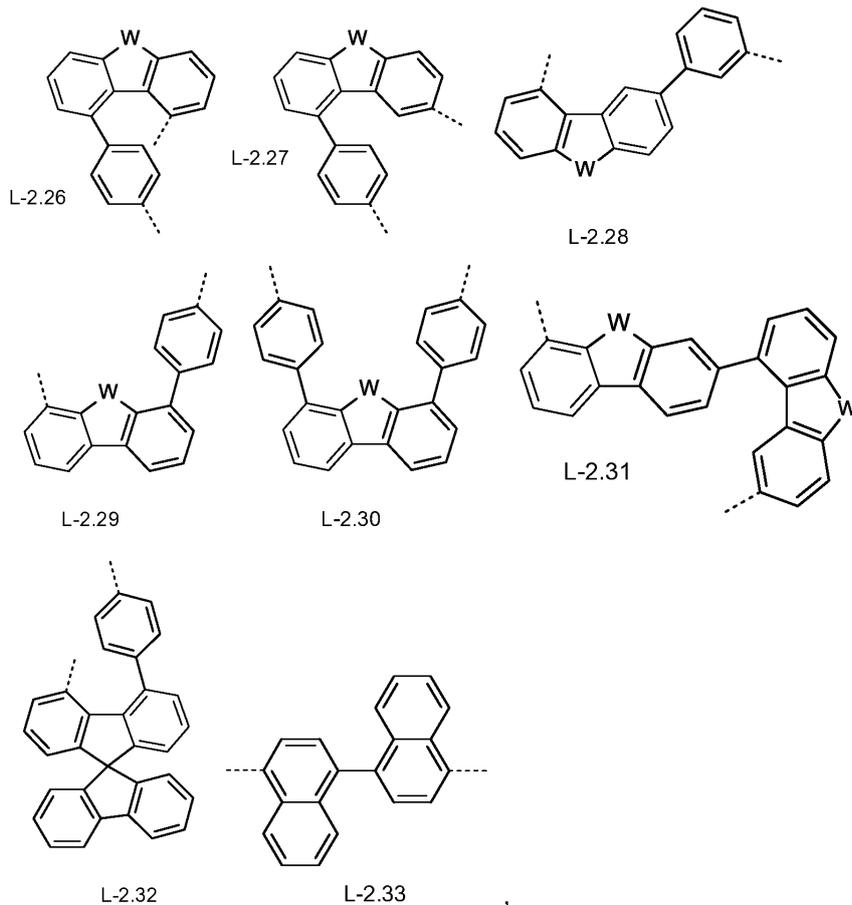
[0265]

[0266] 부분구조 (S1) 내지 (S9) 에서  $R^2$  는 바람직하게는 H 이거나, 또는 5 내지 40 개의 고리 원자를 갖고  $R^3$  로 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 바람직하게는 H 또는 페닐이다.

[0267] 식 (2), (2a), (2b), (2c), (2d), (2e), (2f), (2g), (2h) 및 (2i) 의 화합물에서, 링커  $L_1$ ,  $L_2$  및  $L_3$  는 이들이 단일 결합이 아닌 경우 링커 L-2.1 내지 L-2.33 로부터 각각 독립적으로 선택된다:



[0268]



[0269]

[0270]

식중 W 는 N-Ar, O, S 또는 C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> 를 나타내고, Ar 은 위에 주어진 정의를 가지며, 링커 L-1 내지 L-33 은 하나 이상의 R<sup>3</sup> 라디칼로 치환될 수도 있고, 점선은 카르바졸에 대한 부착을 나타낸다. 링커 L<sub>3</sub> 의 경우, 링커 L-2.1 내지 L-2.33 중 하나 상의 R<sup>3</sup> 라디칼은 카르바졸의 R<sup>1</sup> 라디칼과 고리를 형성할 수도 있다.

[0271]

바람직하게는, 링커 L-2.1 내지 L-2.33 은 페닐로 치환되거나 또는 비치환된다.

[0272]

L<sub>1</sub> 을 위해 바람직한 링커는 구조 L-2.1 내지 L-2.33 로부터 선택되고, 여기서 W 는 S 또는 O 로 정의되고, 보다 바람직하게는 O 로 정의된다.

[0273]

L<sub>3</sub> 을 위해 바람직한 링커는 구조 L-2.1 내지 L-2.33 로부터 선택되고, 여기서 W 는 O, S 또는 N-Ar 로 정의되고, 보다 바람직하게는 O 또는 N-Ar 로 정의된다.

[0274]

식 (2), (2a), (2b), (2c), (2d), (2e), (2f), (2g), (2h) 및 (2i) 의 화합물의 바람직한 실시형태에서, 2 개의 카르바졸은 각각 3 위치에서 서로 연결된다.

[0275]

식 (2), (2a), (2b), (2c), (2d), (2e), (2f), (2g), (2h) 및 (2i) 의 화합물에서, q 는 바람직하게는 0, 1 또는 2 이고, 여기서 R<sup>1</sup> 은 위에 주어진 정의 또는 아래에 주어진 정의를 갖는다. 보다 바람직하게는, q 는 0 또는 1 이다. 가장 바람직하게는 q 는 0 이다.

[0276]

식 (2), (2a), (2b), (2c), (2d), (2e), (2f), (2g), (2h) 및 (2i) 의 화합물에서, q 가 0 보다 큰 경우, 치환기 R<sup>1</sup> 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하고 D, F, 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알킬기 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R<sup>2</sup> 라디칼로 치환될 수 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어진 군으로부터 바람직하게 선택된다. 이 R<sup>1</sup> 에서 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 바람직하게는, 벤젠, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 9-페닐카르바졸, 바이페닐 및 테르페닐 (이들은 하나 이상의 R<sup>2</sup> 라디칼에 의해 치환될 수도 있음) 로부터 유도된다. 치환기(들)

$[R^1]_q$  의 바람직한 위치는 위치 1, 2, 3 또는 4 이거나 또는 위치 1 과 4 및 1 과 3의 조합, 보다 바람직하게는 1 과 3, 2 또는 3, 가장 바람직하게는 3 이며, 여기서  $R^1$  은 위에 주어진 바람직한 정의 중 하나를 가지며  $q$  는 0 보다 크다.  $[R^1]_q$  에서 특히 바람직한 치환기  $R^1$  은 카르바졸-9-일, 바이페닐, 테르페닐 및 디벤조푸라닐 이다.

[0277] 식 (2), (2a), (2b), (2c), (2d), (2e), (2f), (2g), (2h) 및 (2i) 의 화합물에서,  $r$  는 바람직하게는 0, 1 또는 2 이고, 여기서  $R^4$  는 위에 주어진 정의 또는 아래에 주어진 정의를 갖는다. 보다 바람직하게는,  $r$  는 0 또는 1 이고, 가장 바람직하게는 0 이다.

[0278] 식 (2), (2a), (2b), (2c), (2d), (2e), (2f), (2g), (2h) 및 (2i) 의 화합물에서,  $r$  이 0 보다 큰 경우, 치환기  $R^4$  는 각각의 경우에 동일하거나 상이하고 바람직하게 D, F, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알킬기 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (여기서 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, 1 내지 4개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지형 알킬기 또는 CN 으로 치환될 수도 있음) 으로 이루어진 군으로부터 선택된다. 여기서, 2 개 이상의 인접한  $R^4$  치환기는 함께 단환 또는 다환 고리 시스템을 형성하는 것이 가능하다. 이  $R^4$  에서 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템은 바람직하게는, 벤젠, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 9-페닐카르바졸, 바이페닐, 테르페닐 및 트리페닐렌으로부터 유도된다.

[0279] 치환기(들)  $[R^4]_r$  의 바람직한 위치는 위치 1, 2 또는 3, 보다 바람직하게는 3 이며, 여기서  $R^4$  은 위에 주어진 바람직한 정의 중 하나를 가지며,  $r$  은 0 보다 크다.

[0280] 식 (2), (2a), (2b), (2c), (2d), (2e), (2f), (2g), (2h) 및 (2i) 의 화합물에서,  $s$  는 바람직하게는 0, 1 또는 2 이고, 여기서  $R^4$  는 위에 주어진 정의 또는 아래에 주어진 정의를 갖는다. 보다 바람직하게는,  $s$  는 0 또는 1 이고, 가장 바람직하게는 0 이다.

[0281] 식 (2), (2a), (2b), (2c), (2d), (2e), (2f), (2g), (2h) 및 (2i) 의 화합물에서  $s$  가 0 보다 큰 경우, 치환기  $R^4$  는 각각의 경우 동일하거나 상이하고 바람직하게는  $r$  에 대해 설명된 바와 같이 선택된다.

[0282]  $N(Ar)_2$  에서  $Ar$  은 바람직하게는, 벤젠, 디벤조푸란, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 디벤조티오펜, 9-페닐카르바졸, 바이페닐 및 테르페닐 (이들은 하나 이상의 치환기  $R^3$  로 치환될 수도 있음) 로부터 유도된다. 여기서  $Ar$  은 바람직하게는 비치환된다.

[0283] 치환기  $R^2$  는 각각의 경우에 동일하거나 상이하고 바람직하게 D, F, Cl, Br, I, CN,  $NO_2$ ,  $N(Ar)_2$ ,  $NH_2$ ,  $N(R^3)_2$ ,  $C(=O)Ar$ ,  $C(=O)H$ ,  $C(=O)R^3$ ,  $P(=O)(Ar)_2$ , 1 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬기 또는 2 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 또는 알키닐기 (이들 각각은 하나 이상의  $R^3$  라디칼에 의해 치환될 수도 있음), 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각 경우에 하나 이상의  $R^3$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 5 내지 60 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^3$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시기이다. 치환기  $R^2$  는 이것이 발생하는 경우 보다 바람직하게는 위에 설명된 바와 같은 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템이고, 바람직하게는 카르바졸, 9-페닐카르바졸, 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 플루오렌, 테르페닐 또는 스피로바이플루오렌의 군으로부터 선택되고, 가장 바람직하게는 디벤조푸란으로부터 유도된다.

[0284] 치환기  $R^3$  에 의한 상술한 바와 같은 치환기  $R^2$  중 하나의 치환기의 치환의 경우, 위에 설명된 또는 바람직한 것으로 설명된  $R^3$  의 정의가 적용 가능하다.

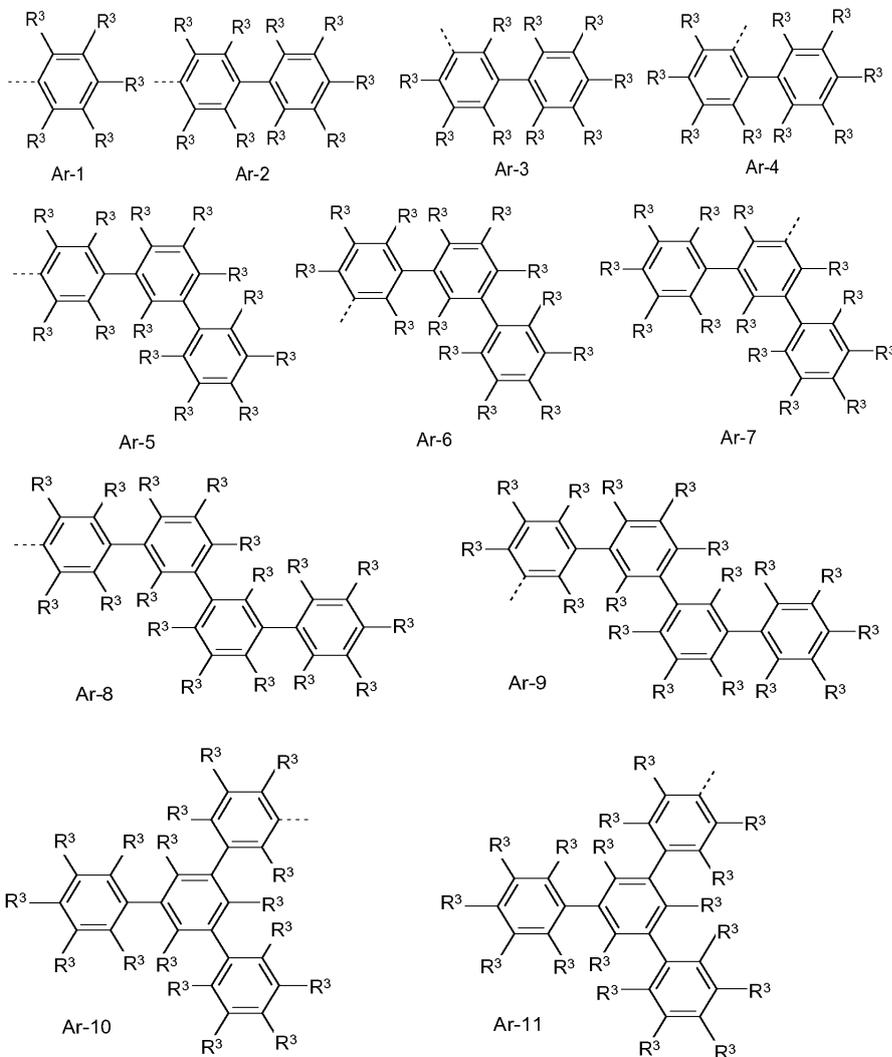
[0285] 위에 설명된 바와 같은, 식 (2), (2a), (2b), (2c), (2d), (2e), (2f), (2g), (2h) 및 (2i) 의 화합물에서,

Ar<sub>3</sub> 는 각 경우에 독립적으로, 6 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 고리 시스템 또는 10 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖는 헤테로방향족 고리 시스템 (이들은 하나 이상의 R<sup>3</sup> 라디칼에 의해 치환될 수도 있음) 이다.

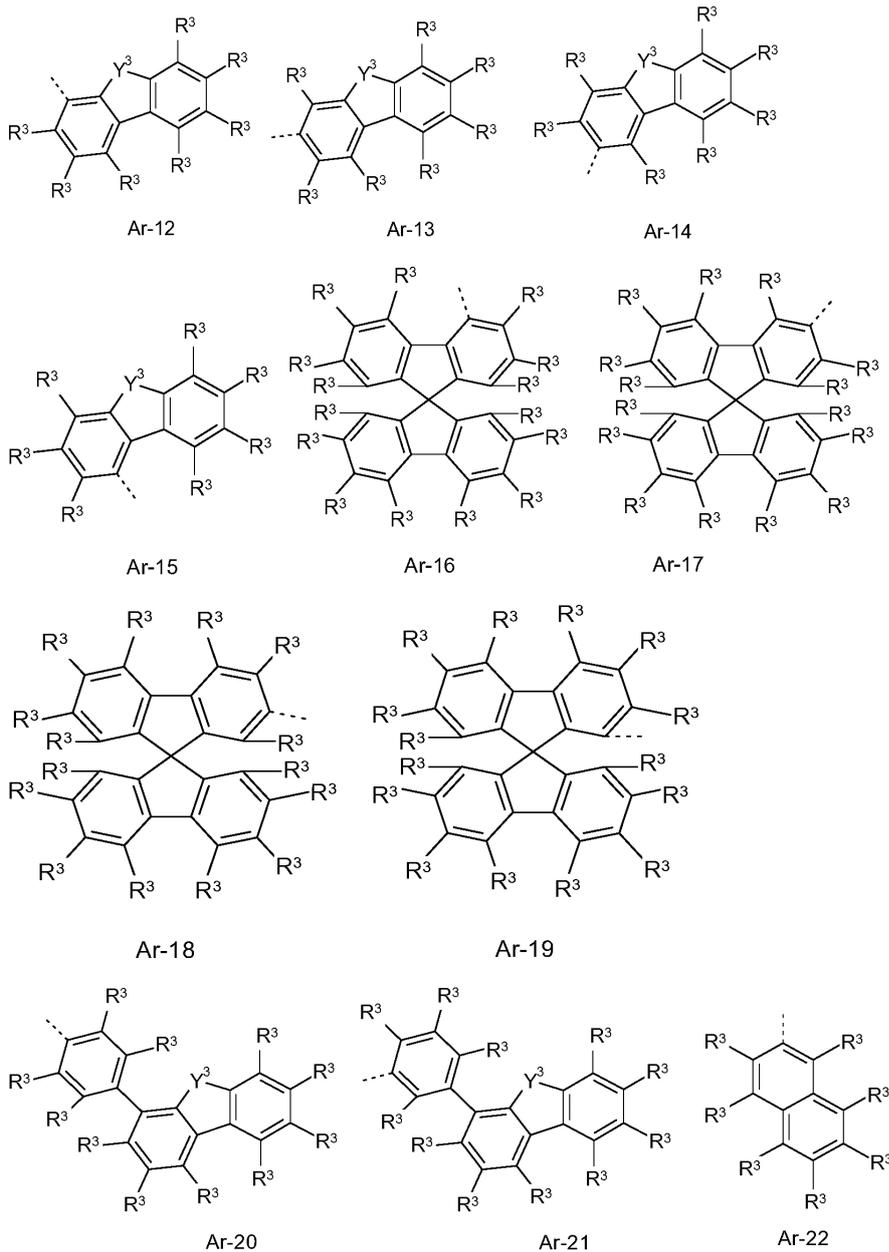
[0286] Ar<sub>3</sub> 은 바람직하게는, 벤젠, 디벤조푸란, 플루오렌, 스피로바이플루오렌, 디벤조티오펜, 9-페닐카르바졸, 바이페닐 및 테르페닐 (이들은 하나 이상의 치환기 R<sup>3</sup> 로 치환될 수도 있음) 로부터 유도되고, 여기서 R<sup>3</sup> 는 위에 주어진 정의를 갖는다.

[0287] 10 내지 40 개의 탄소 원자를 갖고 하나 이상의 치환기 R<sup>3</sup> 로 치환될 수도 있는 헤테로방향족 고리 시스템의 경우, 전자 풍부 고리 시스템이 특히 바람직하며, 여기서 선택적으로 R<sup>3</sup>-치환된 고리 시스템은 바람직하게는 전체적으로 단지 하나의 질소 원자를 함유하거나 또는 선택적으로 R<sup>3</sup>-치환된 고리 시스템은 전체적으로 하나 이상의 산소 및/또는 황 원자를 함유한다.

[0288] 식 (2), (2a), (2b), (2c), (2d), (2e), (2f), (2g), (2h) 및 (2i) 의 화합물 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (2), (2a), (2b), (2c), (2d), (2e), (2f), (2g), (2h) 및 (2i) 의 화합물에서, Ar<sub>3</sub> 은 바람직하게는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 Ar-1 내지 Ar-22 로부터 선택되고



[0289]



[0290]

[0291]

식중  $Y^3$  은 각각의 경우 동일하거나 상이하고 O,  $NR^{\#}$ , S 또는  $C(R^{\#})_2$  이고, N 에 결합된  $R^{\#}$  라디칼은 H 가 아니며,  $R^3$  은 위에 언급된 정의 또는 아래의 바람직한 정의를 가지며, 점선 결합은 질소 원자에 대한 결합을 나타낸다.

[0292]

$R^{\#}$  라디칼은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, H, D, F, Cl, Br, I, CN,  $NO_2$ ,  $N(Ar)_2$ ,  $N(R^2)_2$ ,  $C(=O)Ar$ ,  $C(=O)R^2$ ,  $P(=O)(Ar)_2$ ,  $P(Ar)_2$ ,  $B(Ar)_2$ ,  $Si(Ar)_3$ ,  $Si(R^2)_3$ , 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 3 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 분지형 또는 환형 알킬, 알콕시 또는 티오알킬 기 또는 2 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐 기 (이들 각각은 하나 이상의  $R^2$  라디칼에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 하나 이상의 비인접  $CH_2$  기는  $R^2C=CR^2$ ,  $Si(R^2)_2$ , C=O, C=S,  $C=NR^2$ ,  $P(=O)(R^2)$ , SO,  $SO_2$ ,  $NR^2$ , O, S 또는  $CONR^2$  에 의해 대체될 수도 있고, 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는  $NO_2$  에 의해 대체될 수도 있음), 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 각각의 경우 하나 이상의  $R^2$  라디칼에 의해 치환될 수도 있는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템, 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의  $R^2$  라디칼에 의

해 치환될 수도 있는 아릴옥시 또는 헤테로아릴옥시 기, 또는 5 내지 40 개의 방향족 고리 원자를 갖고 하나 이상의 R<sup>2</sup> 라디칼에 의해 치환될 수도 있는 아르알킬 또는 헤테로아르알킬 기이고; 동시에, 동일한 탄소 원자 또는 인접한 탄소 원자에 결합된 2 개의 치환기 R<sup>#</sup> 가 하나 이상의 R<sup>2</sup> 라디칼에 의해 치환될 수도 있는 단환 또는 다환의 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 형성하는 것이 선택적으로 가능하다.

[0293] Y<sup>3</sup> 은 바람직하게는 O, S 또는 C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> 이다. Y<sup>3</sup> 은 가장 바람직하게는 O 이다.

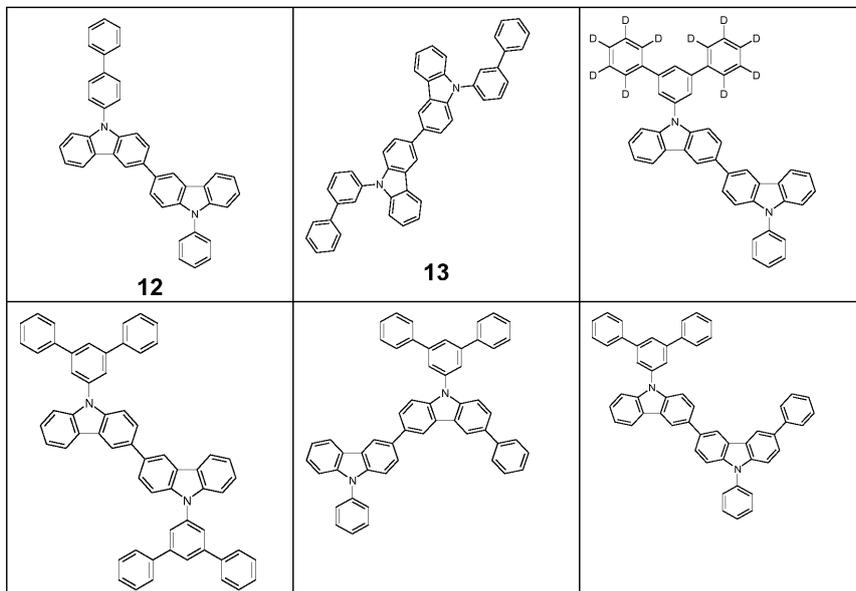
[0294] 구조 Ar-1 내지 Ar-22 에서, 치환기 R<sup>3</sup> 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하고, H, D, F, CN, 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드록카르빌 라디칼, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템 (여기서 하나 이상의 수소 원자는 D, F, Cl, Br, I 또는 CN 으로 대체될 수 있고, 각각 1 내지 4 개의 탄소 원자를 갖는 하나 이상의 알킬기에 의해 치환될 수 있음) 로 이루어지는 군으로부터 선택되고; 동시에, 둘 이상의 인접한 치환기 R<sup>3</sup> 은 함께 단환 또는 다환의 지방족 고리 시스템을 형성하는 것이 가능하다. 구조 Ar-1 내지 Ar-22 에서, 치환기 R<sup>3</sup> 은 각각의 경우에 동일하거나 상이하고, H, F, CN, 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 지방족 히드록카르빌 라디칼, 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어지는 군으로부터 바람직하게 선택된다. 구조 Ar-1 내지 Ar-22

에서, 치환기 R<sup>3</sup> 은 각각의 경우 동일하거나 상이하고, 위에 설명된 바처럼, H 또는 5 내지 30 개의 방향족 고리 원자를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템으로 이루어진 군으로부터 바람직하게 선택되지만, 바람직하게는 디벤조푸란, 디벤조티오펜, 9-페닐카르바졸 또는 스피로바이플루오렌이다.

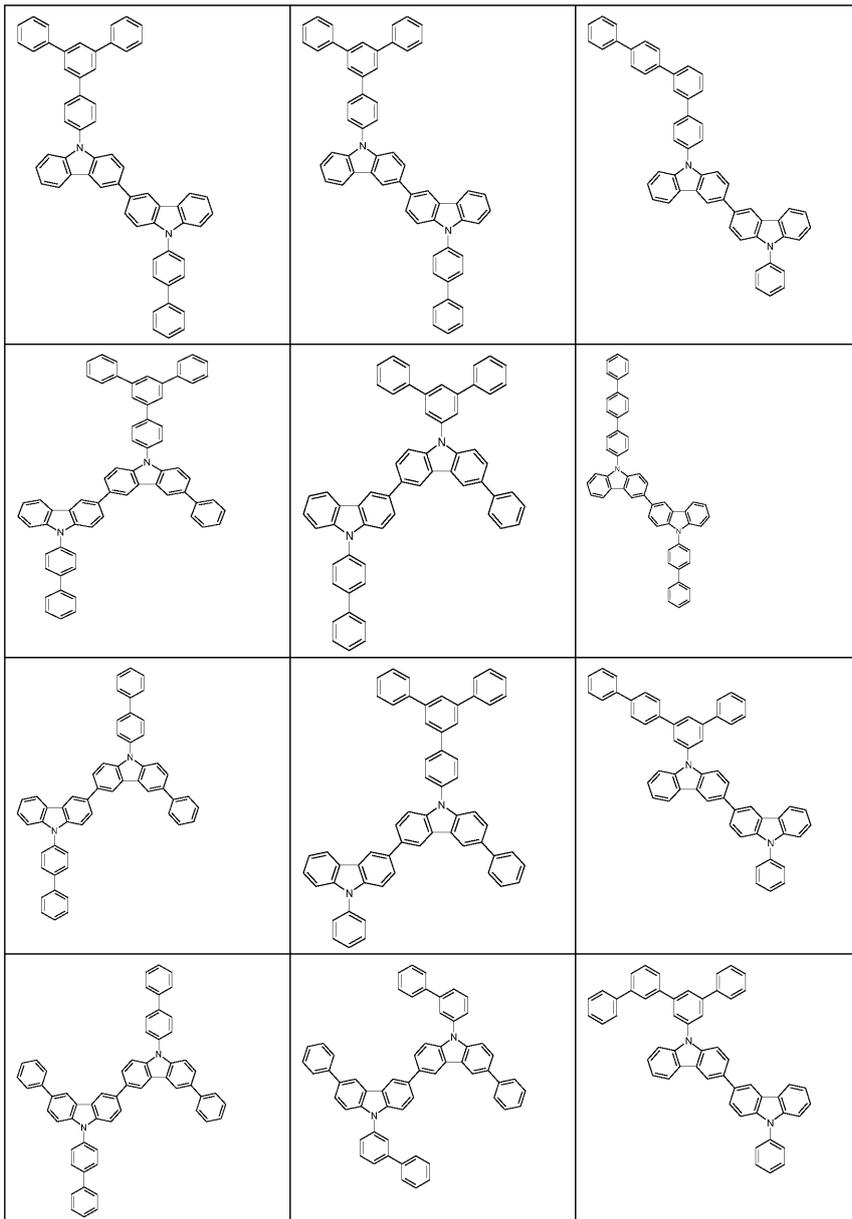
[0295] 구조 Ar-1 내지 Ar-22에서, 치환기 R<sup>3</sup> 은 각각의 경우 보다 바람직하게는 H 이다.

[0296] 본 발명에 따라 선택되는 식 (2), (2a), (2b), (2c), (2d), (2e), (2f), (2g), (2h) 및 (2i) 의 적합한 화합물의 예는 아래 표 3 에 나타난 구조이다.

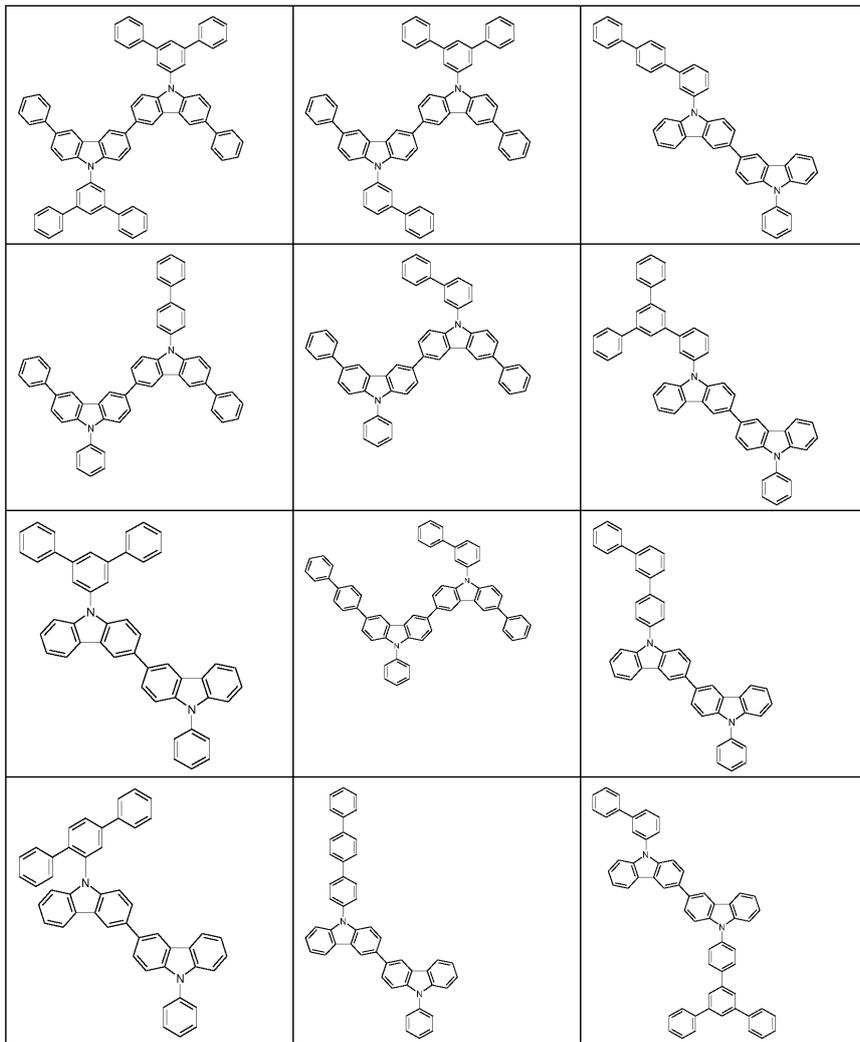
[0297] 표 3



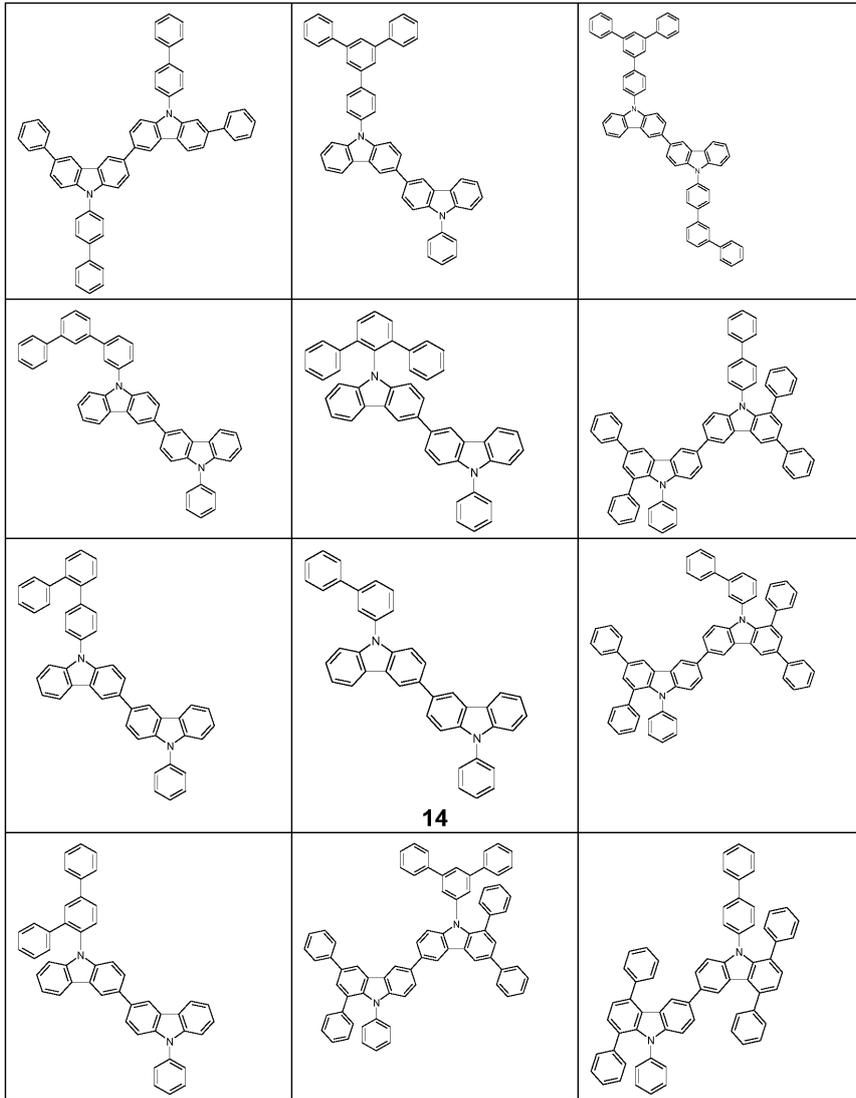
[0298]



[0299]

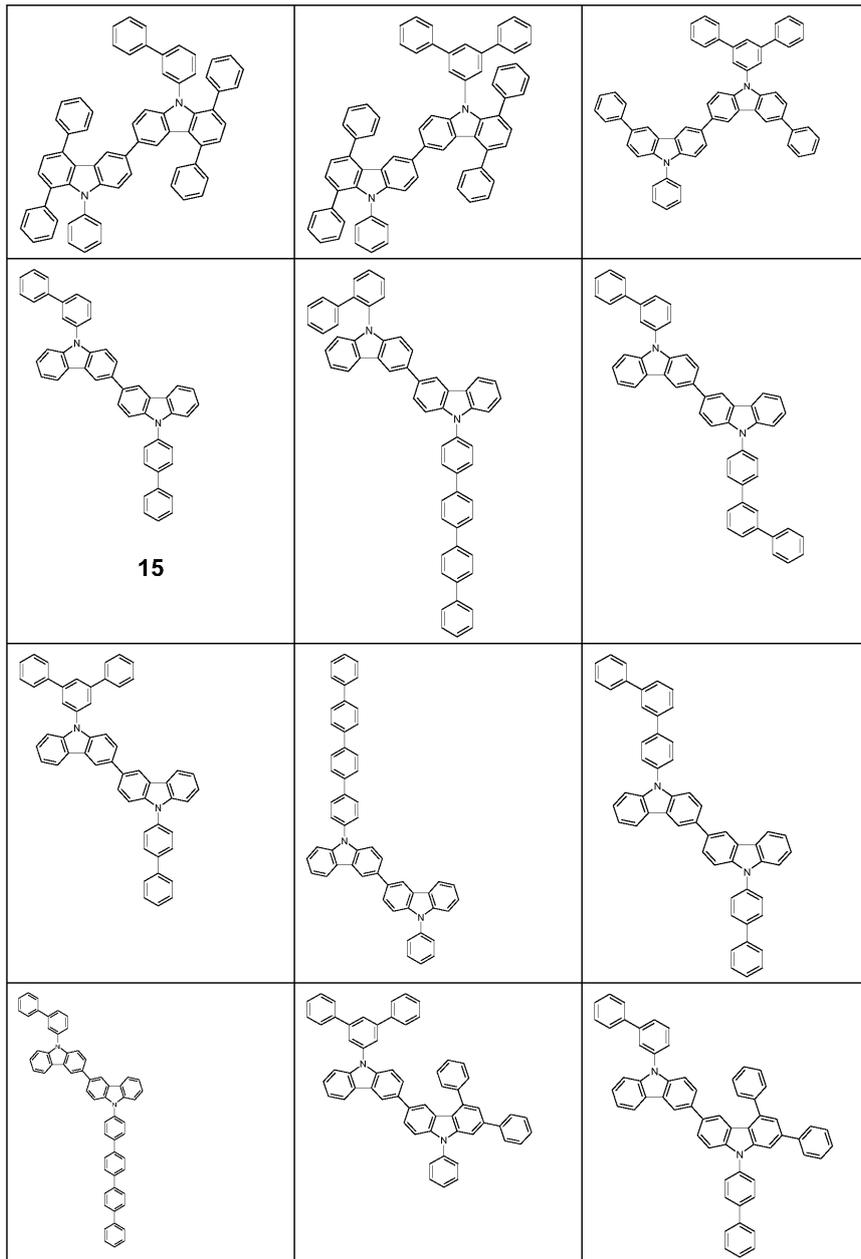


[0300]

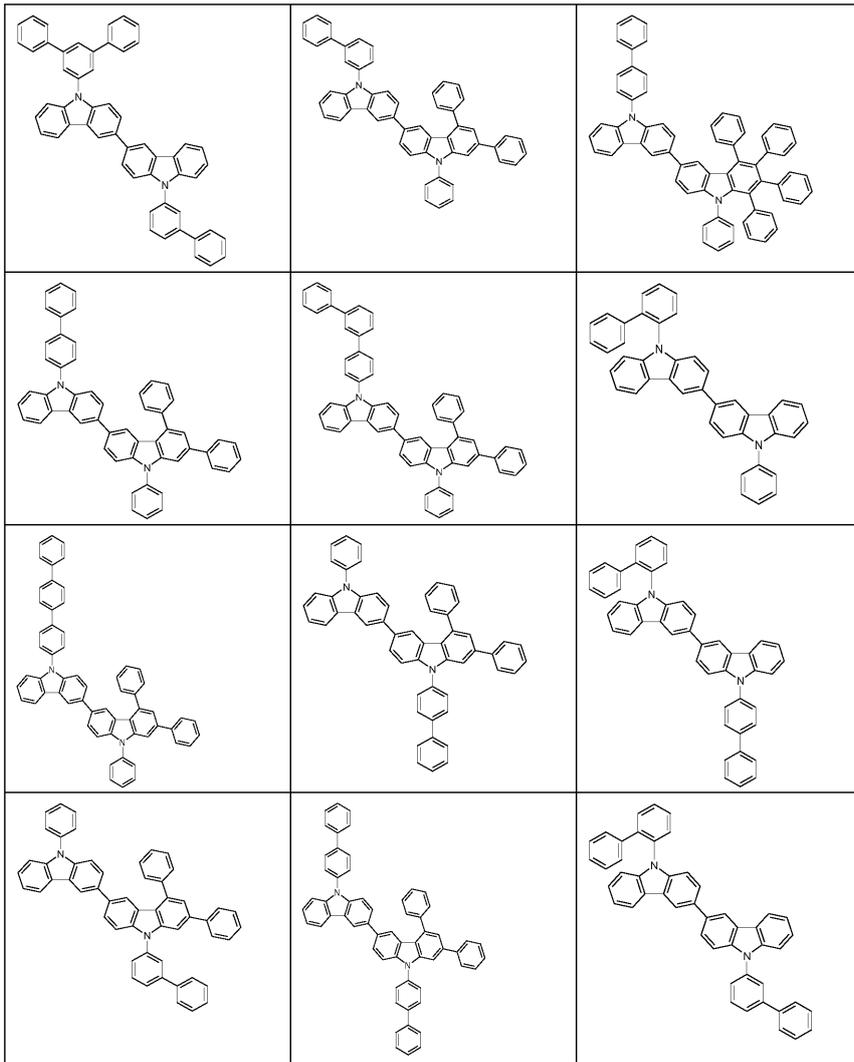


14

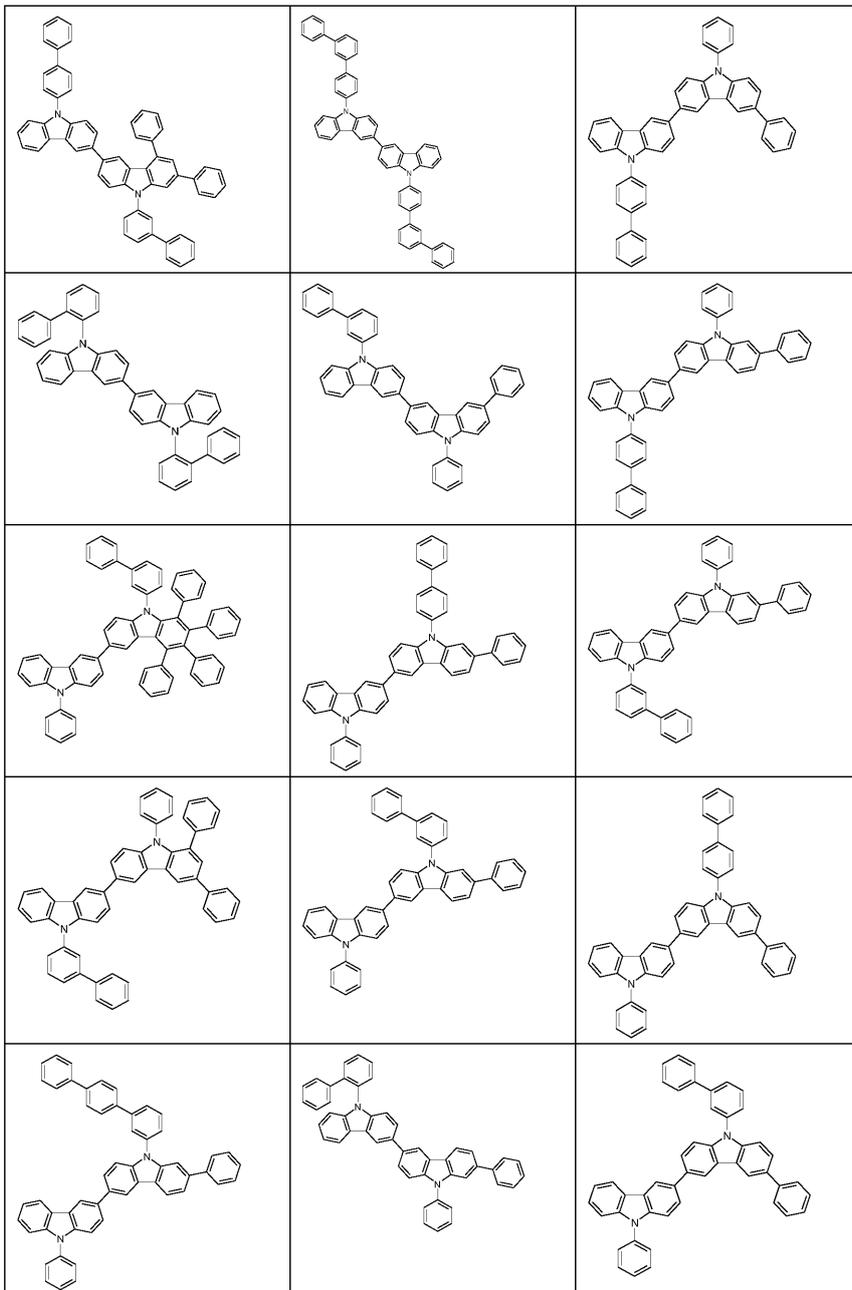
[0301]



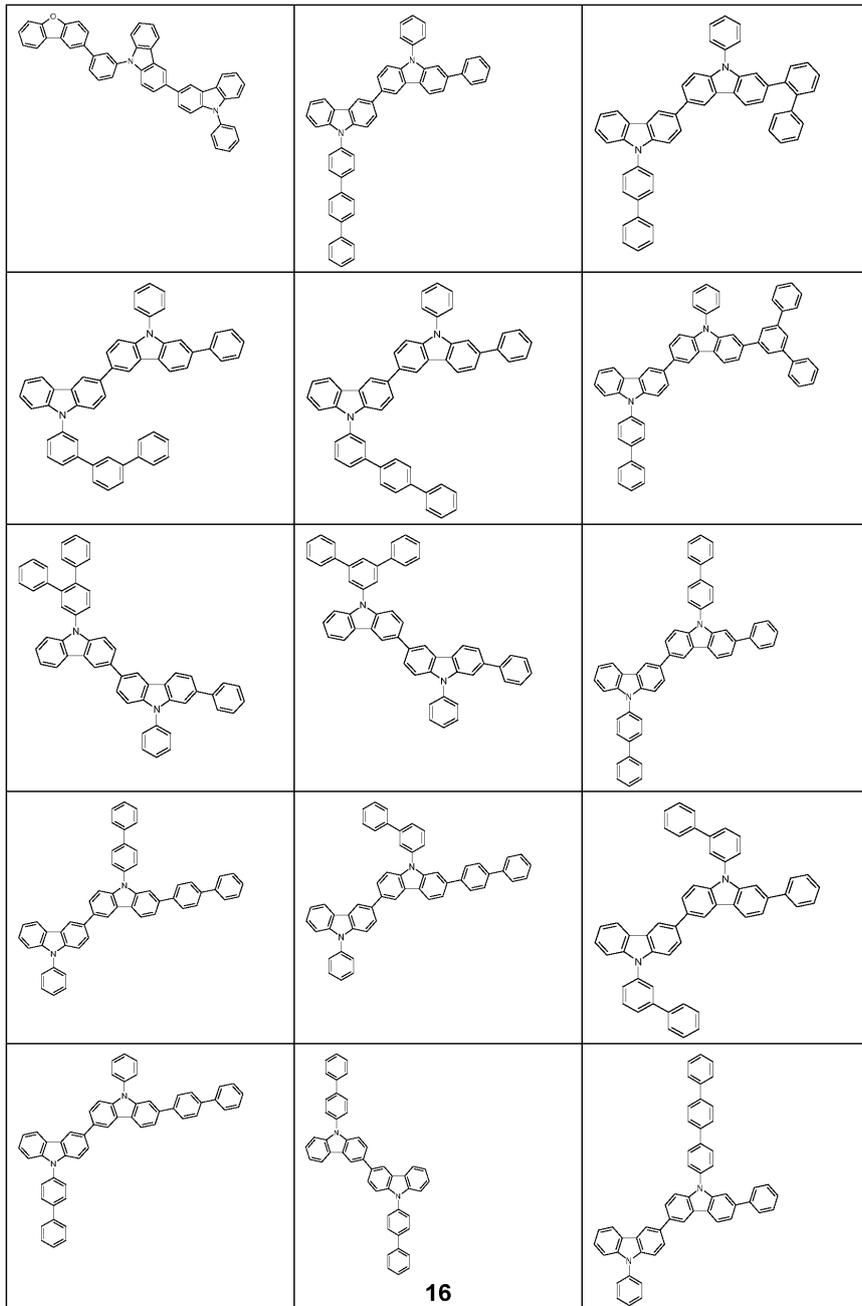
[0302]



[0303]

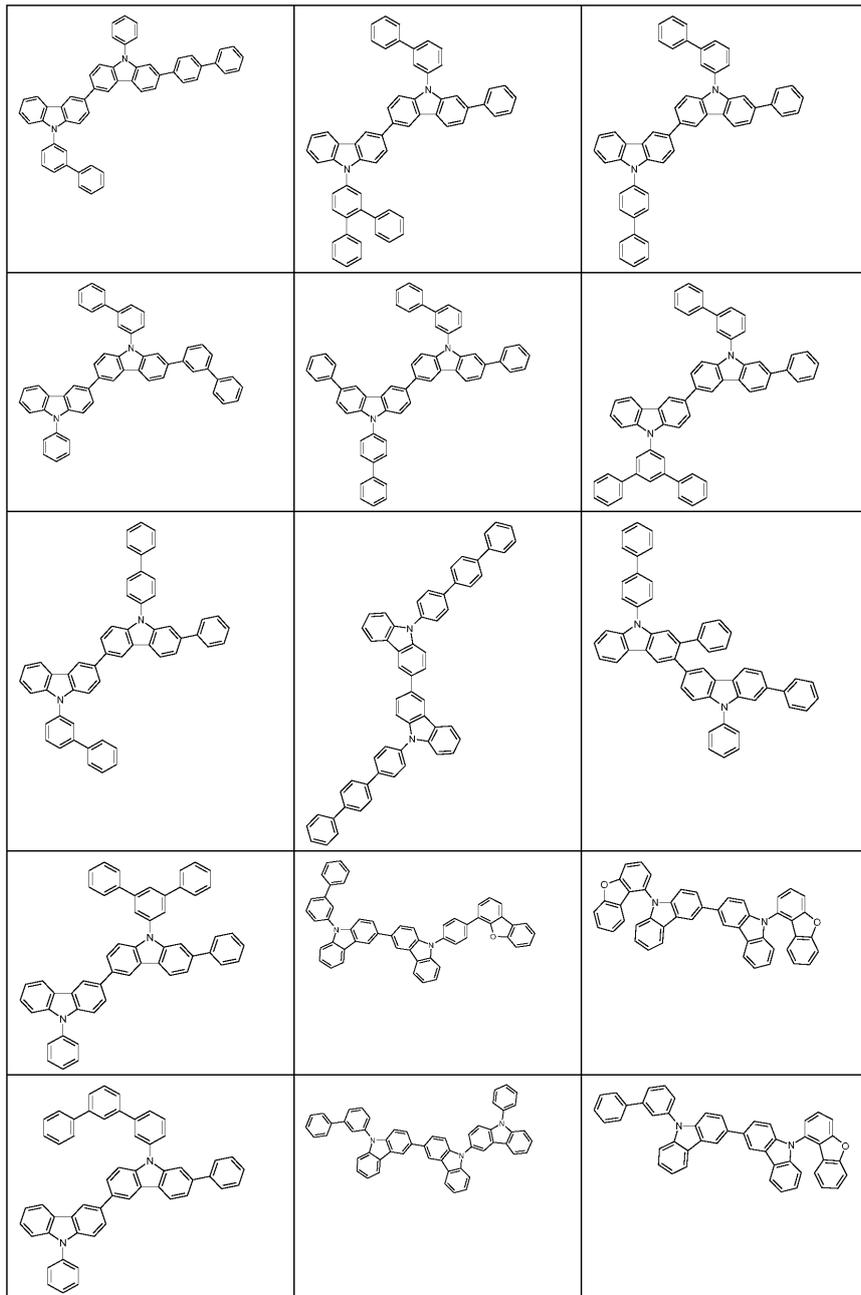


[0304]

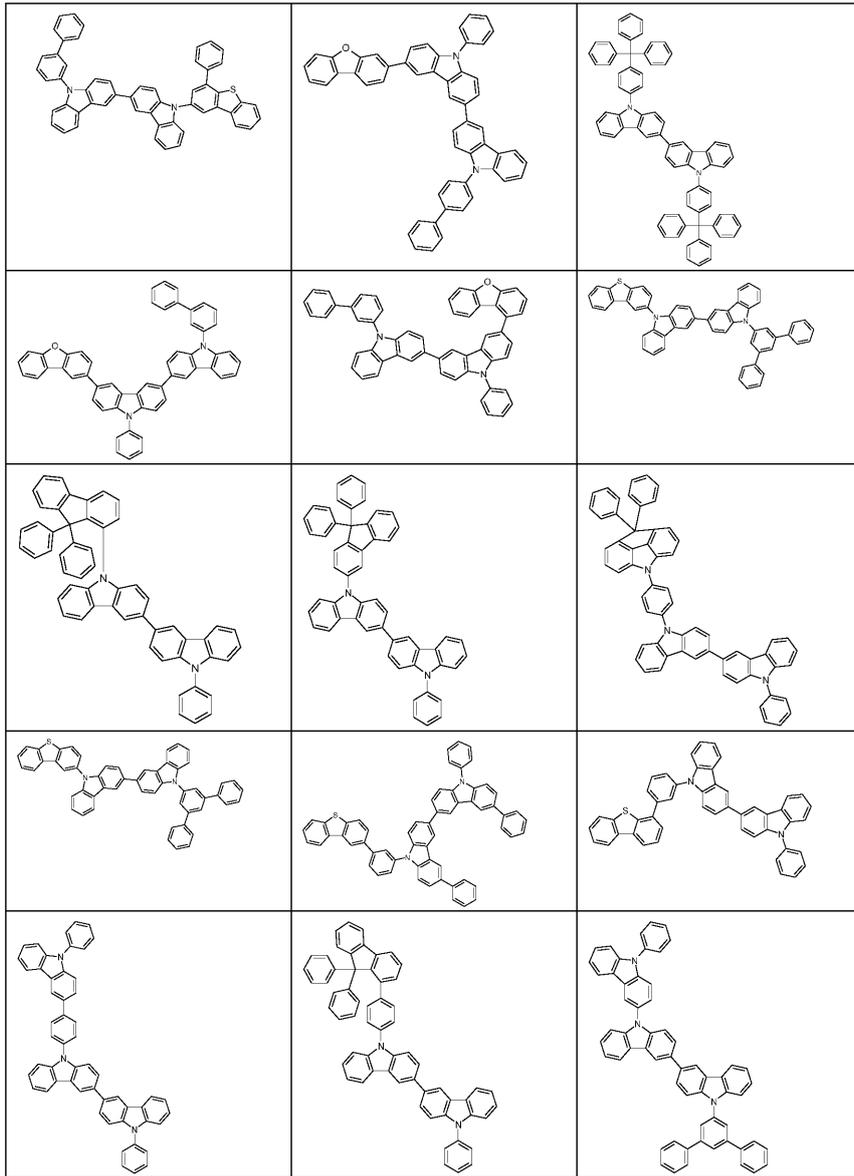


16

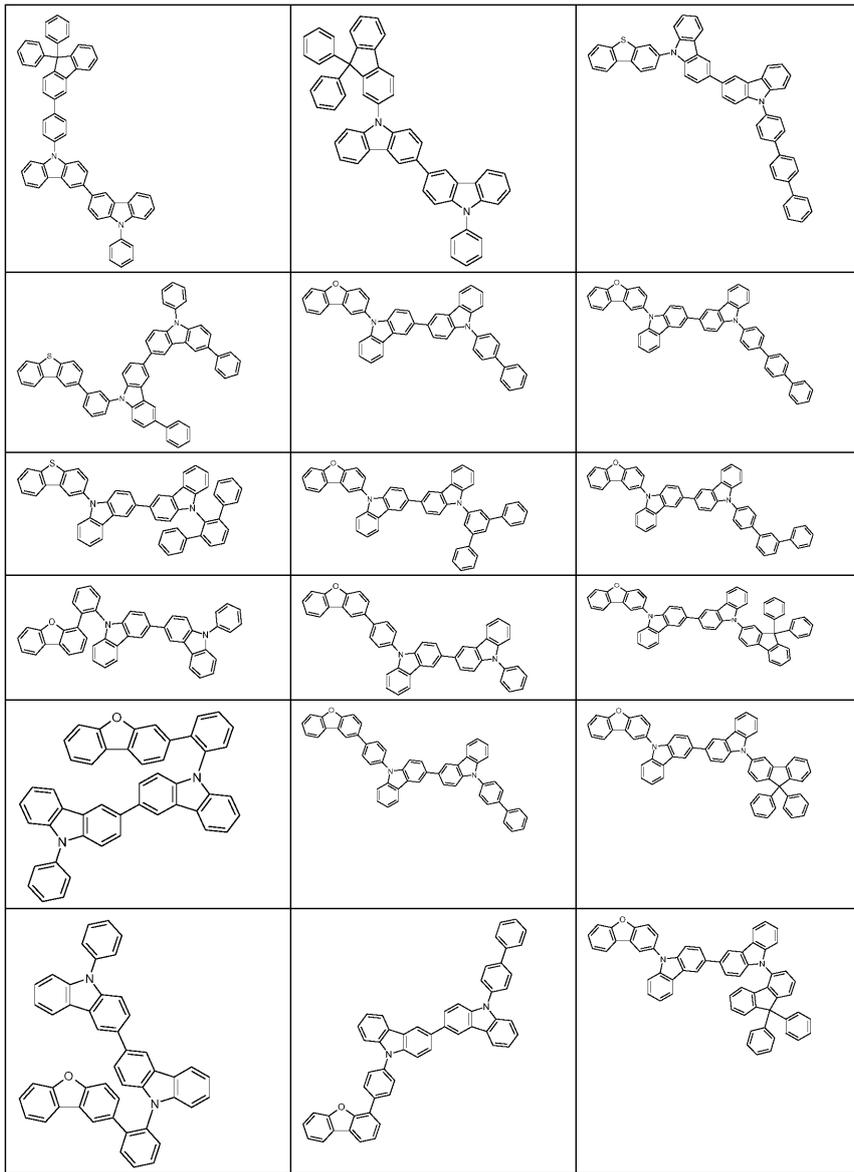
[0305]



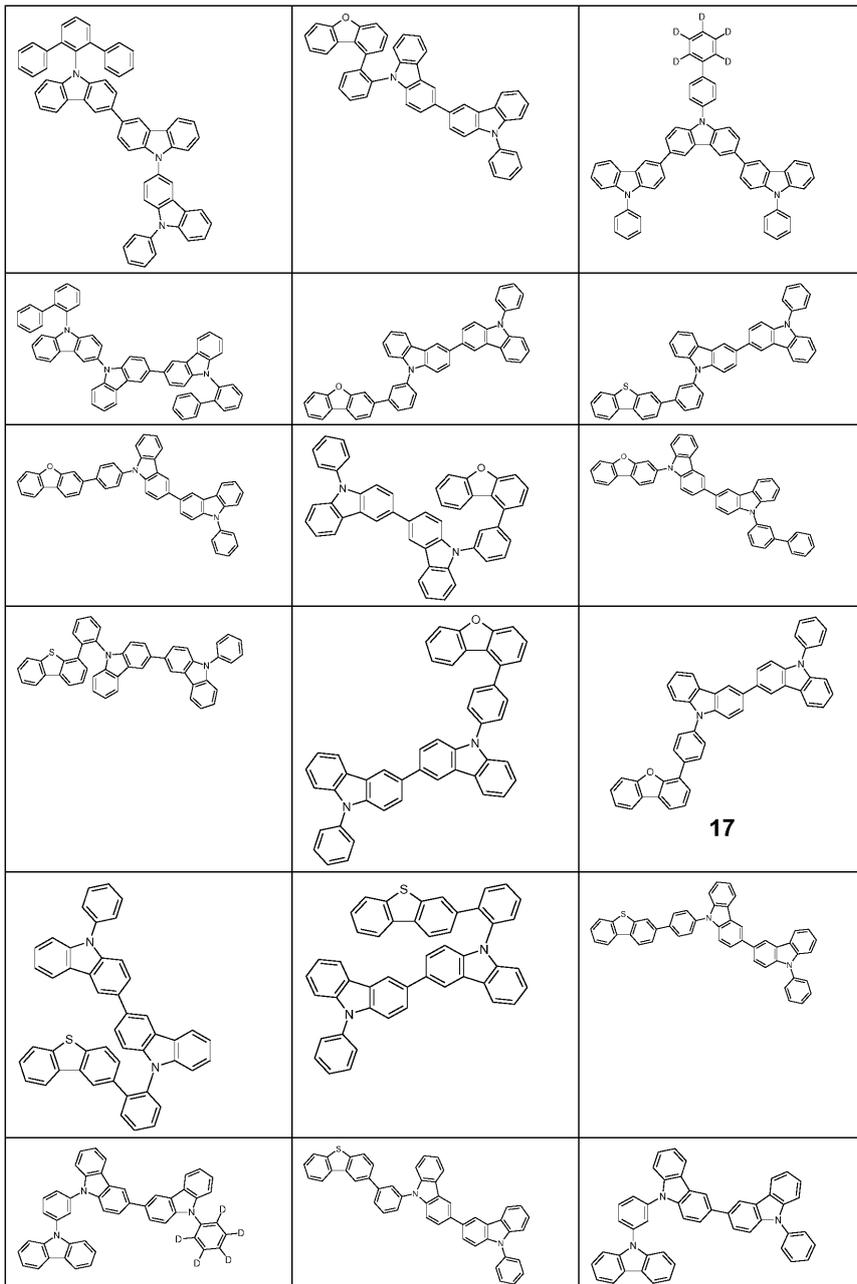
[0306]



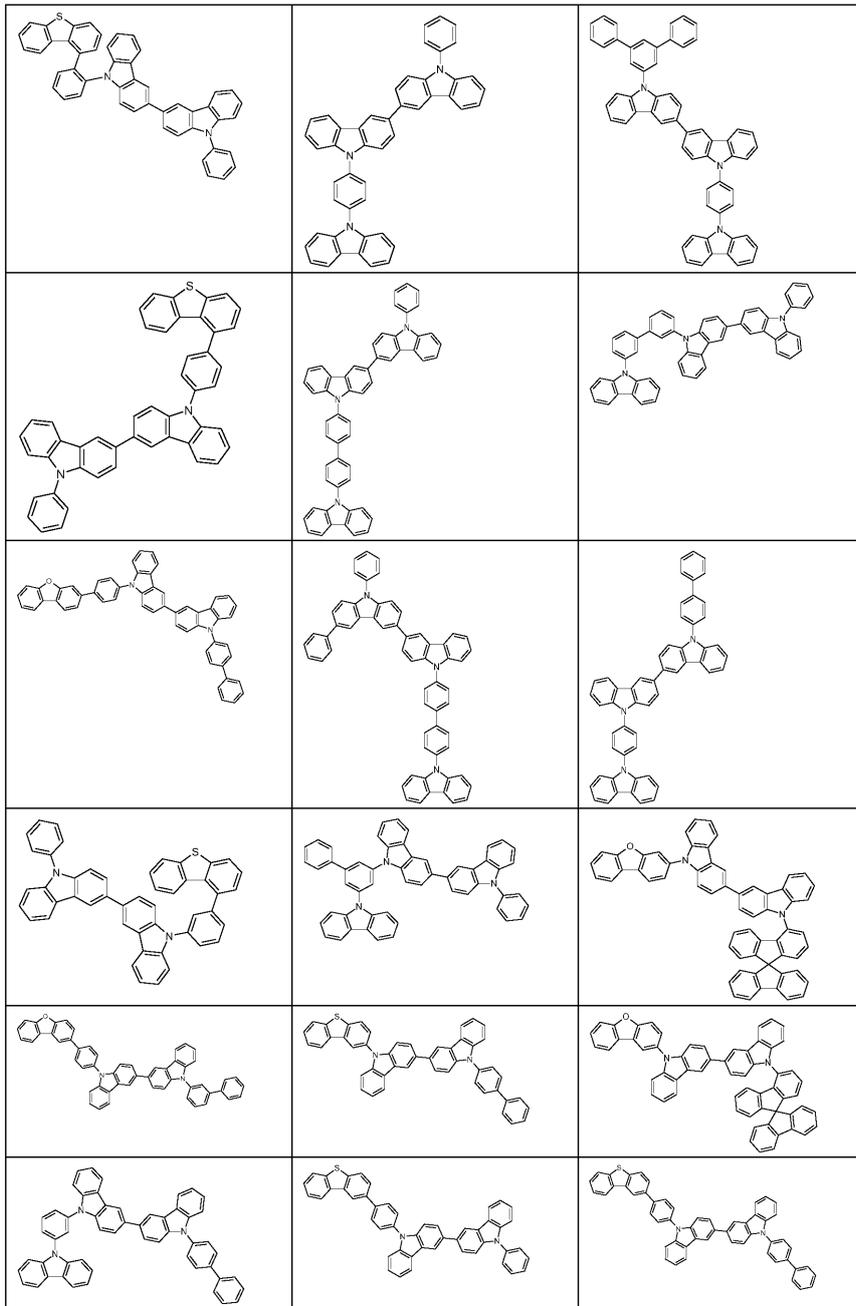
[0307]



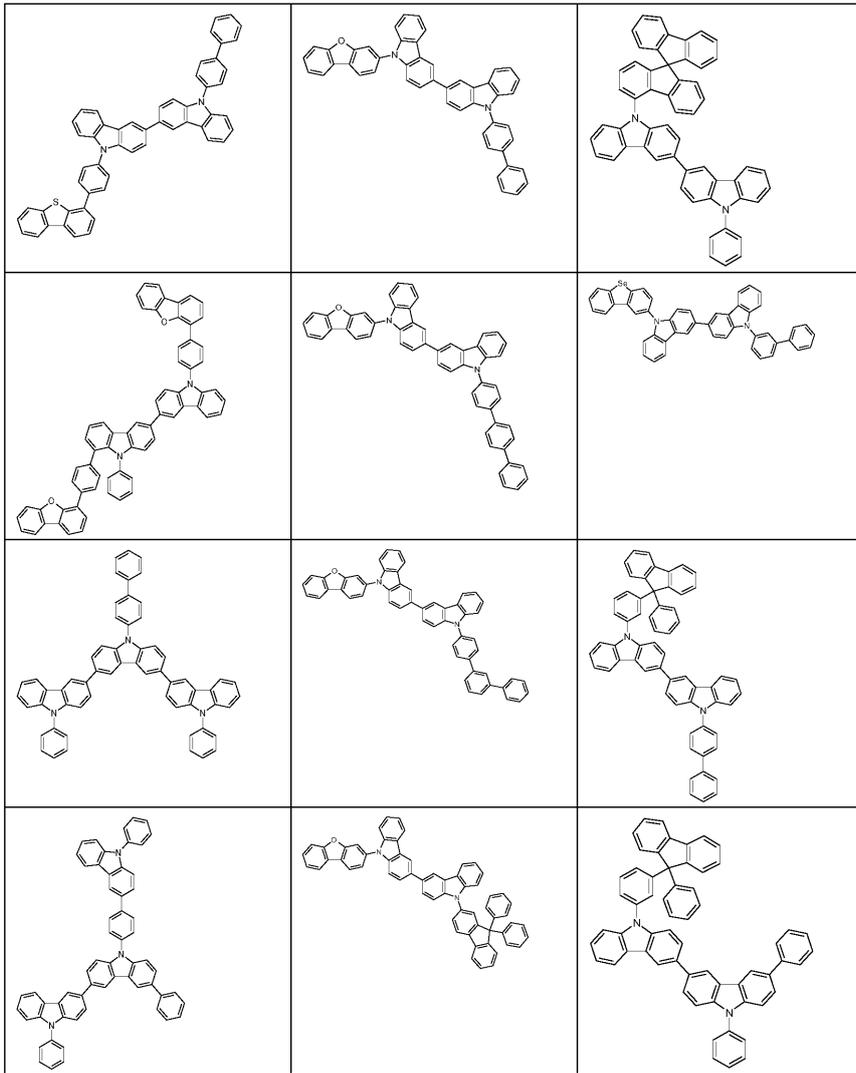
[0308]



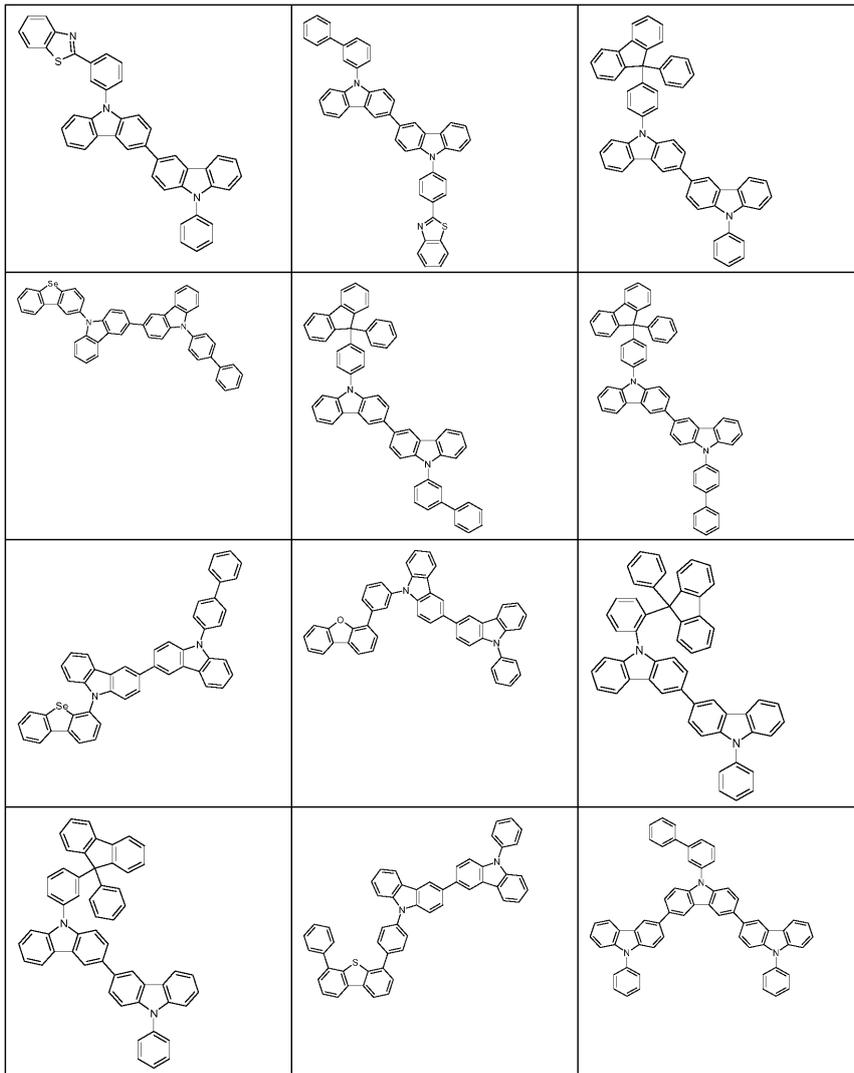
[0309]



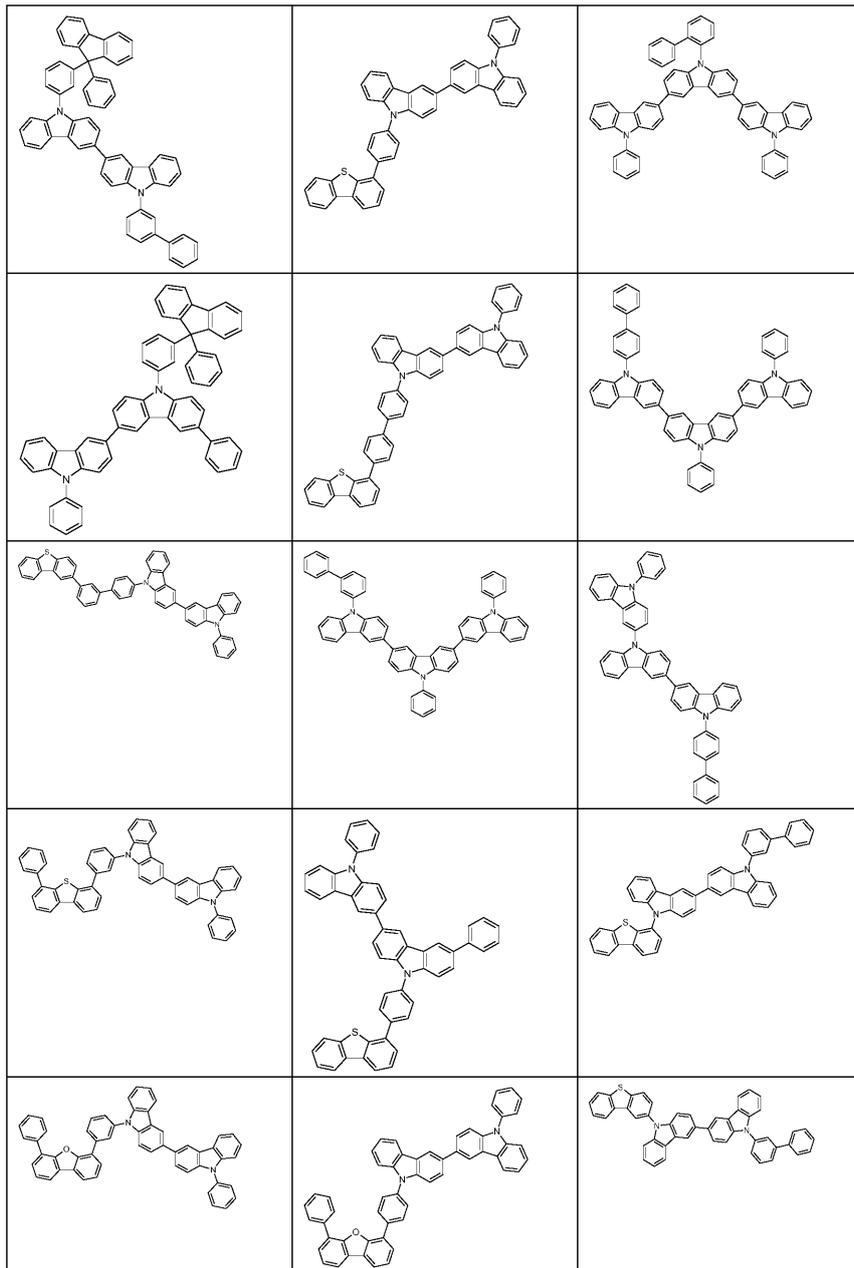
[0310]



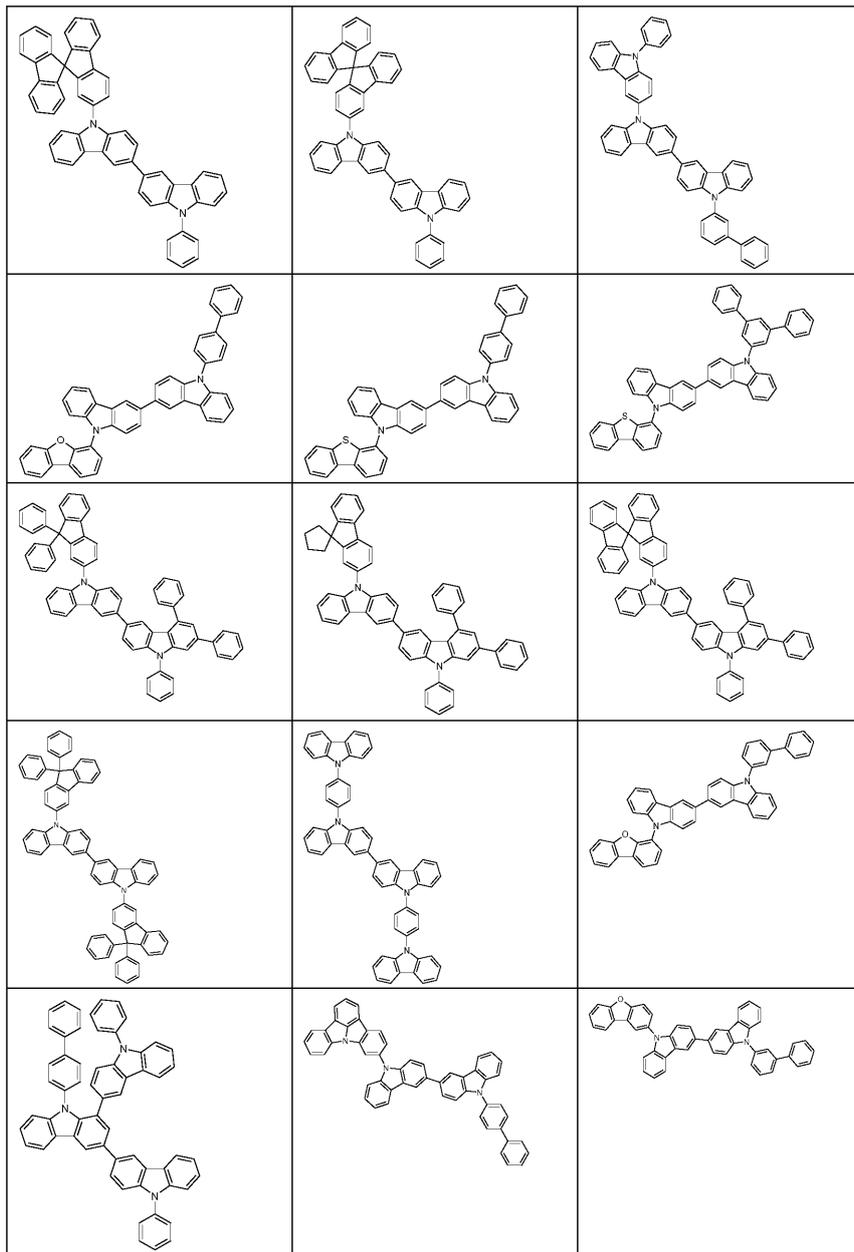
[0311]



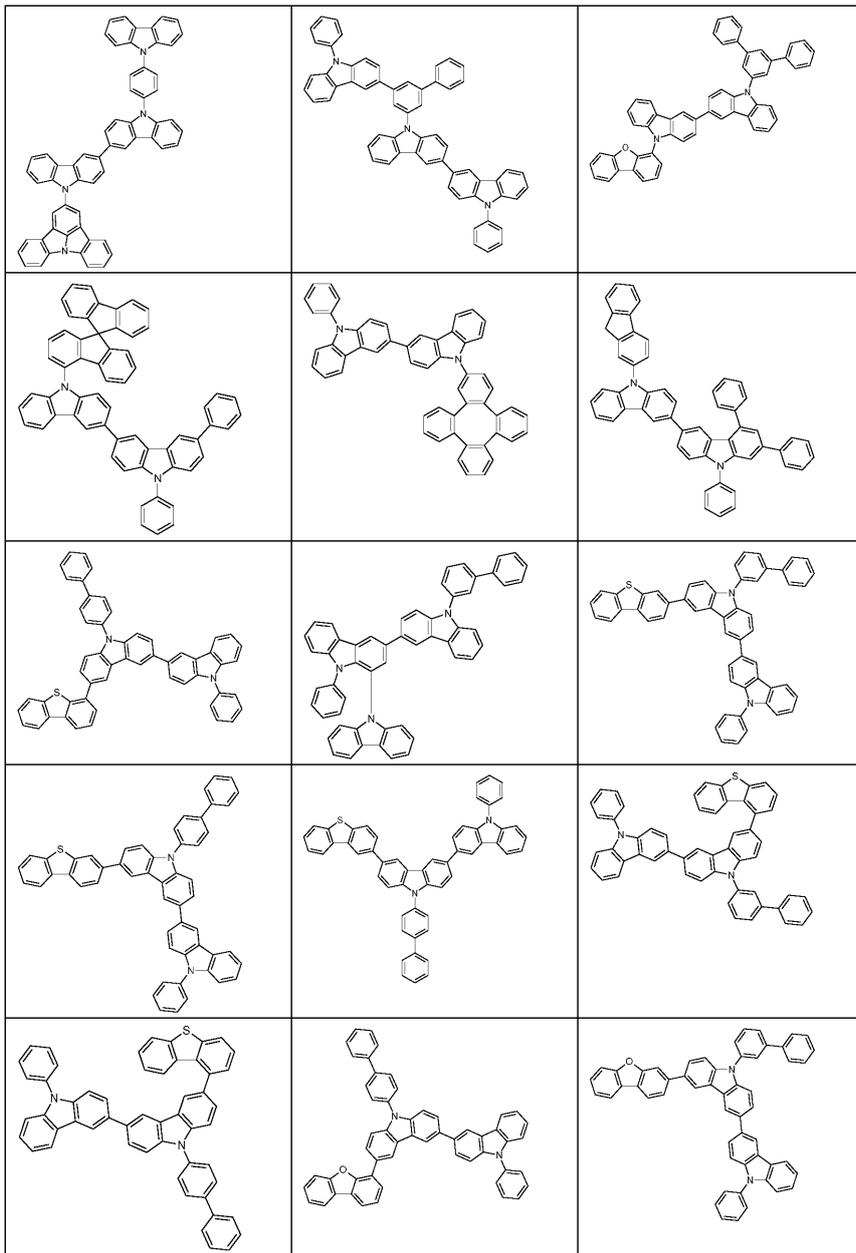
[0312]



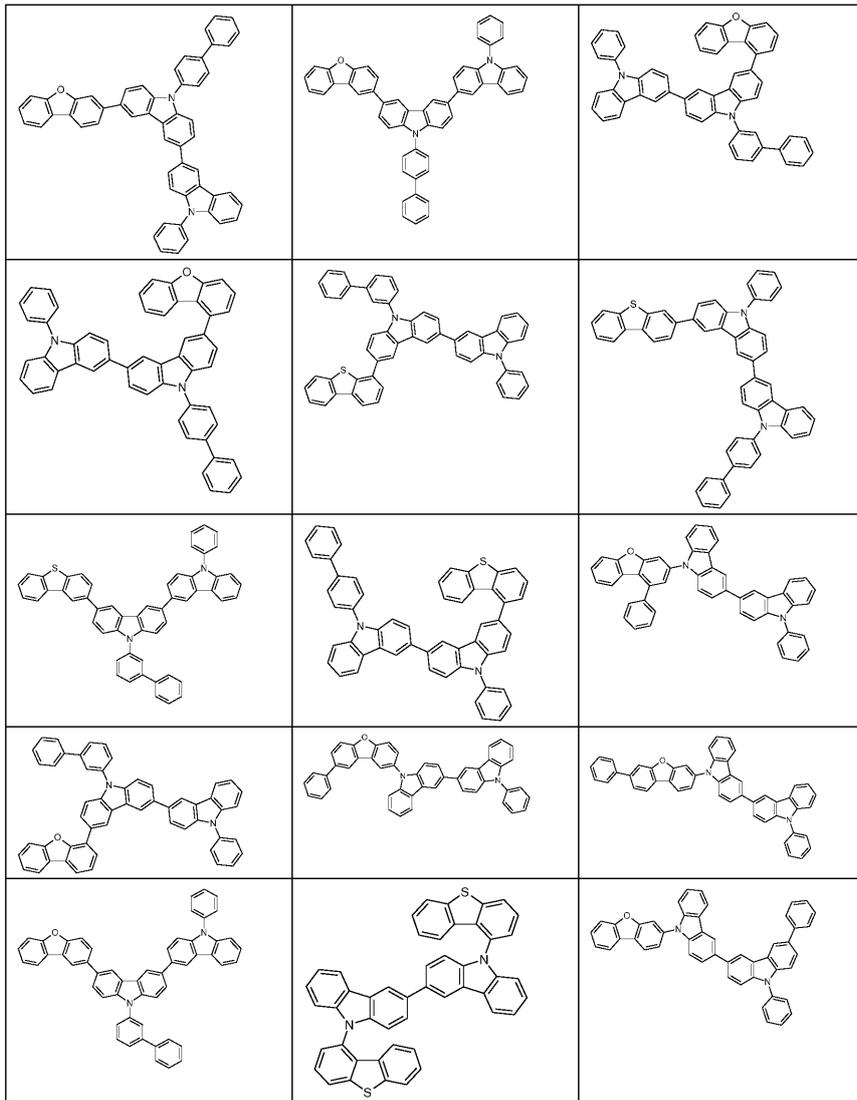
[0313]



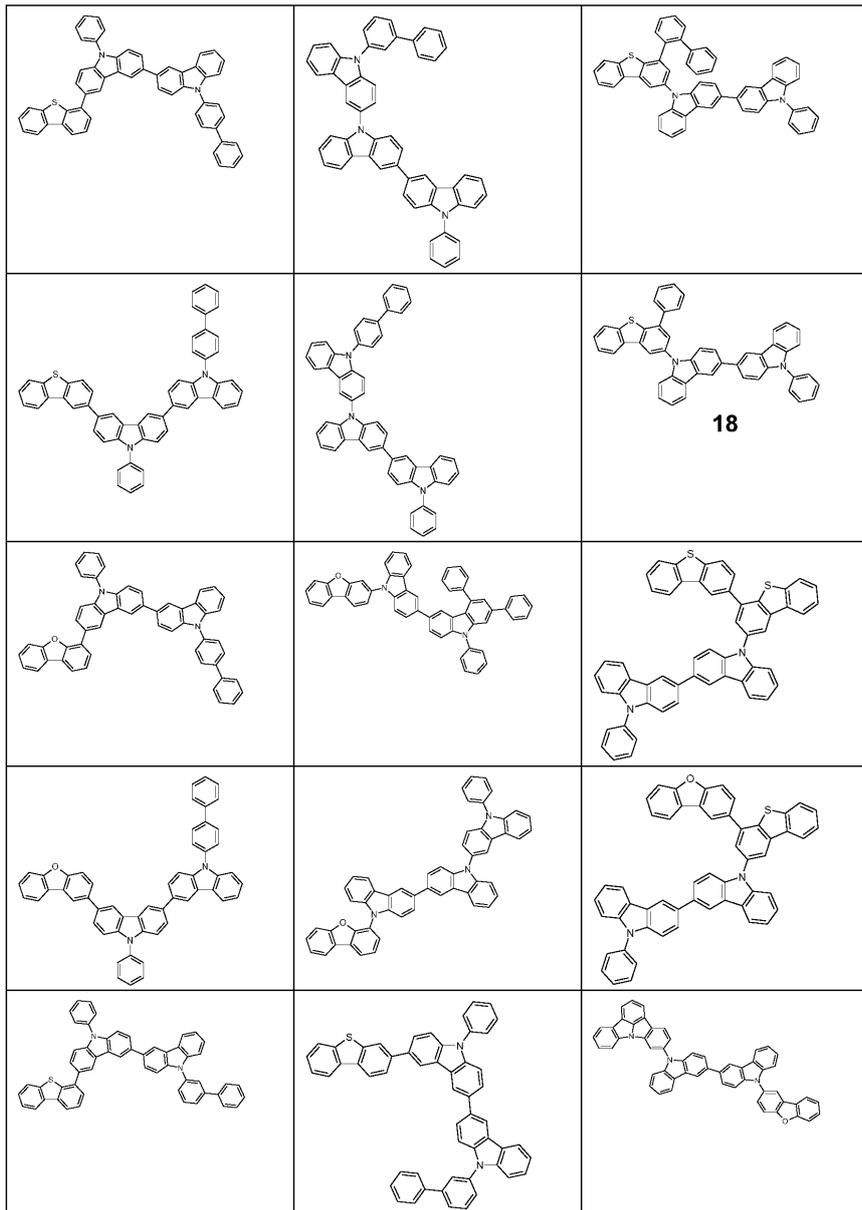
[0314]



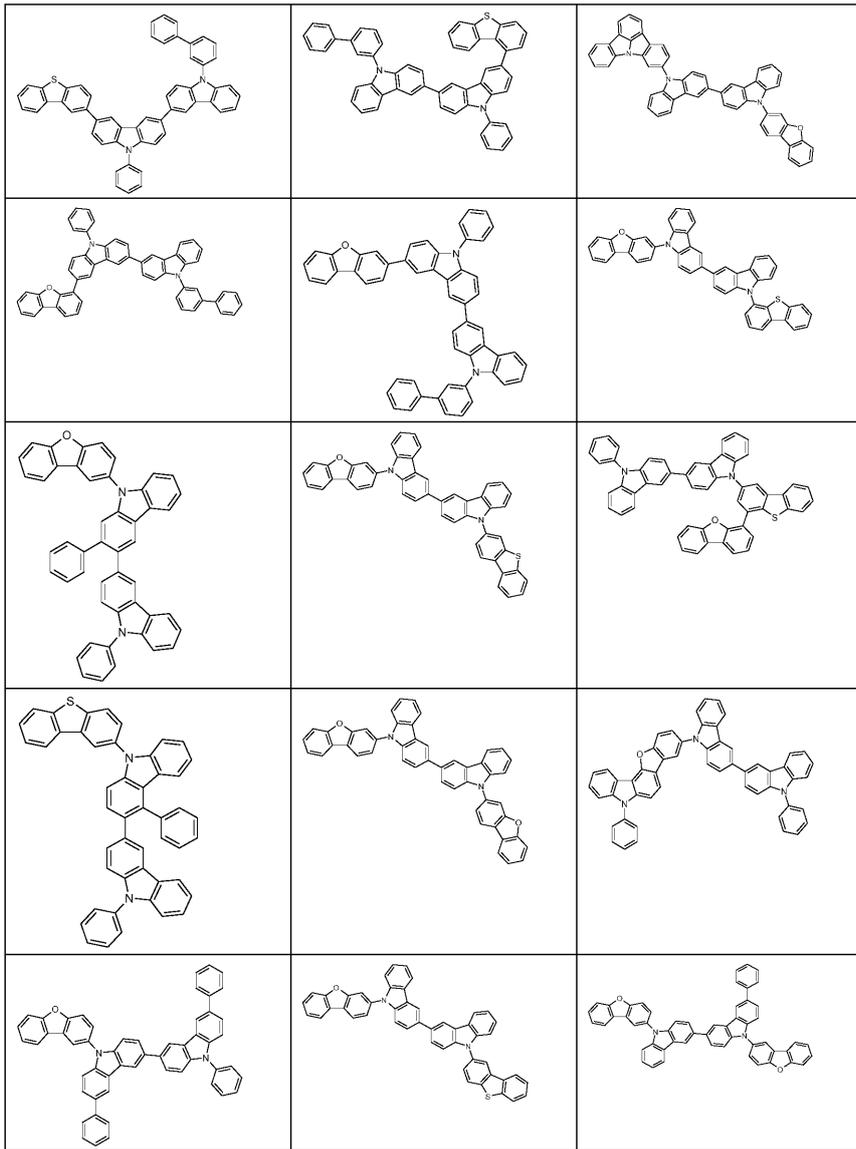
[0315]



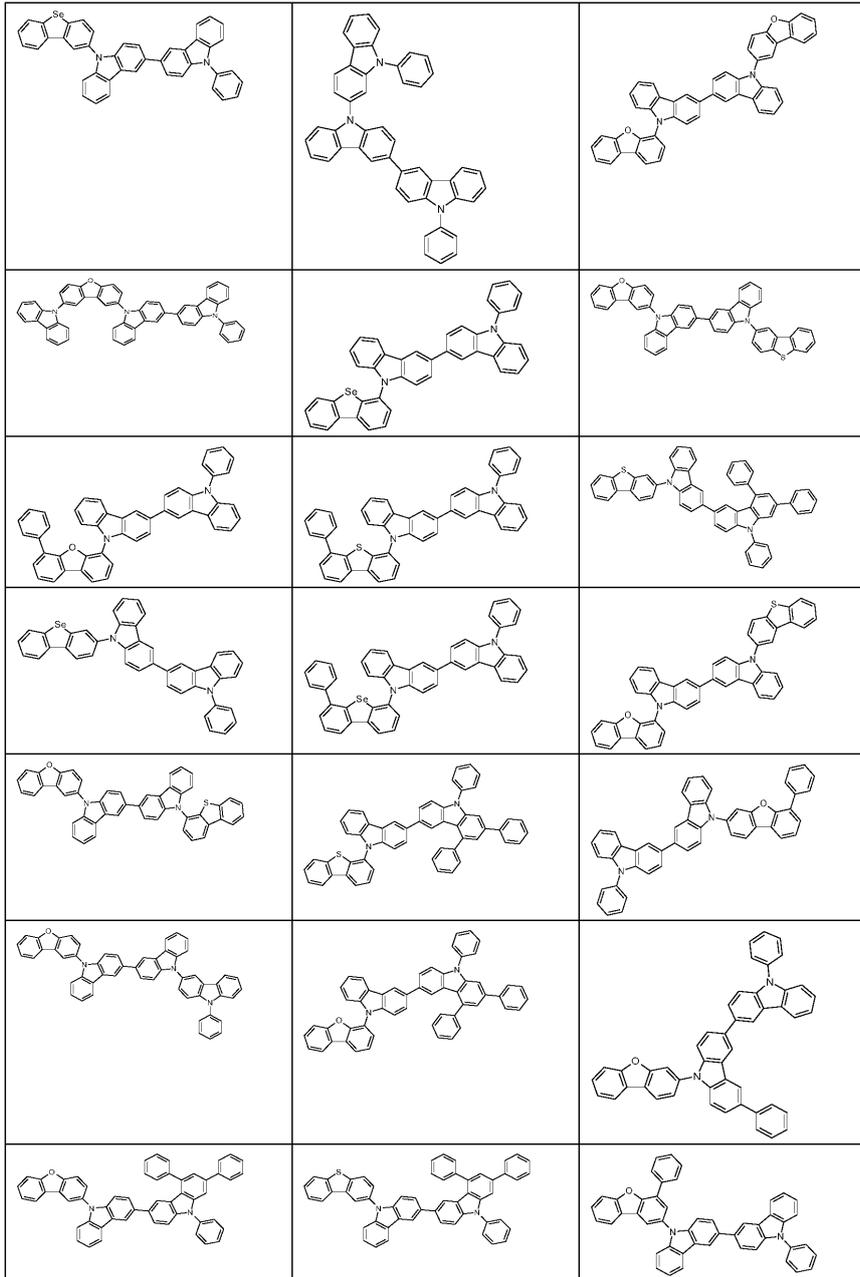
[0316]



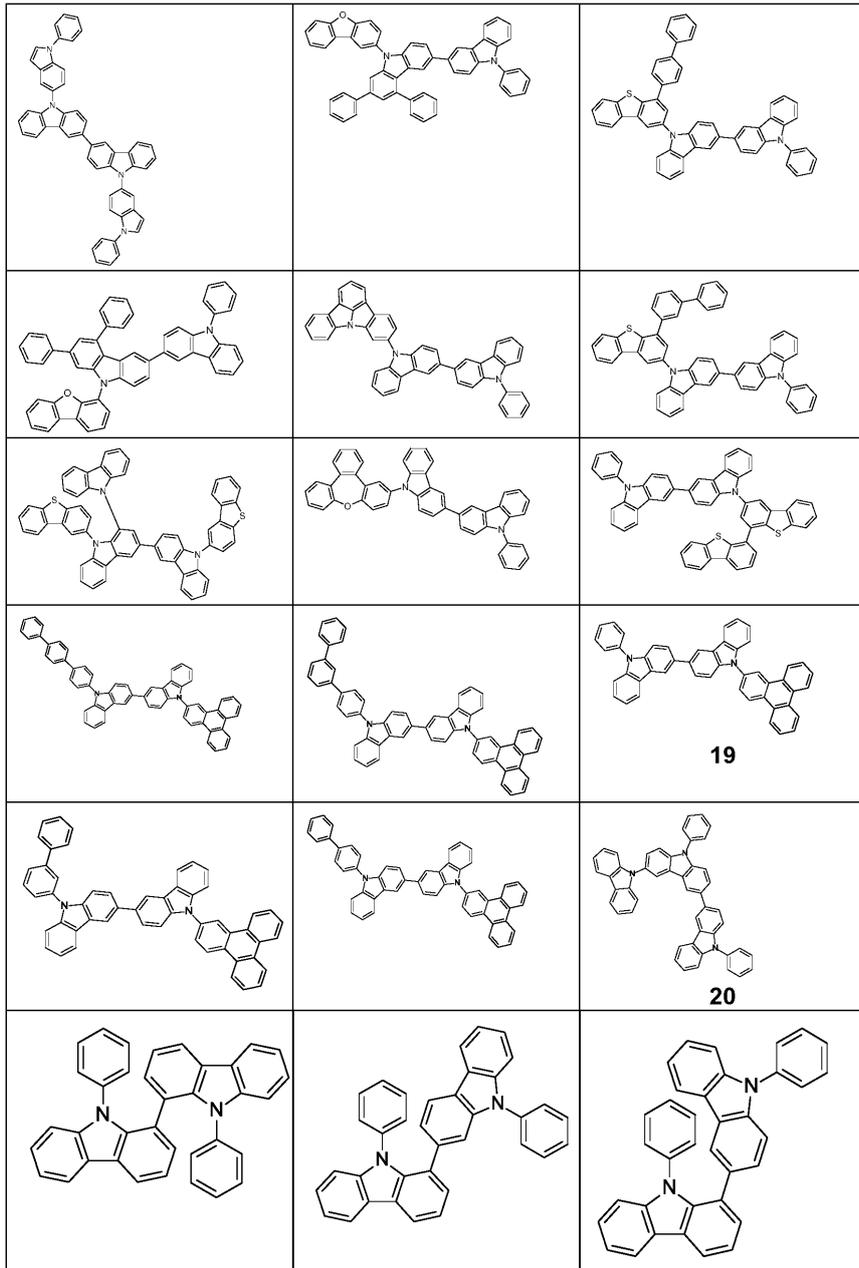
[0317]



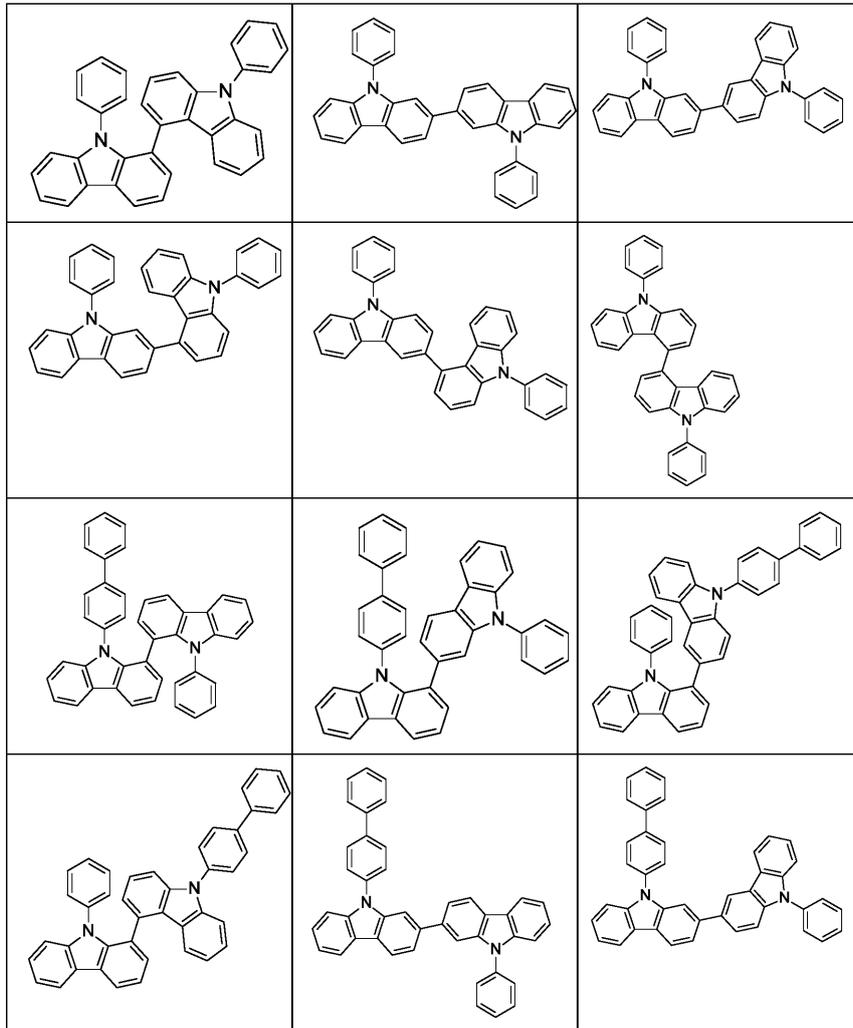
[0318]



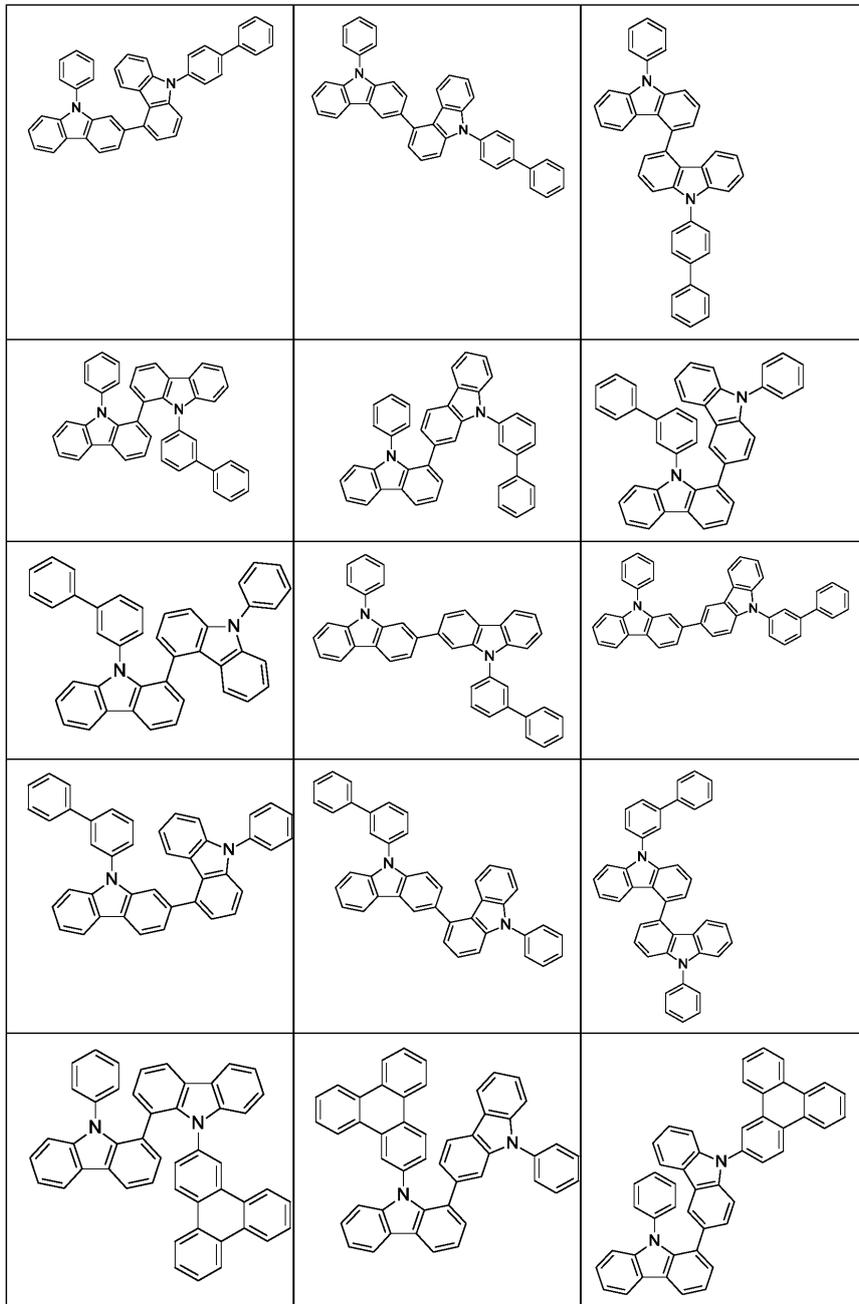
[0319]



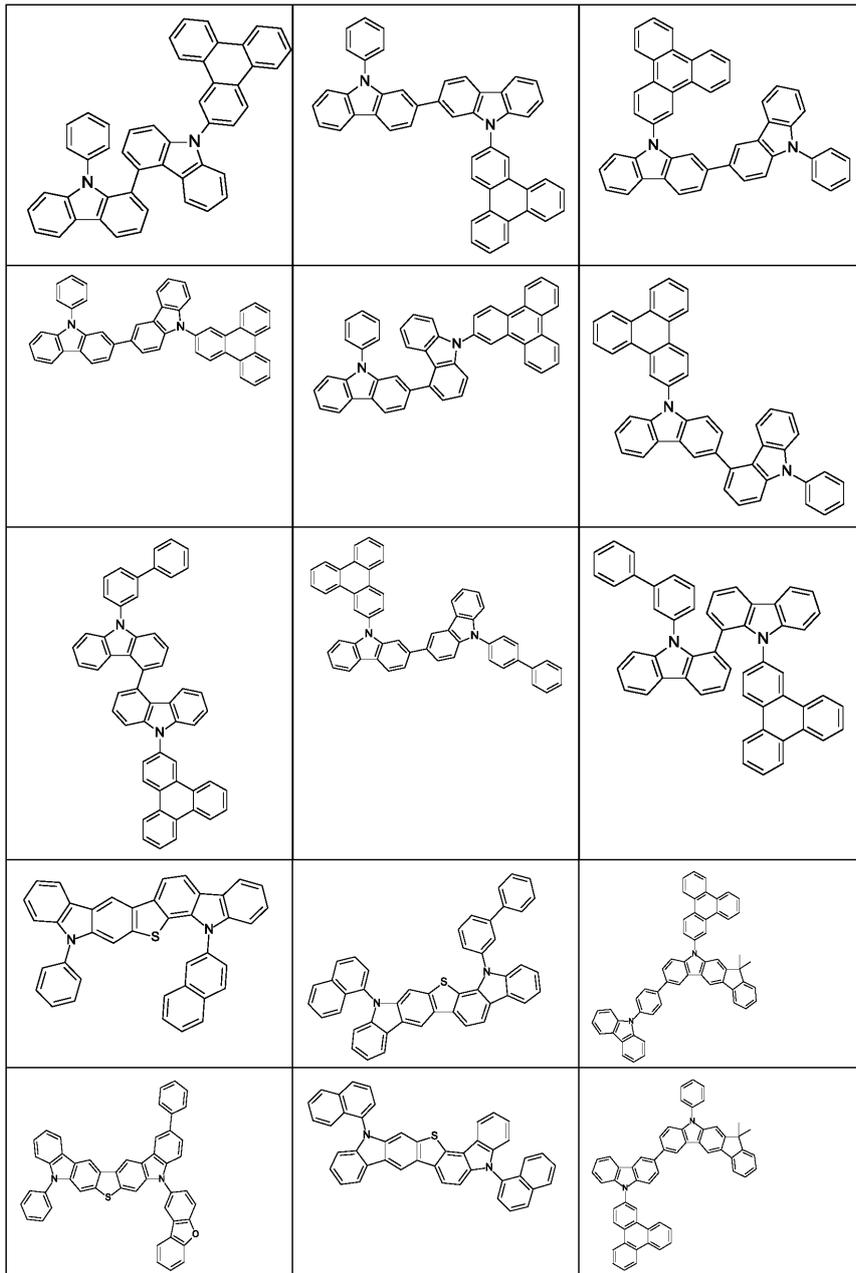
[0320]



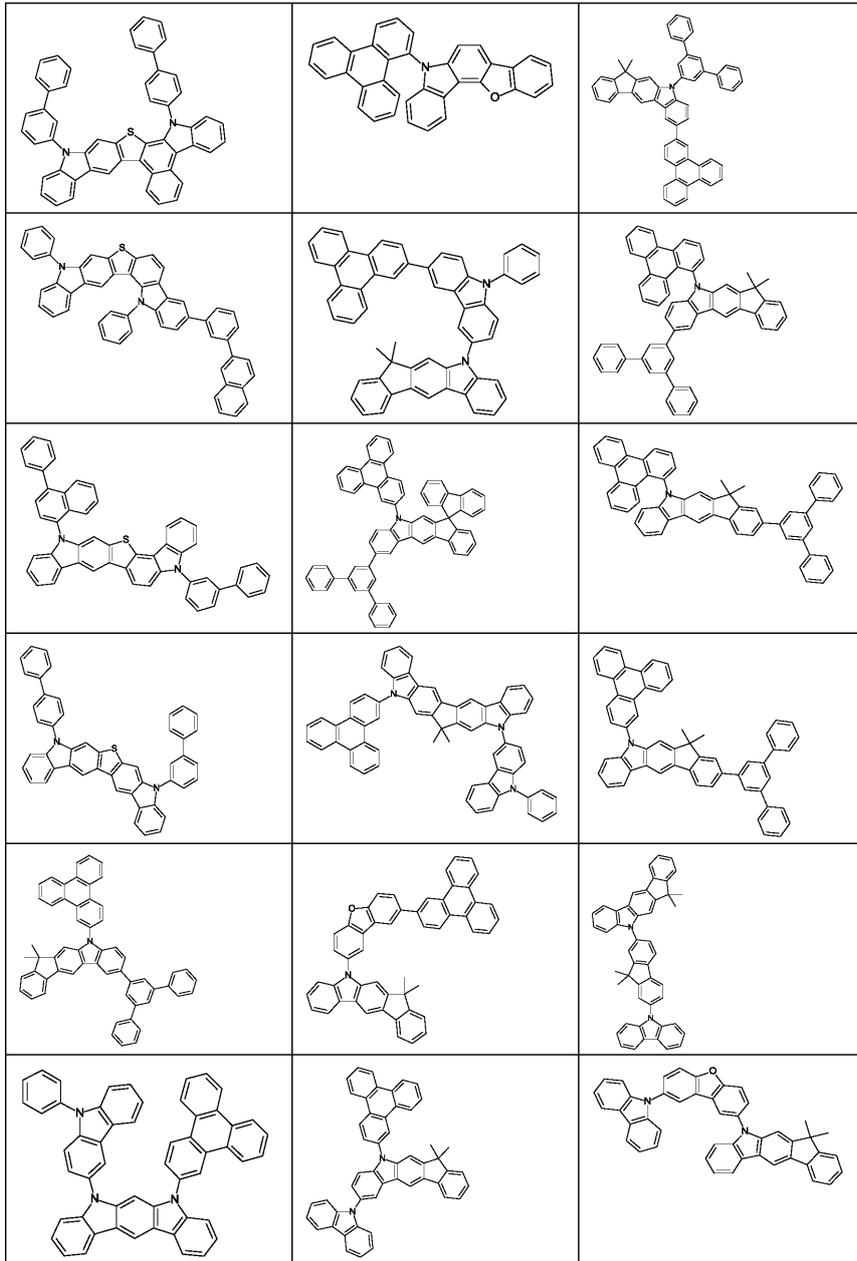
[0321]



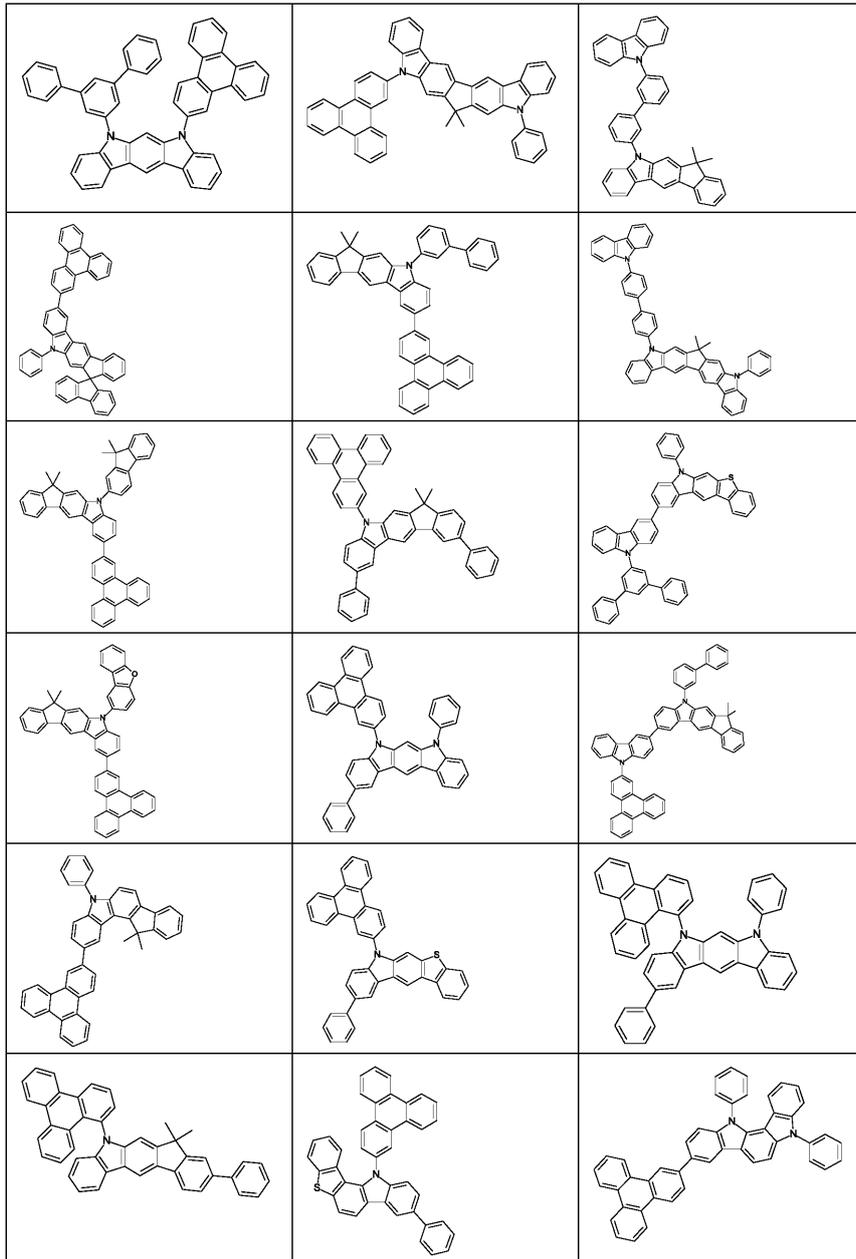
[0322]



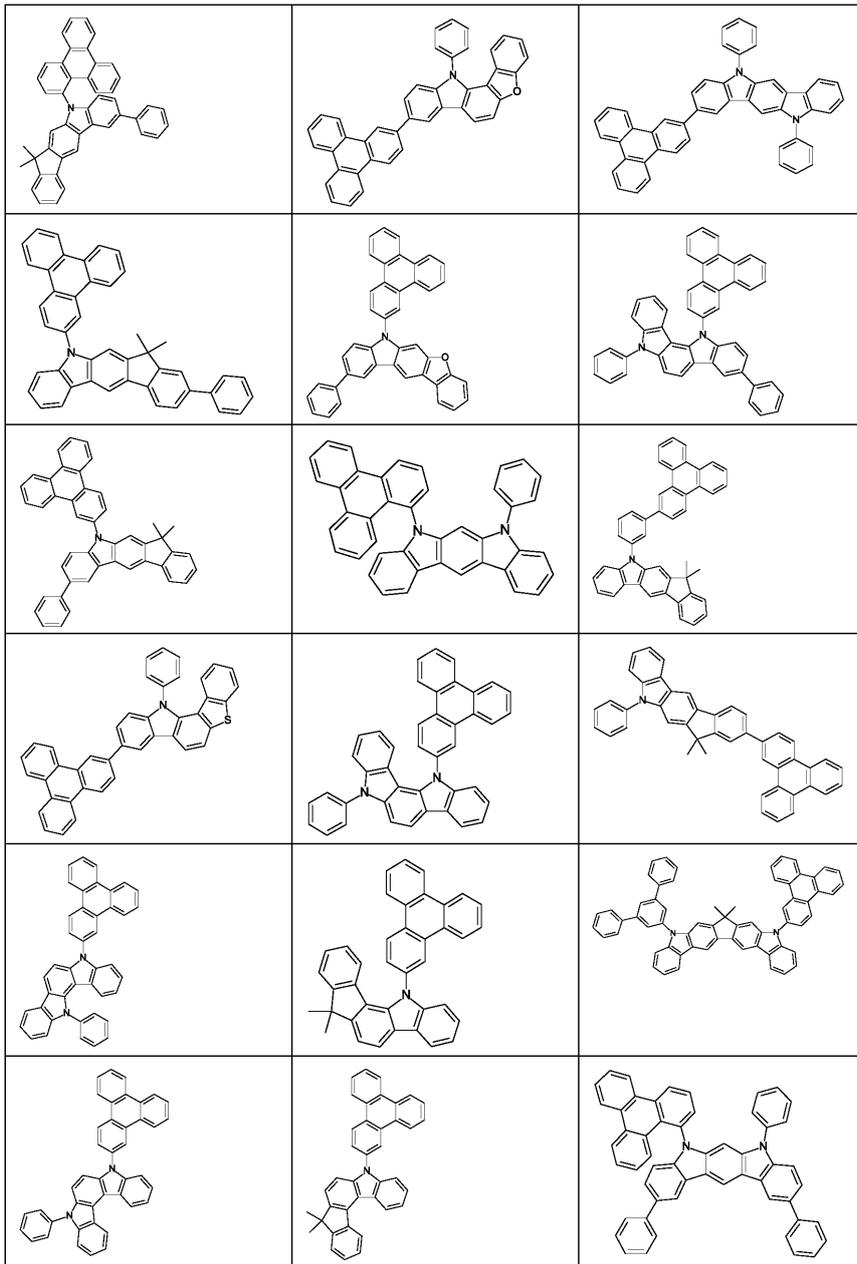
[0323]



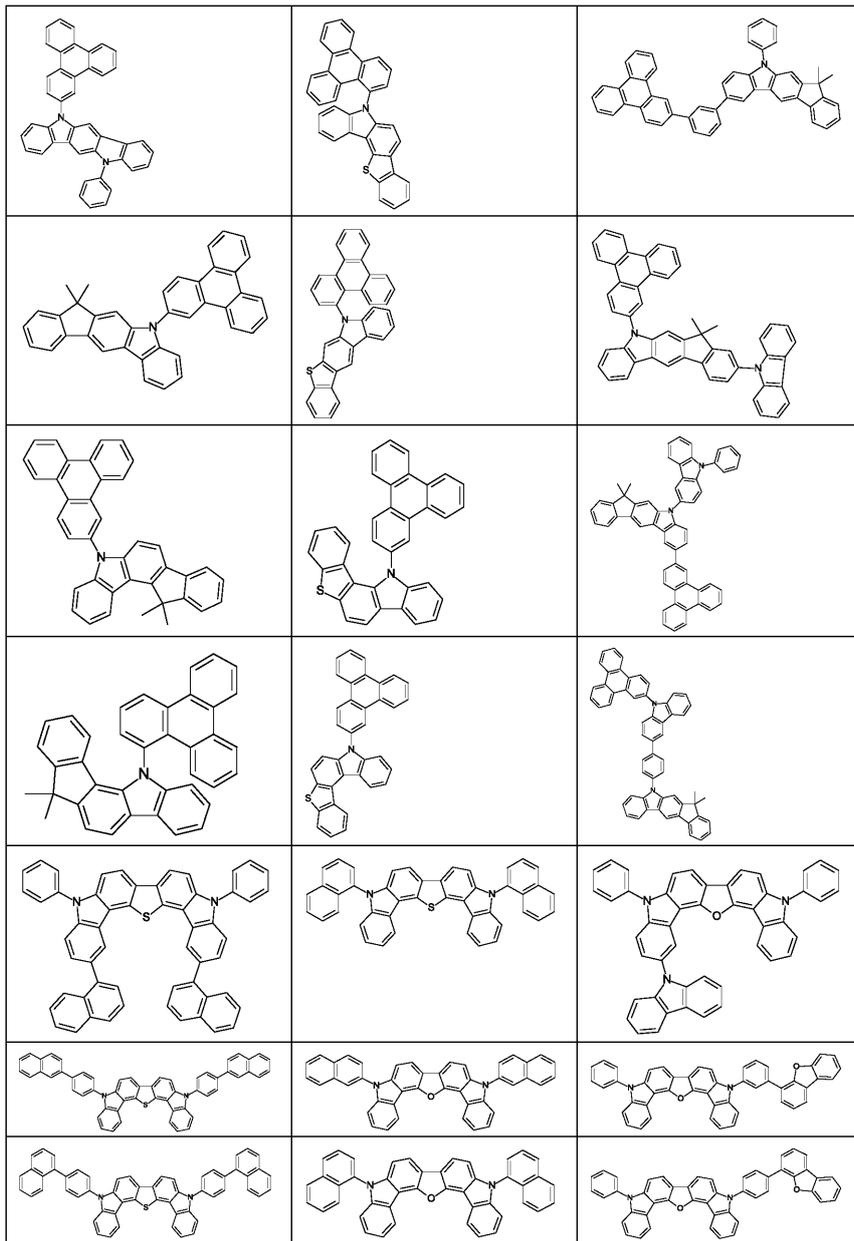
[0324]



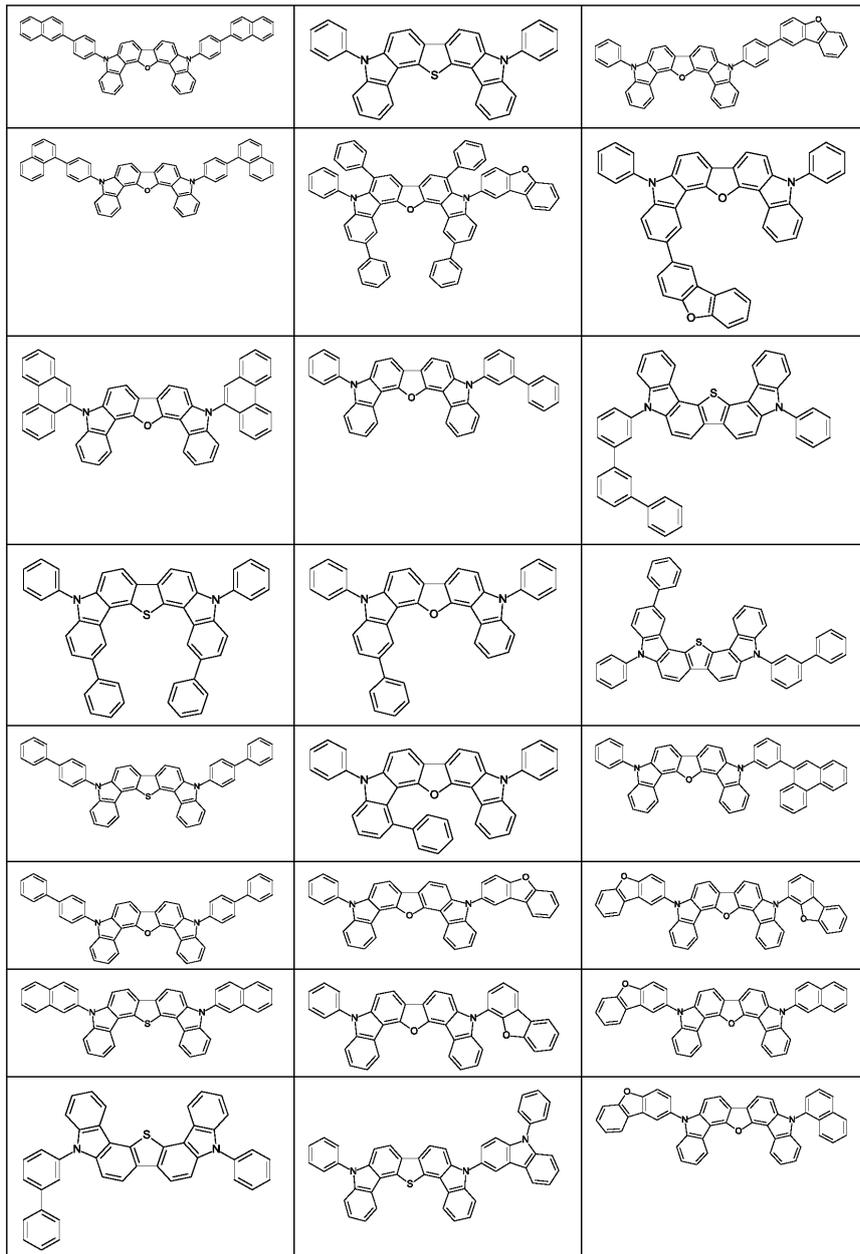
[0325]



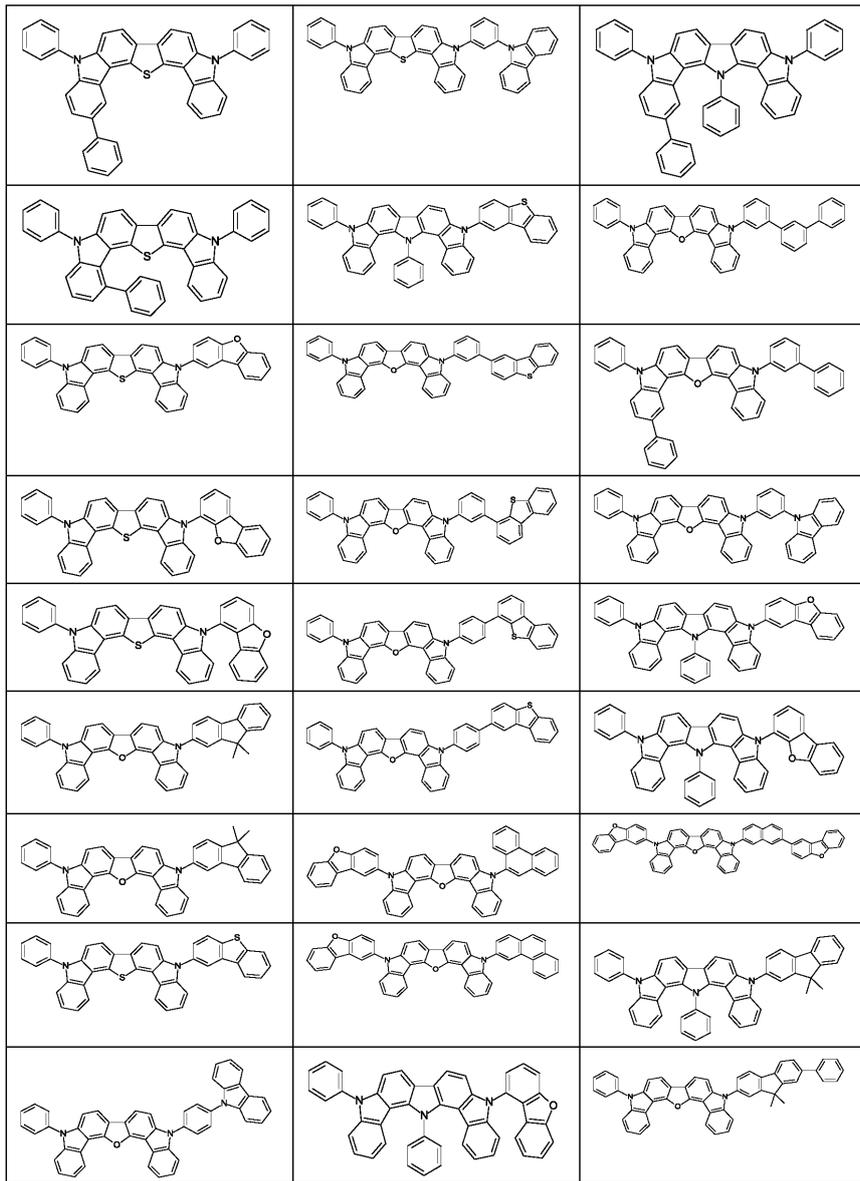
[0326]



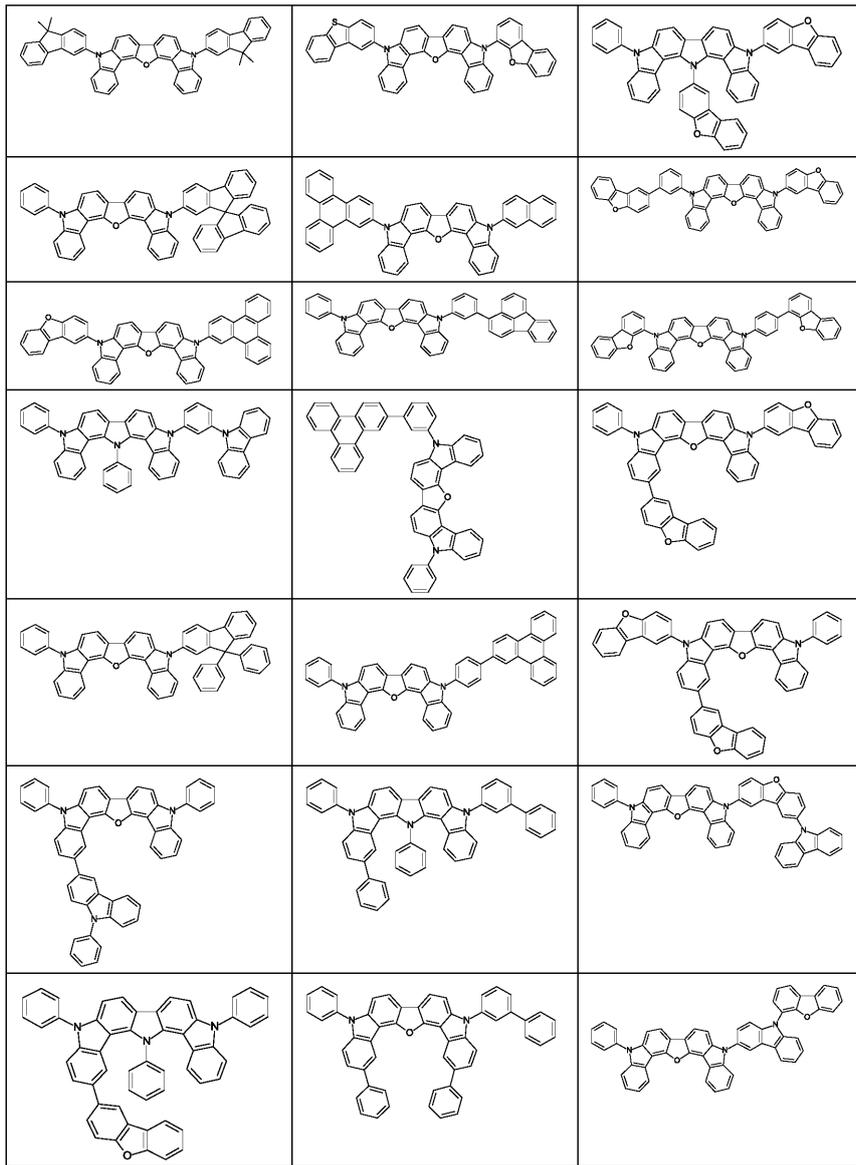
[0327]



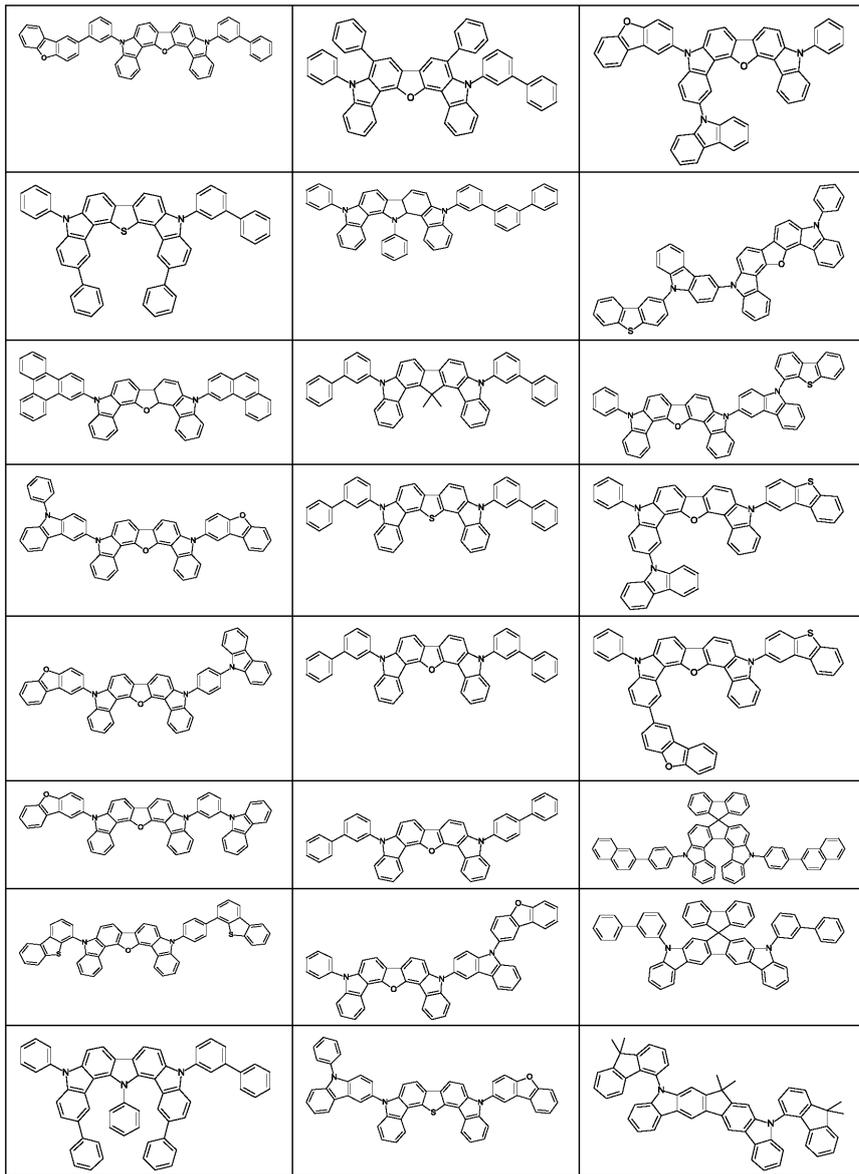
[0328]



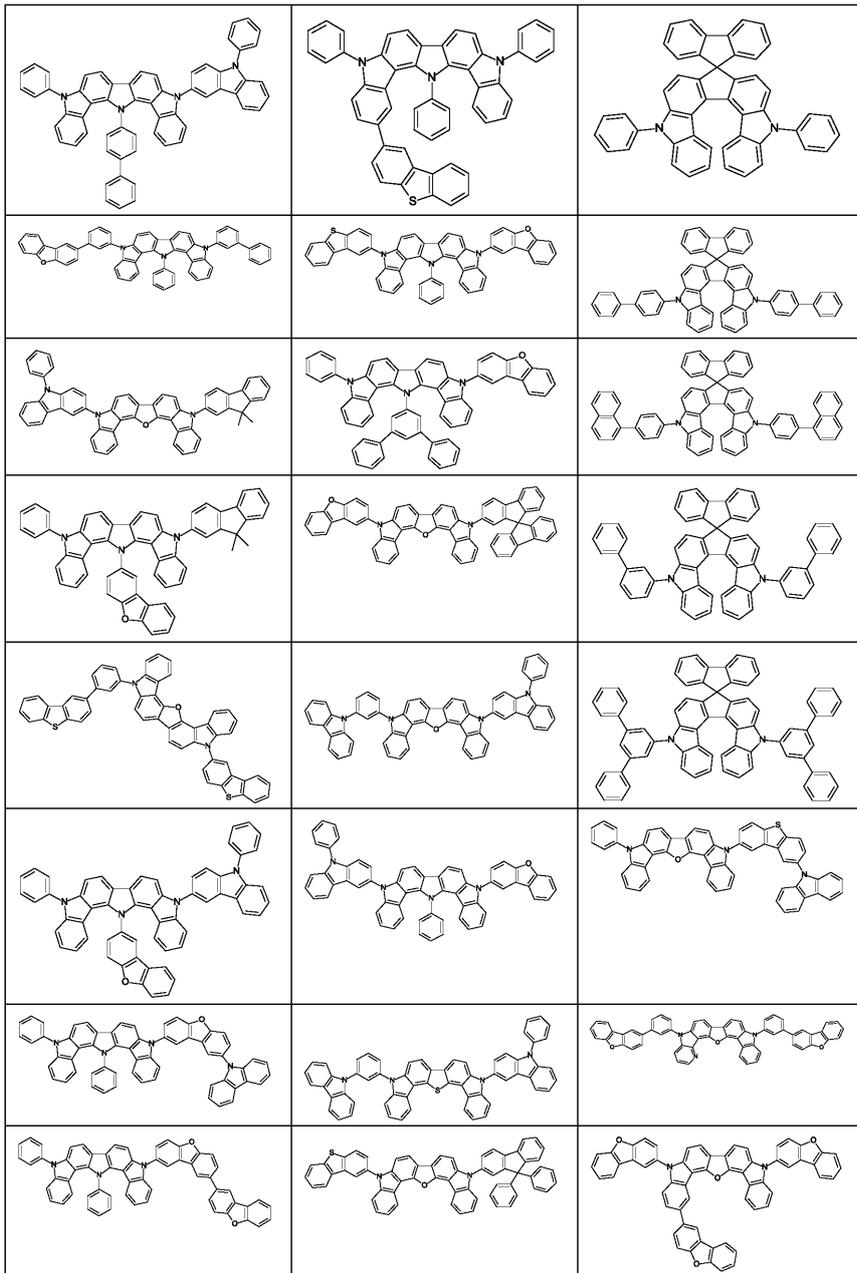
[0329]



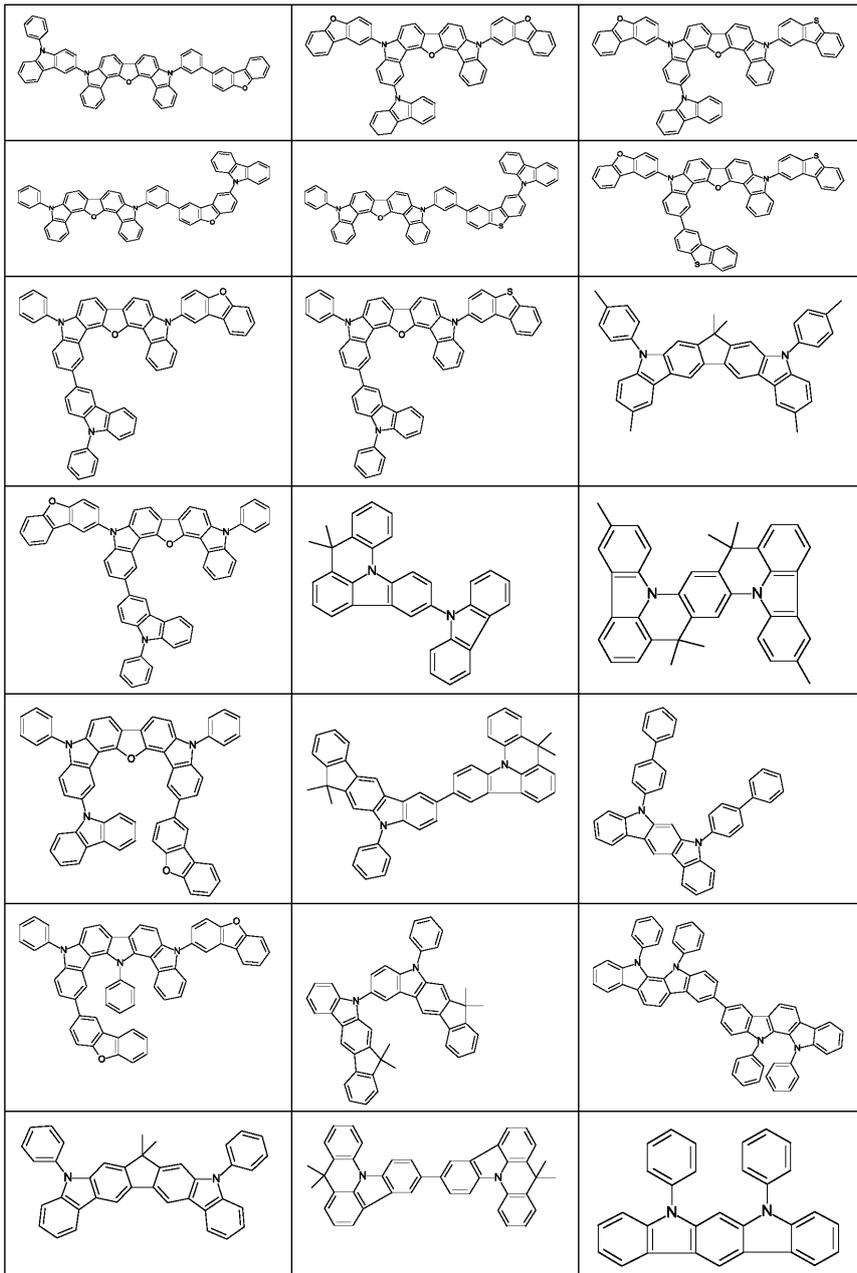
[0330]



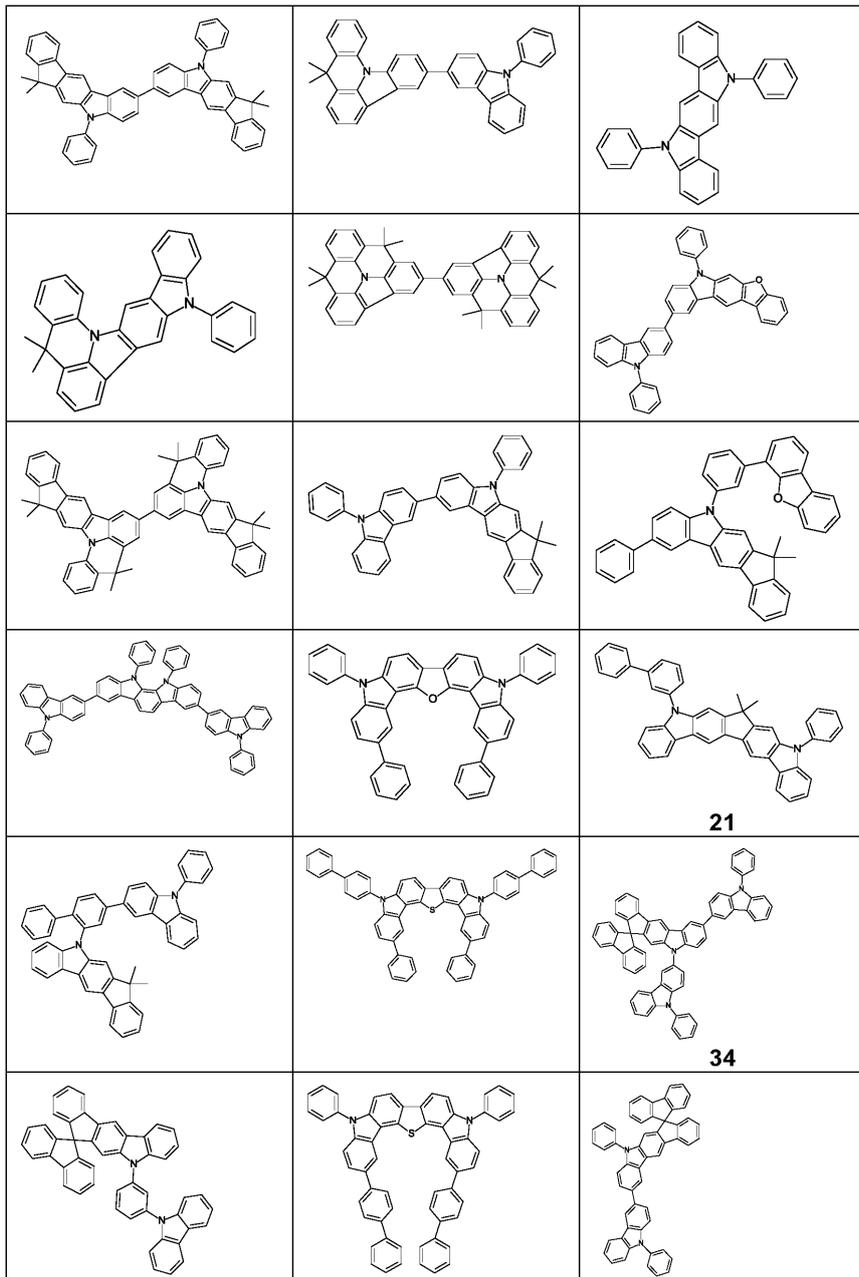
[0331]



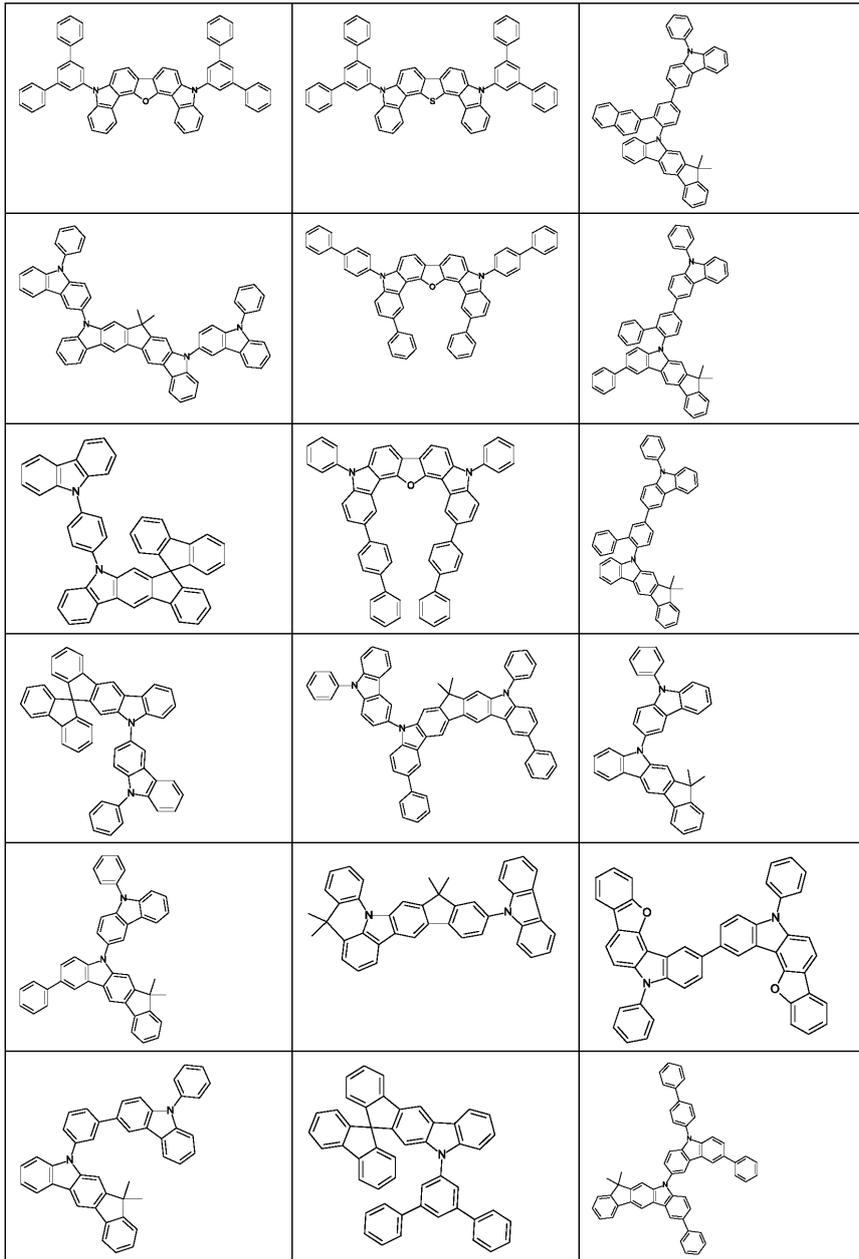
[0332]



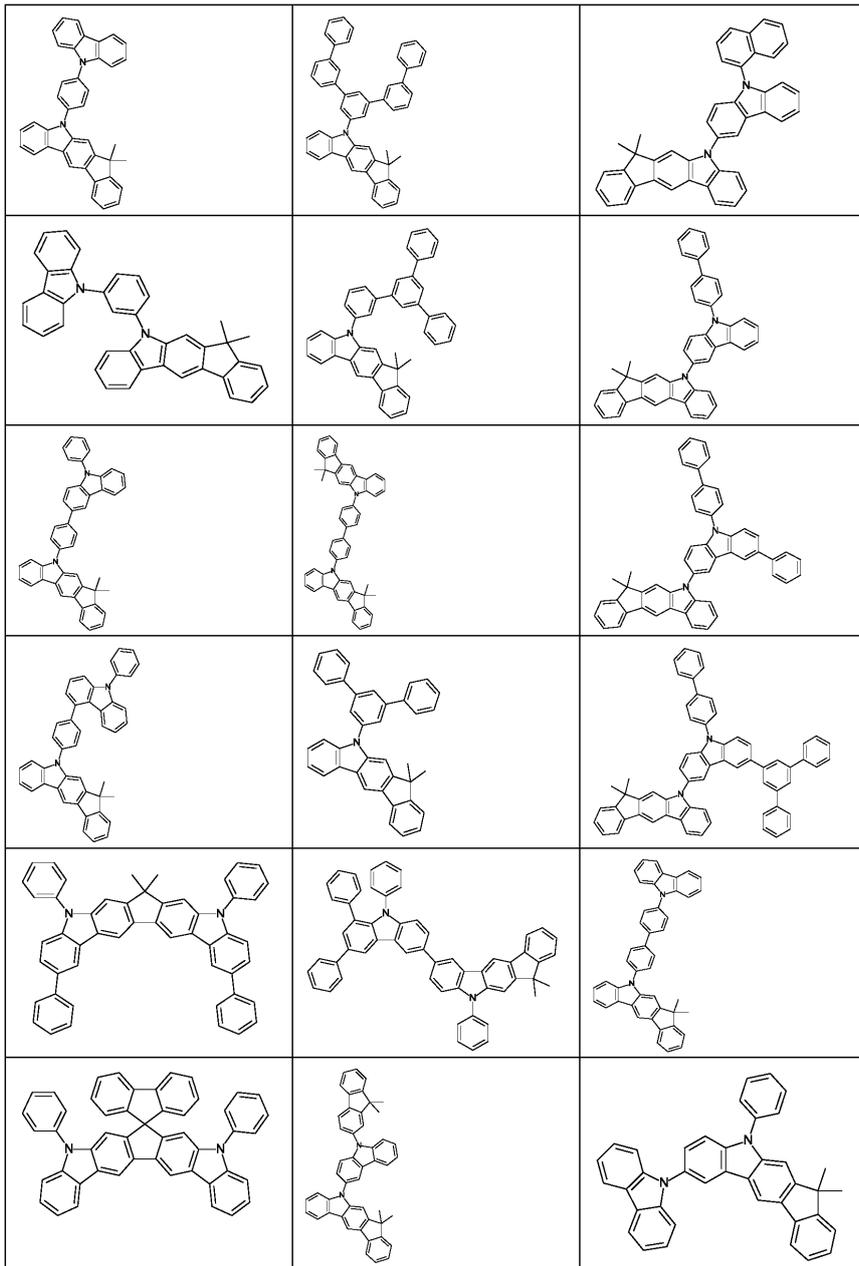
[0333]



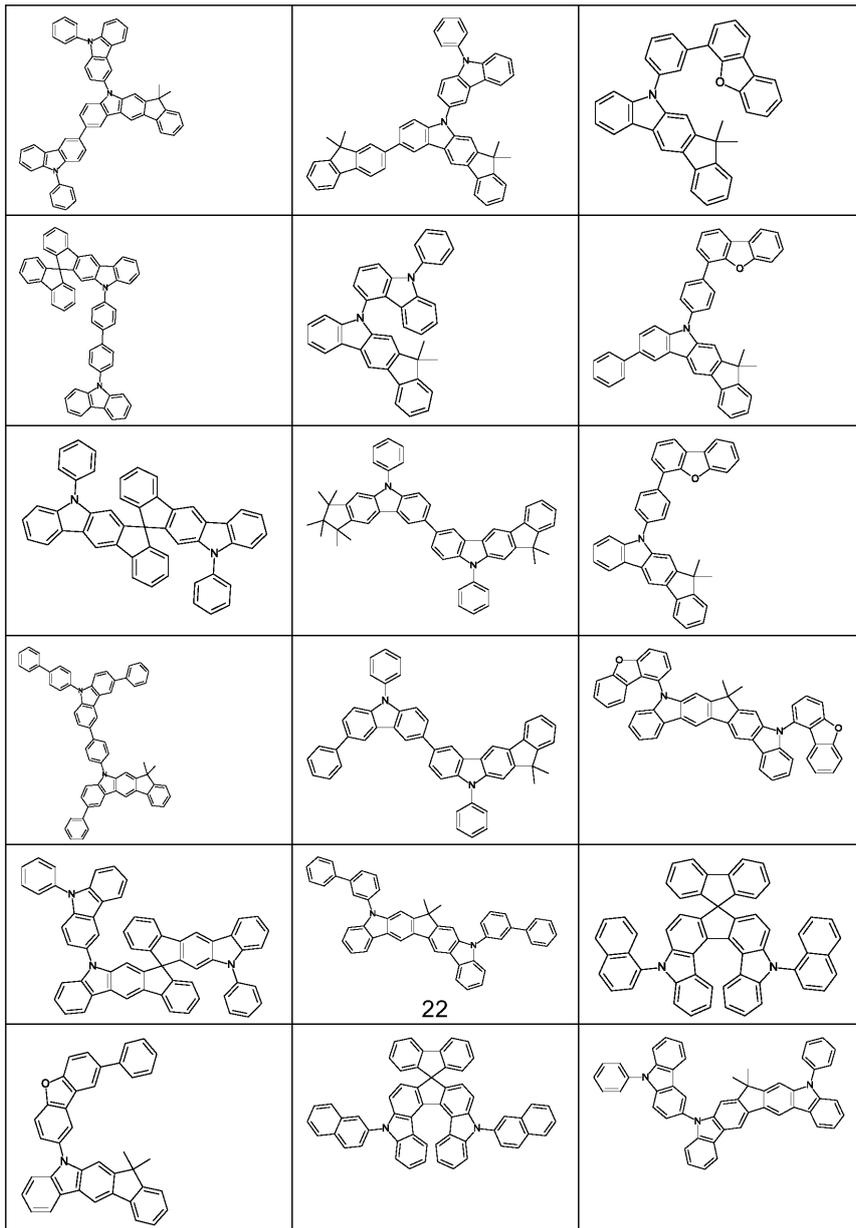
[0334]



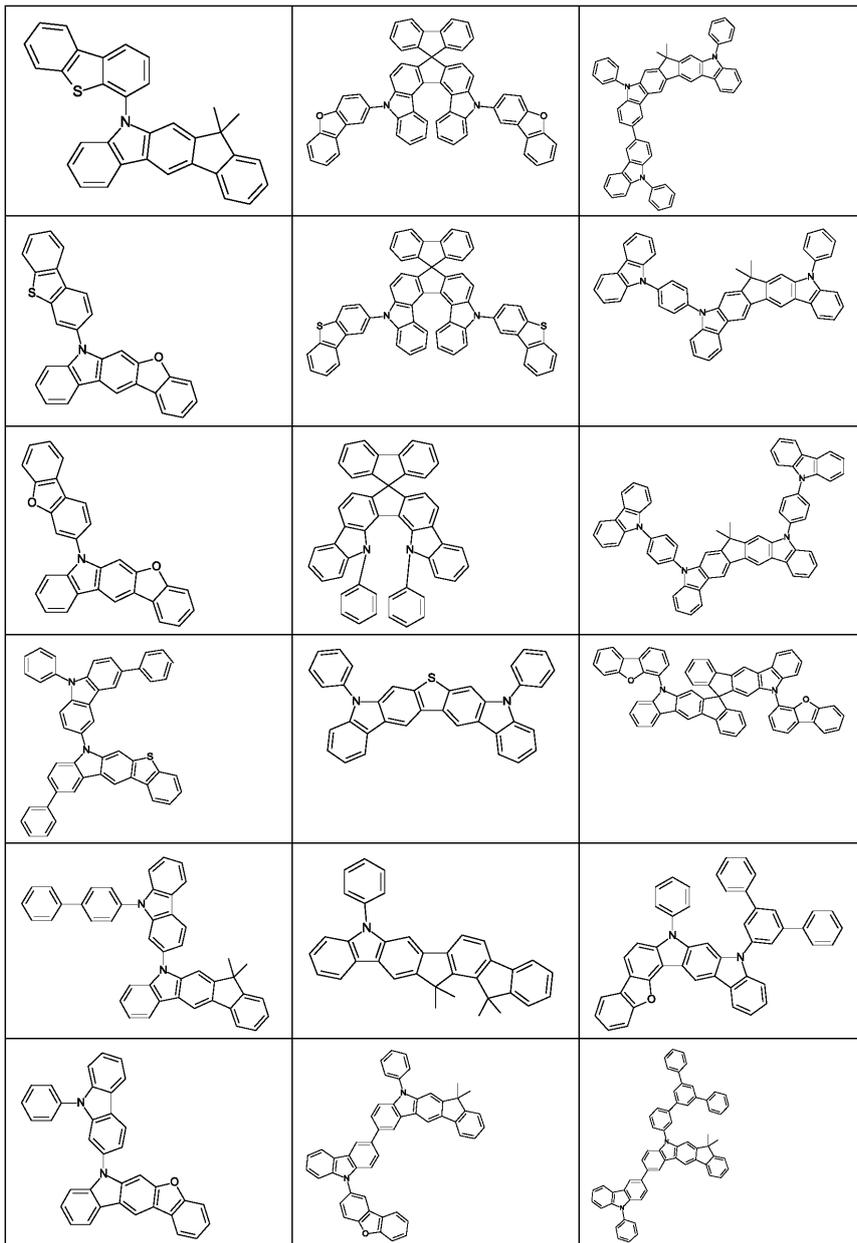
[0335]



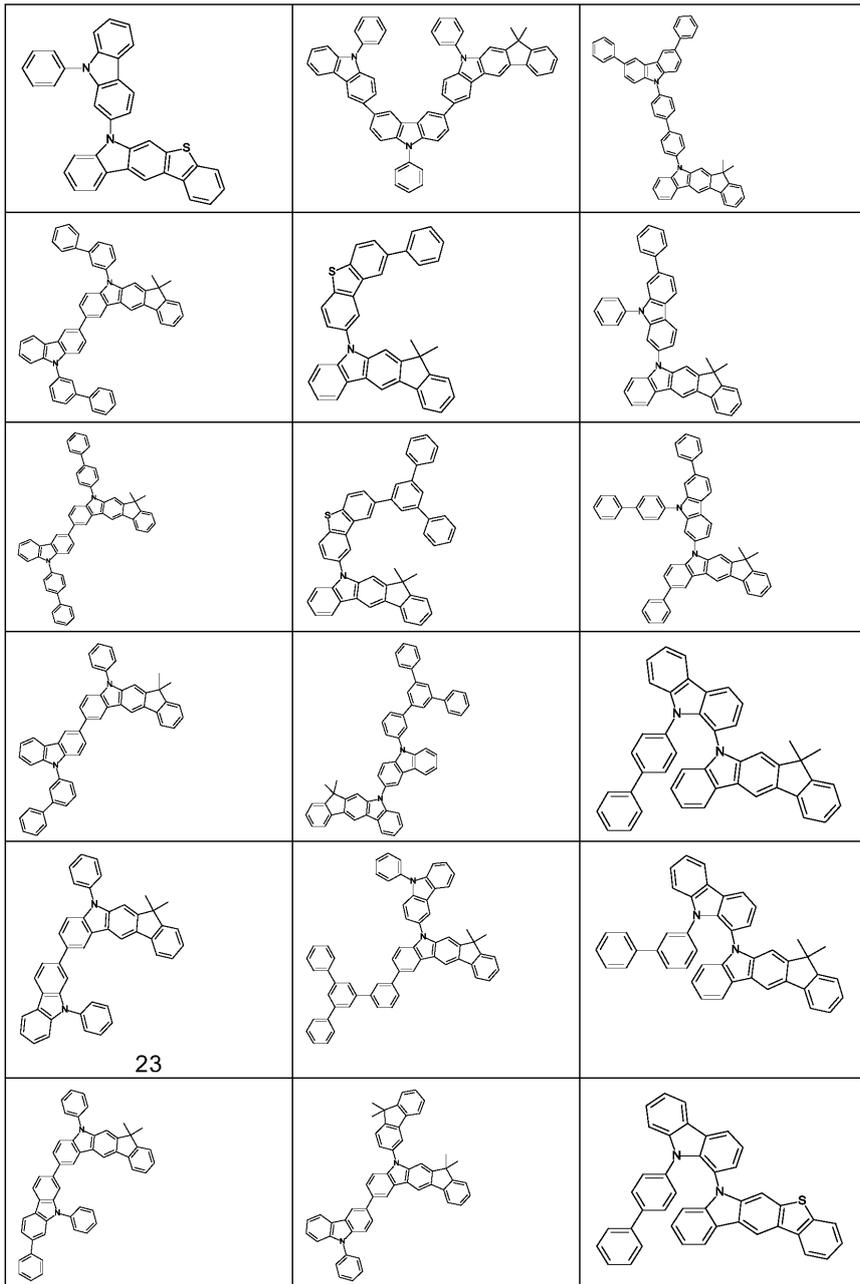
[0336]



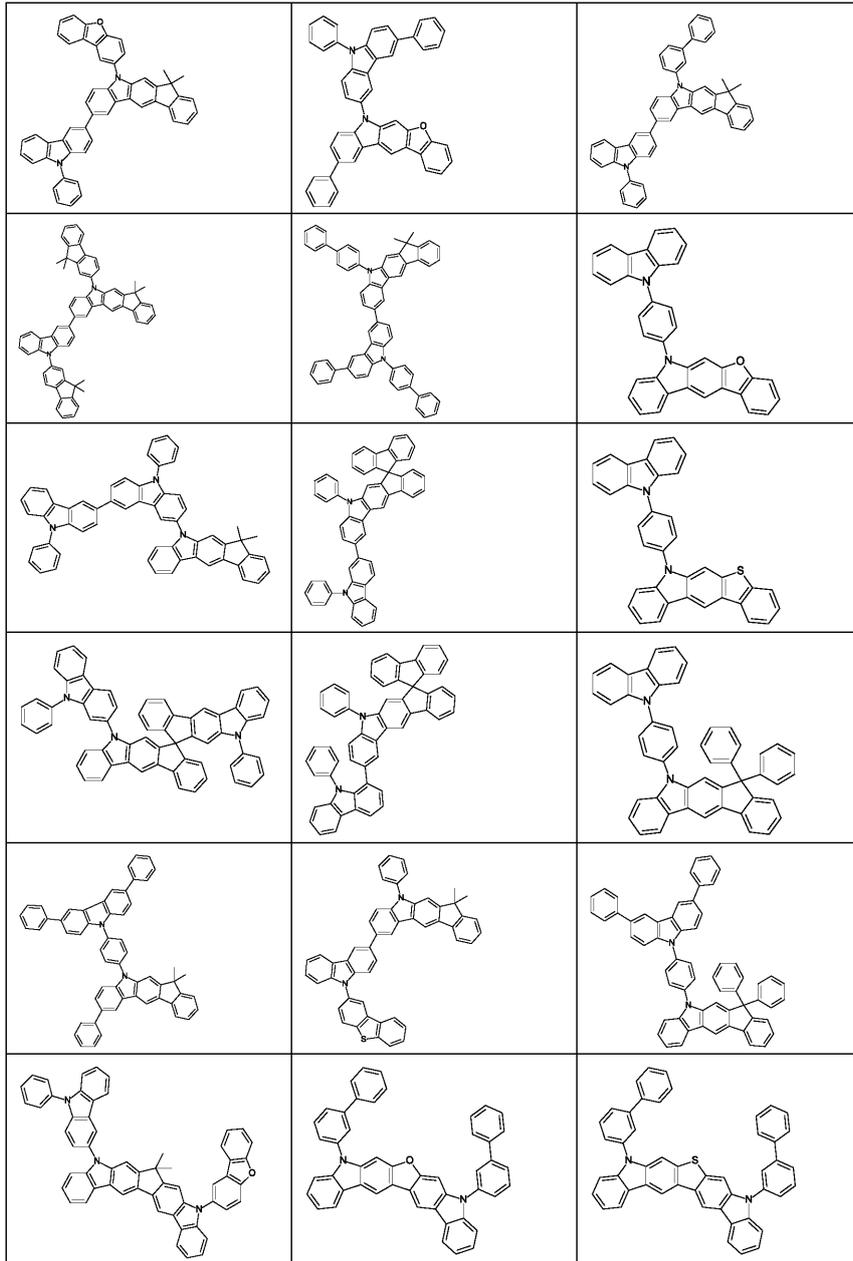
[0337]



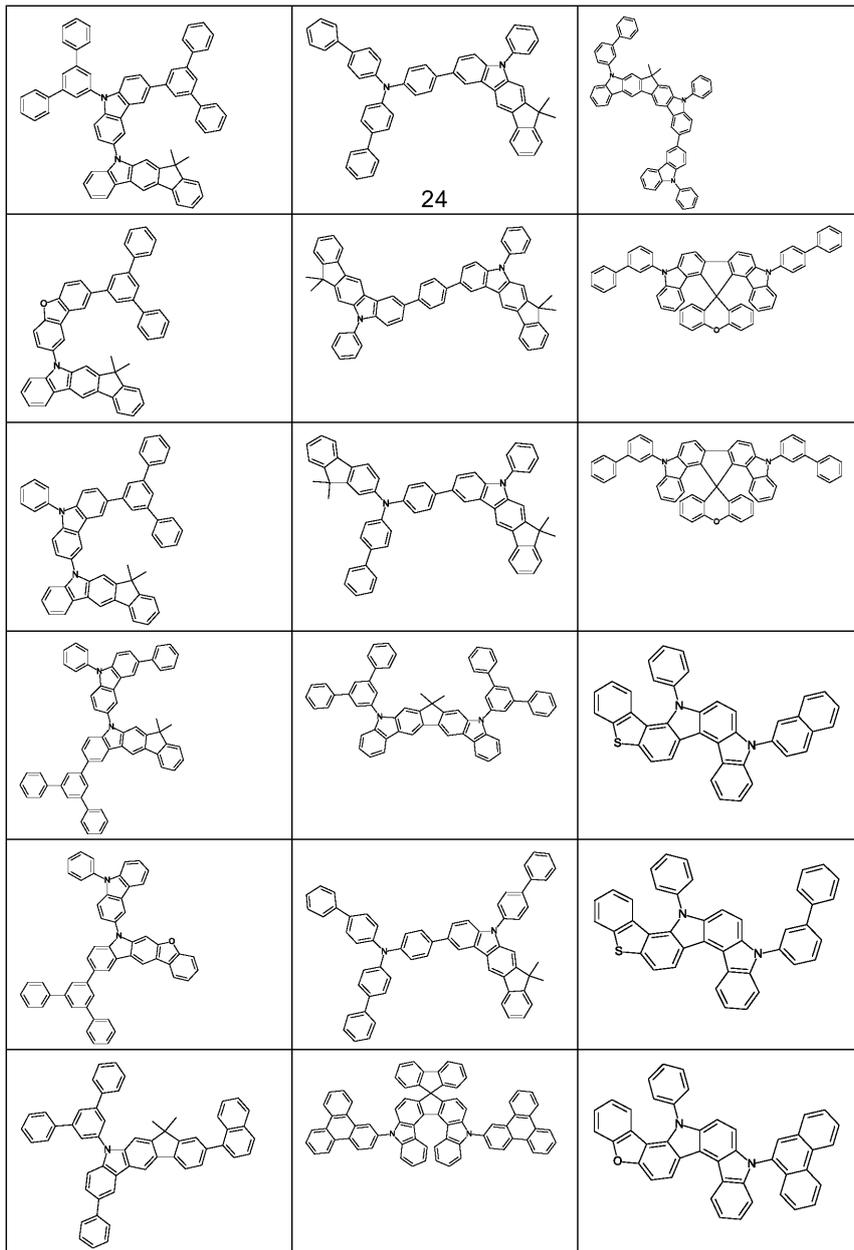
[0338]



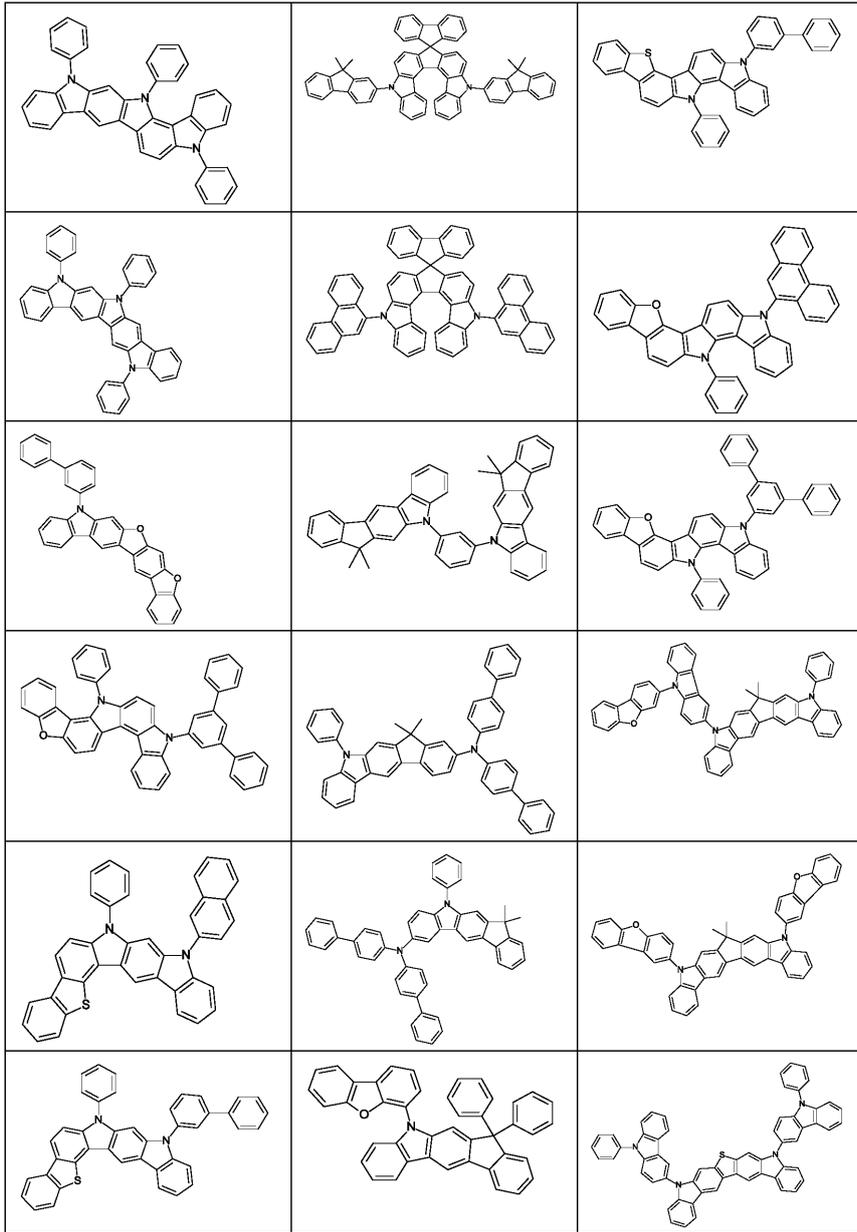
[0339]



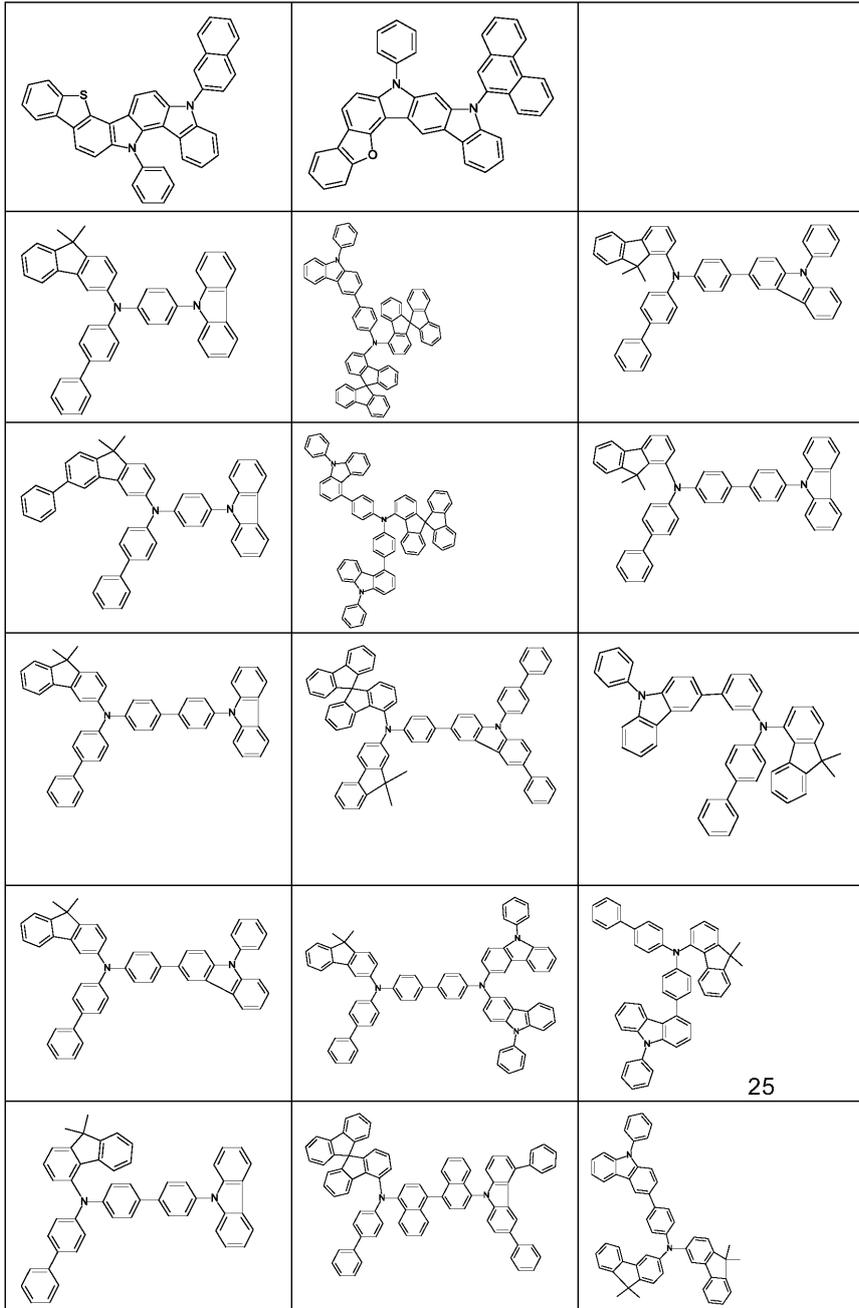
[0340]



[0341]

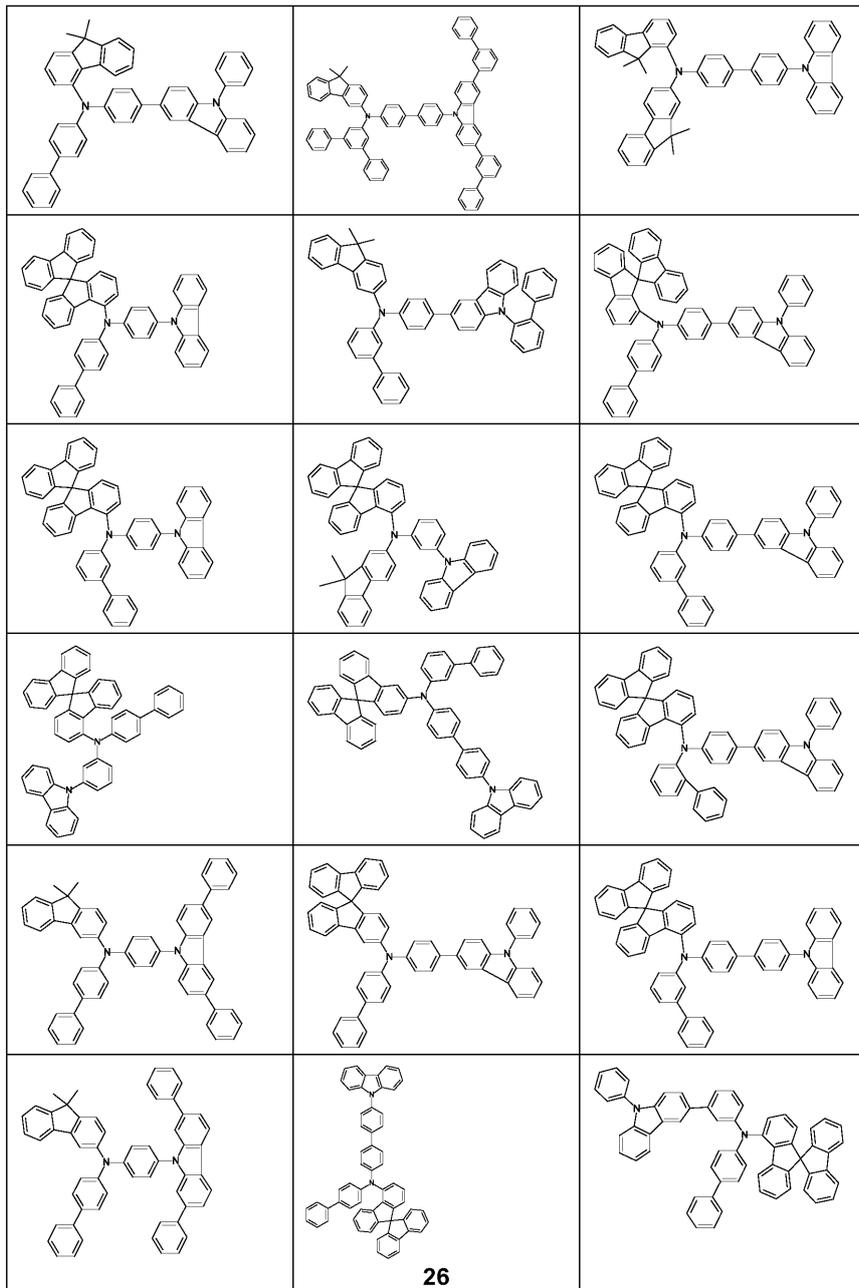


[0342]



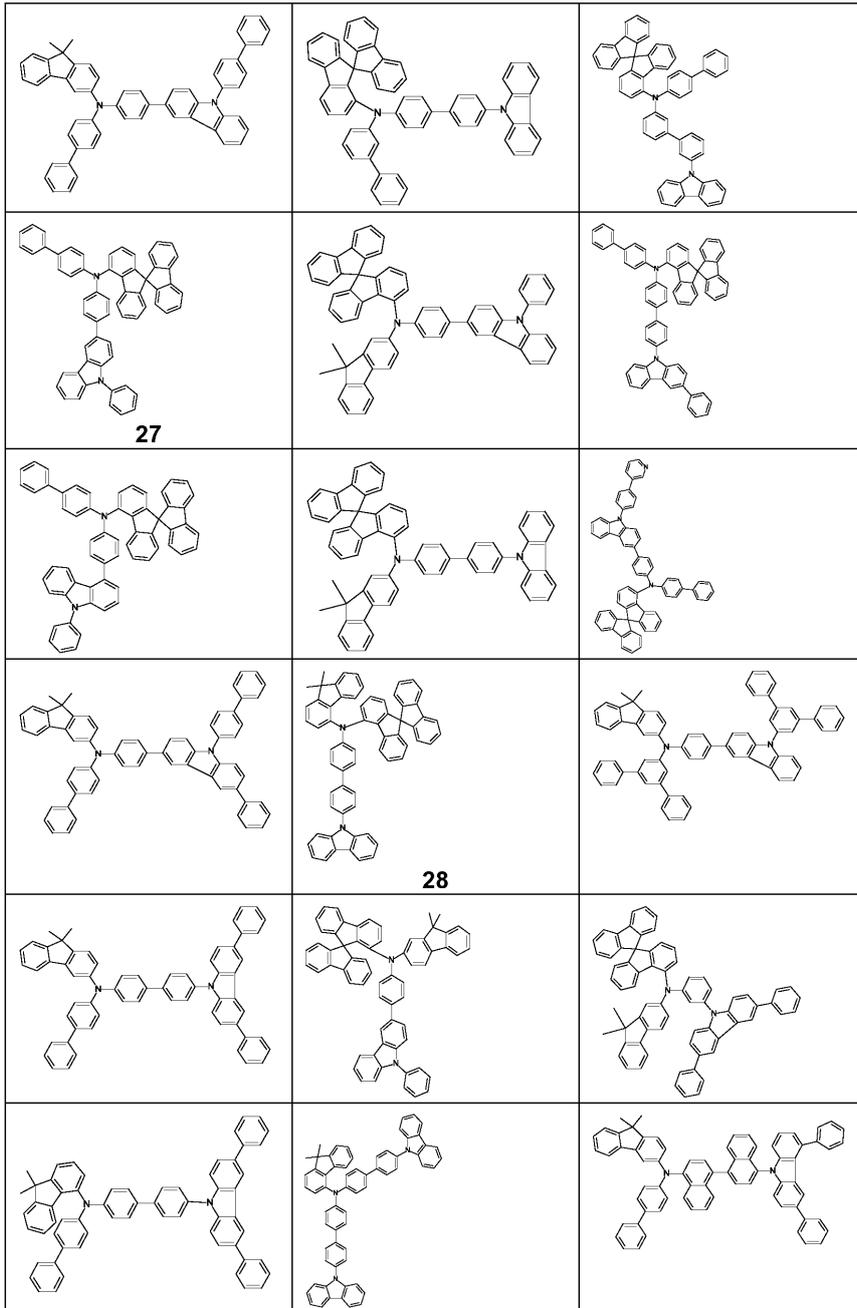
25

[0343]

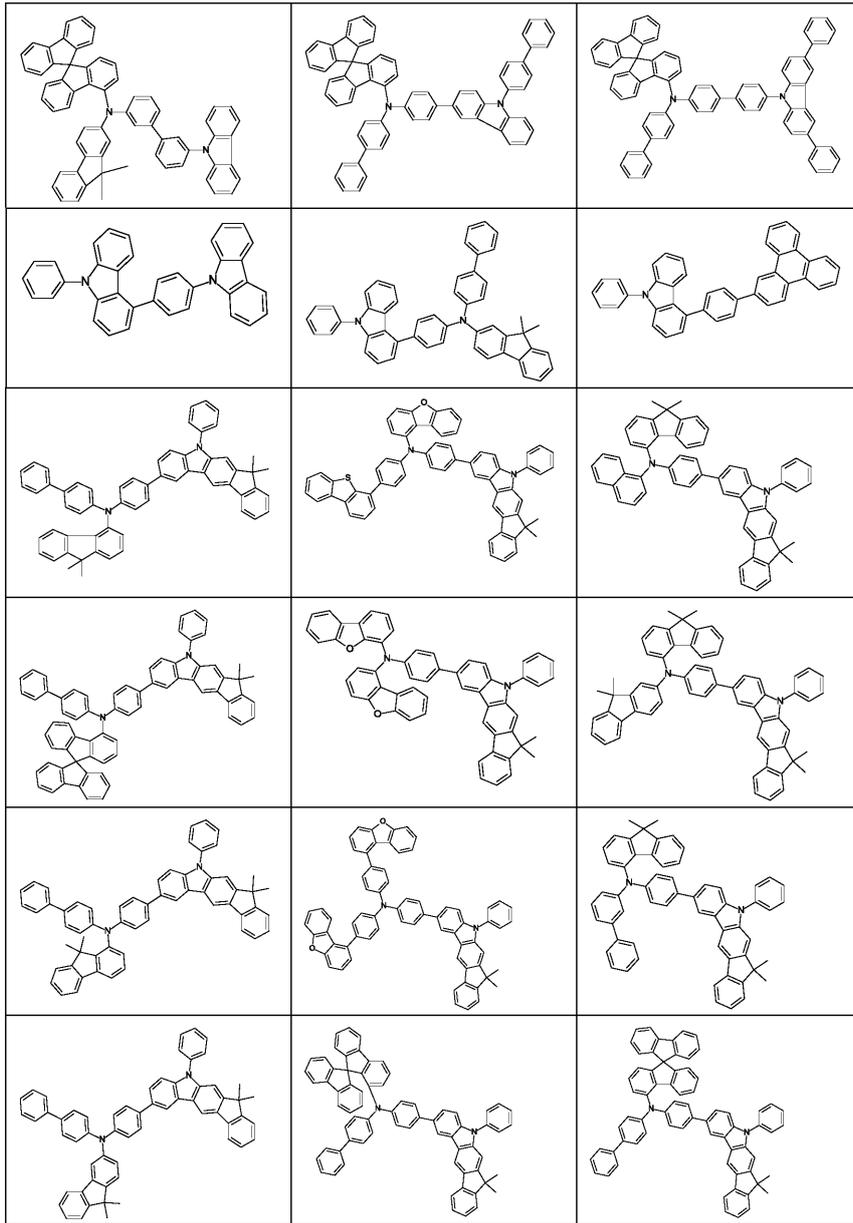


26

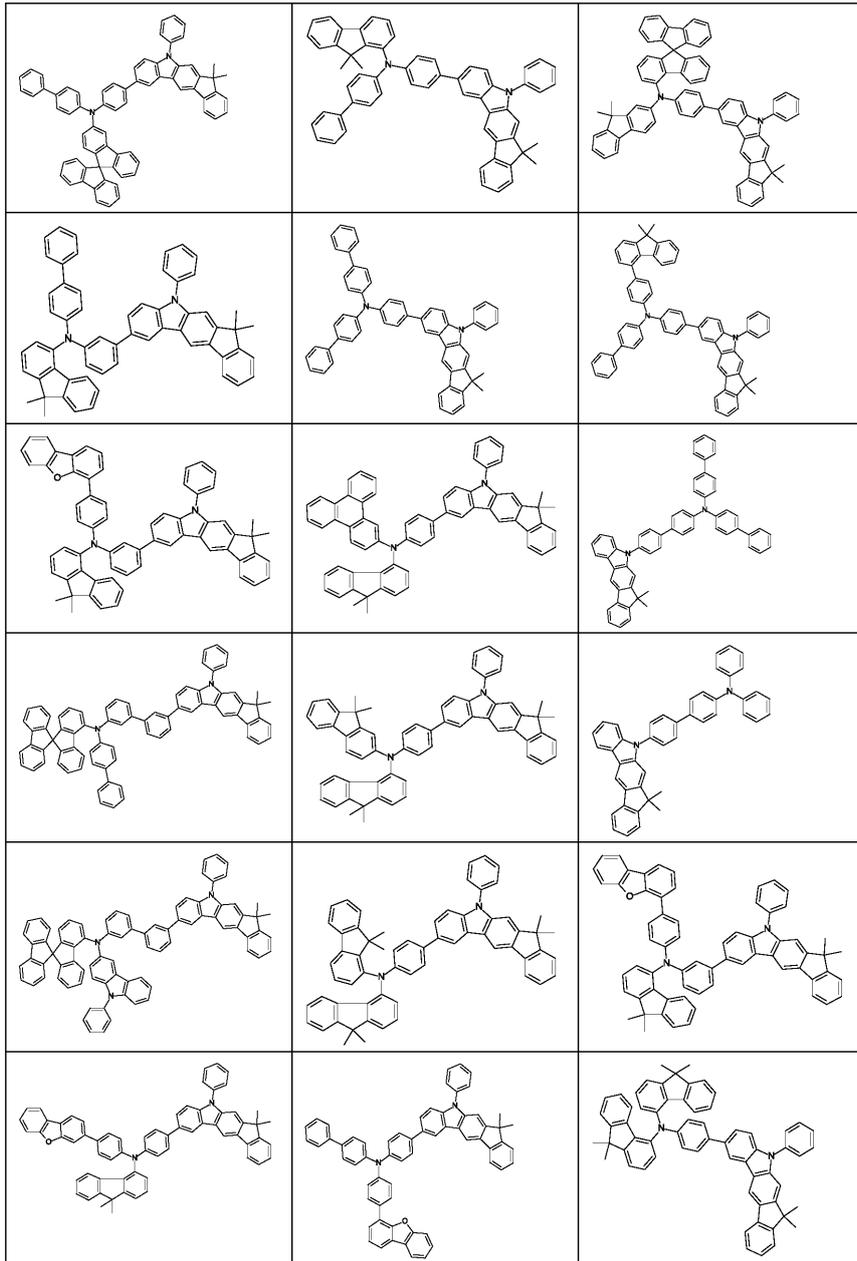
[0344]



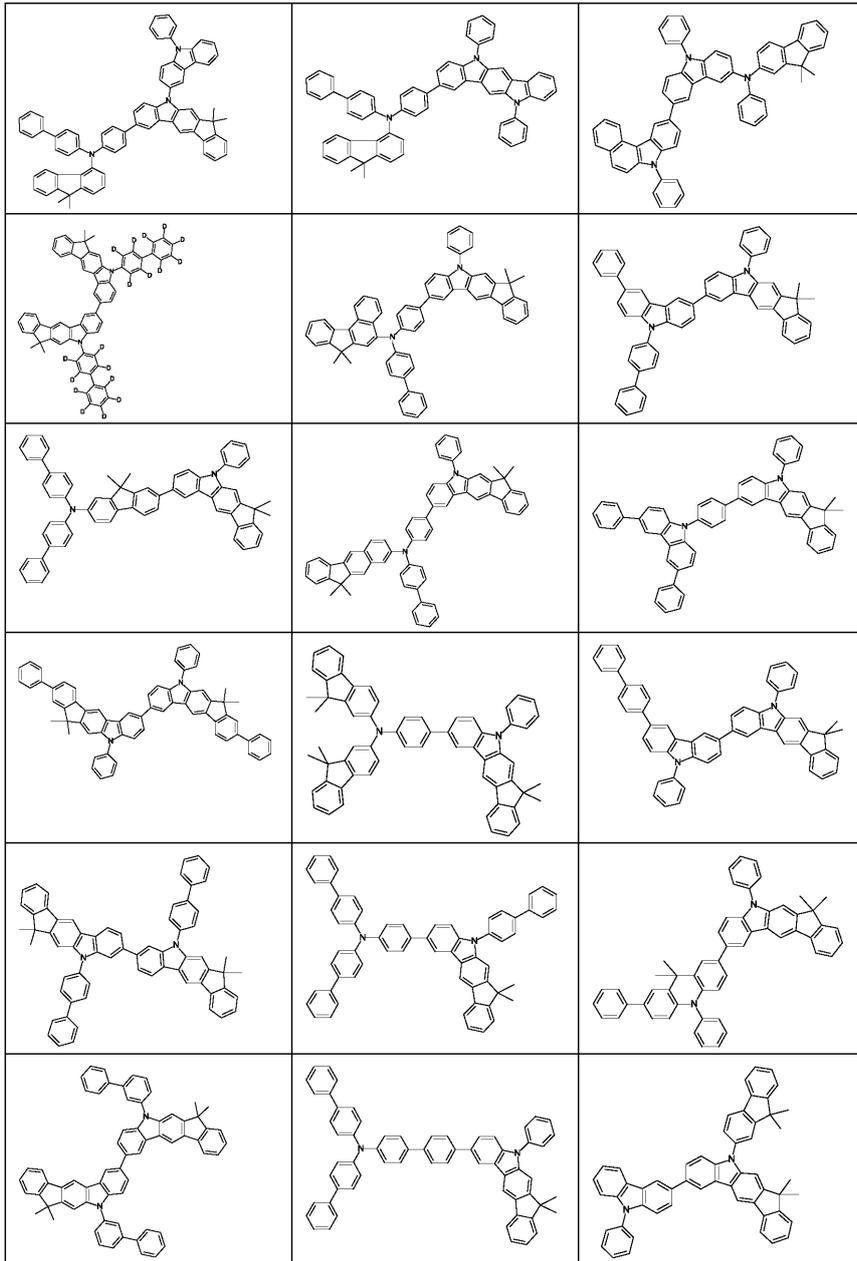
[0345]



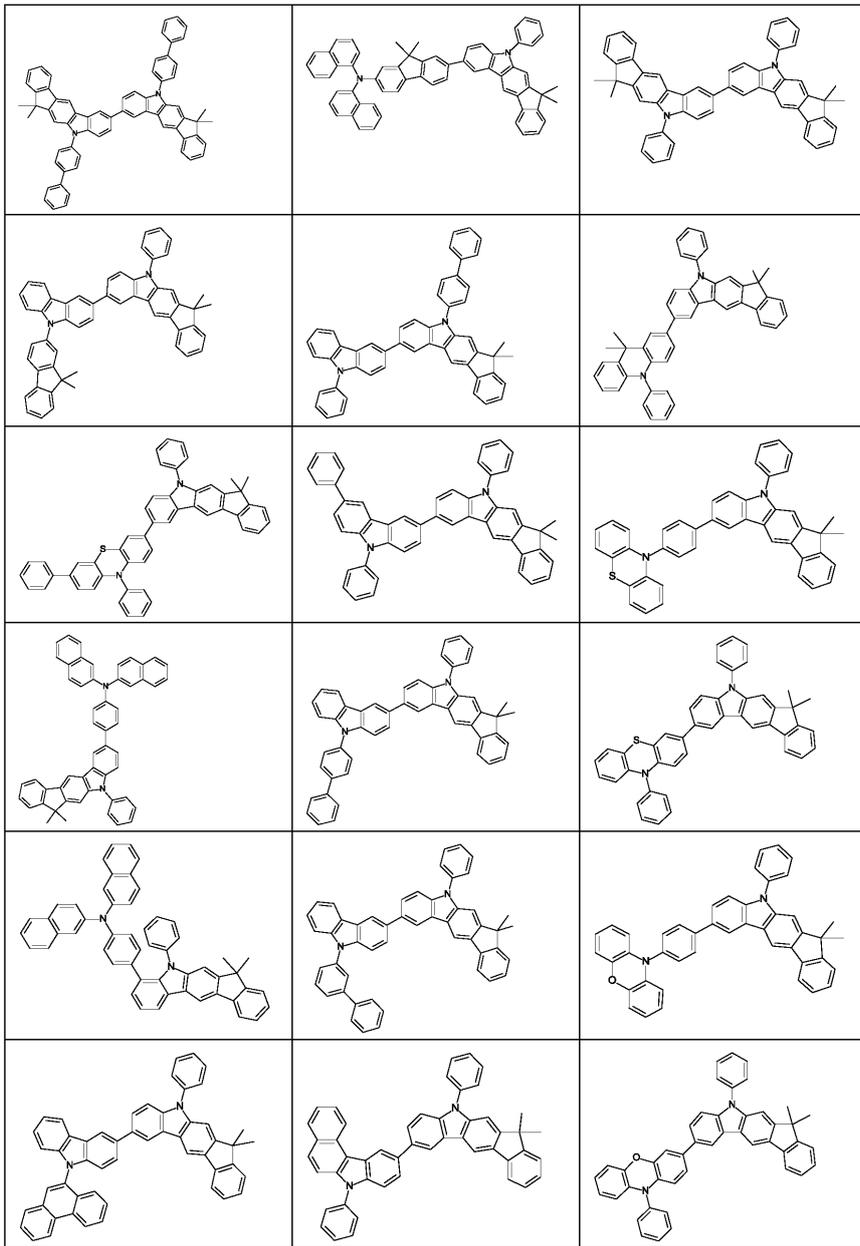
[0346]



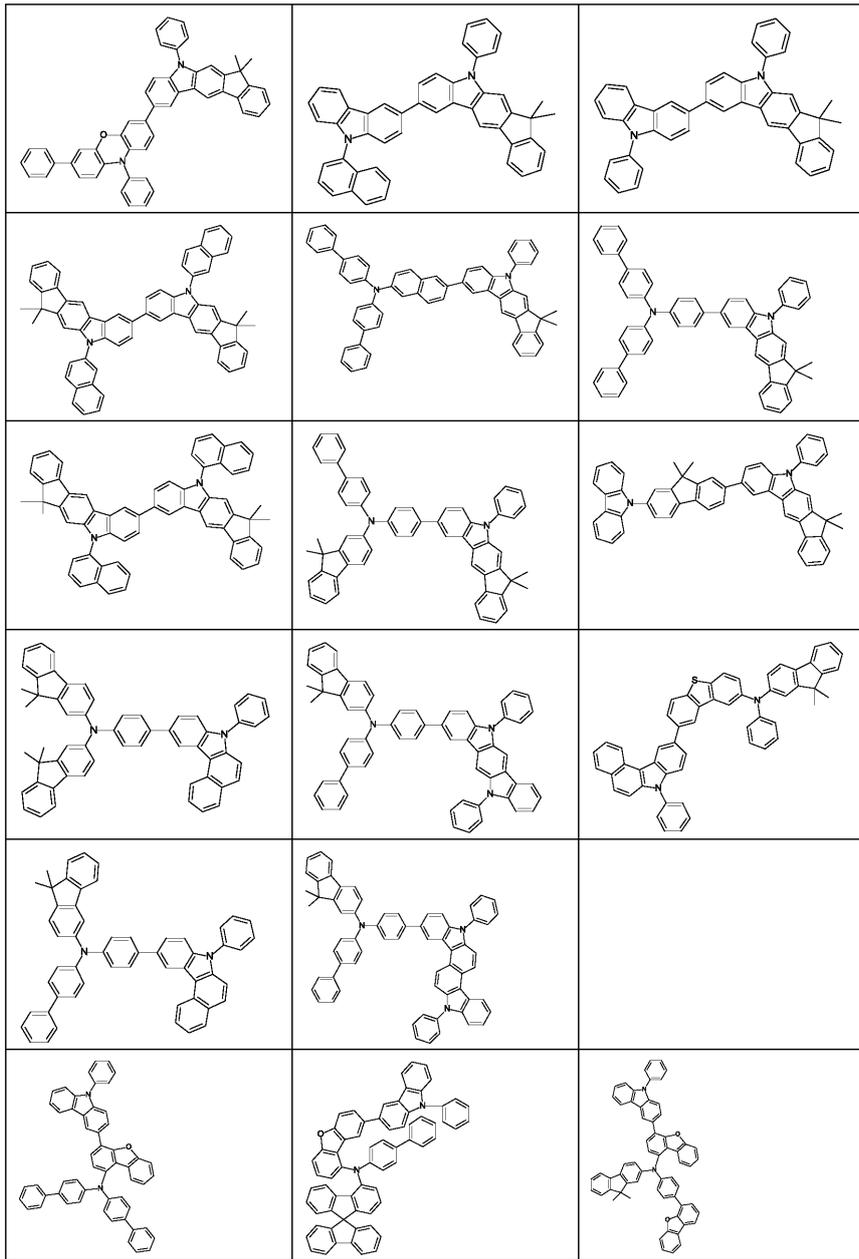
[0347]



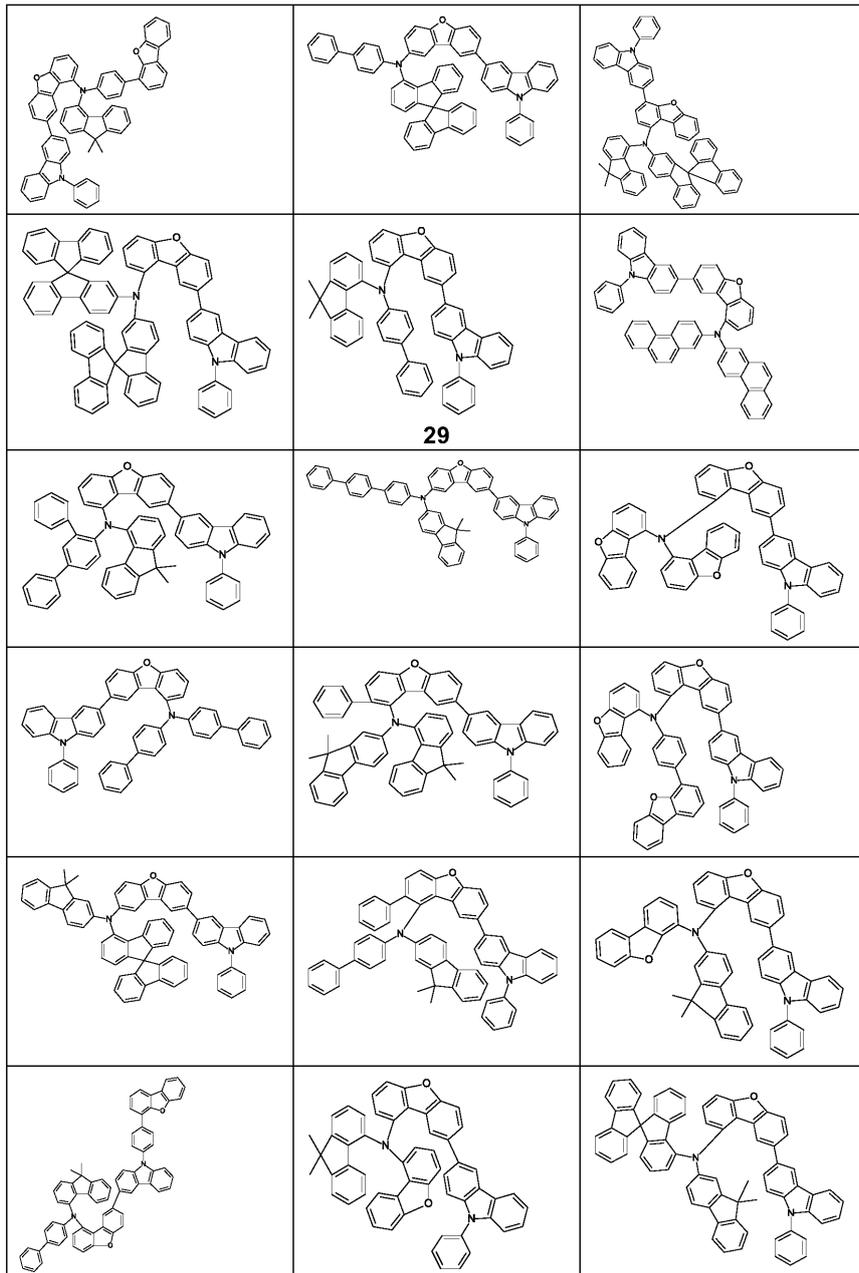
[0348]



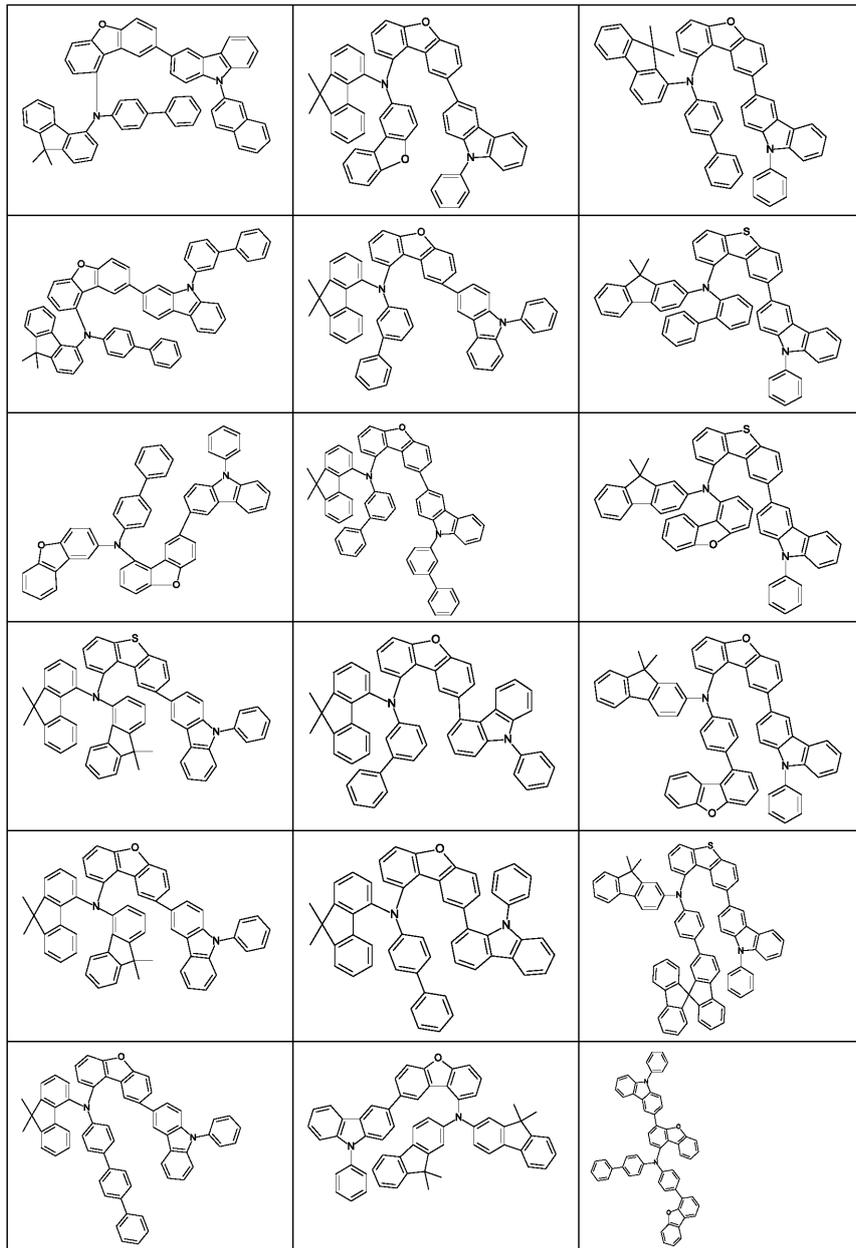
[0349]



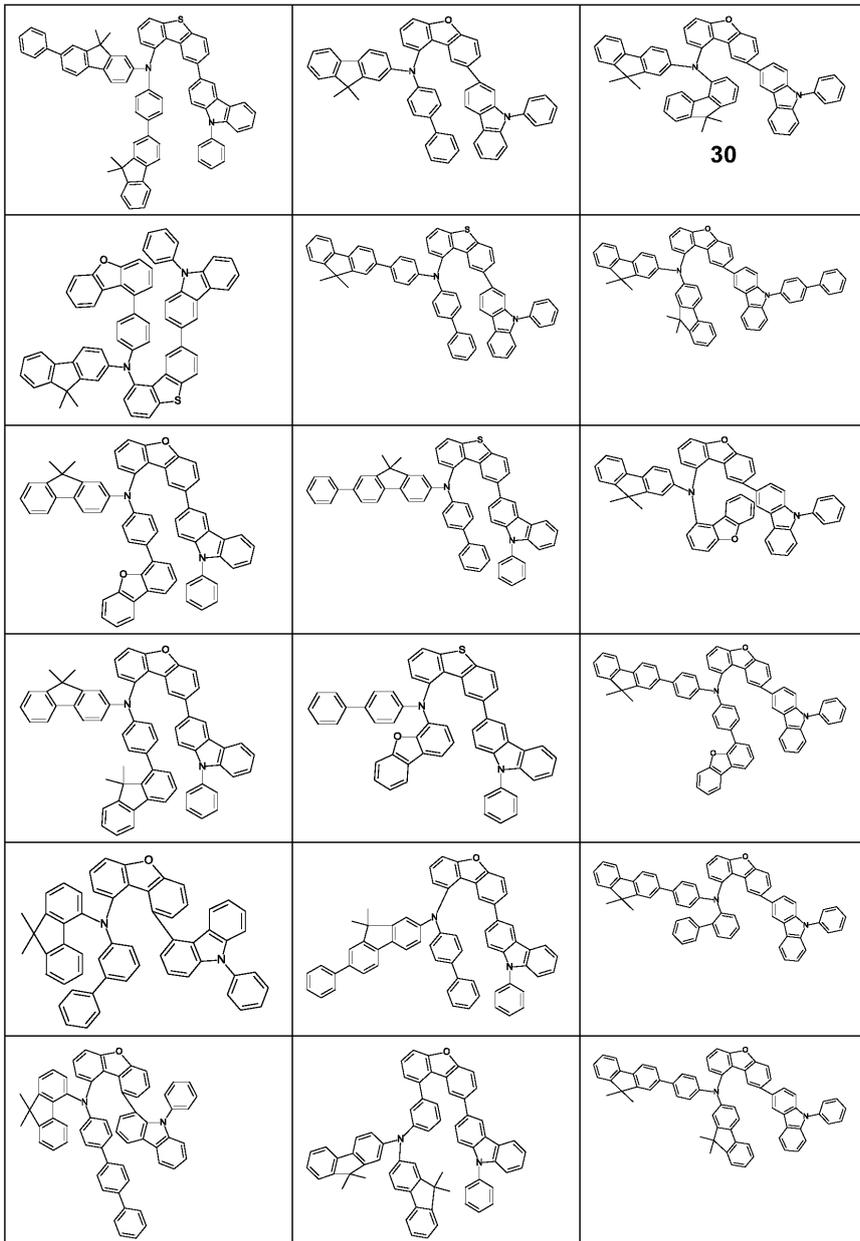
[0350]



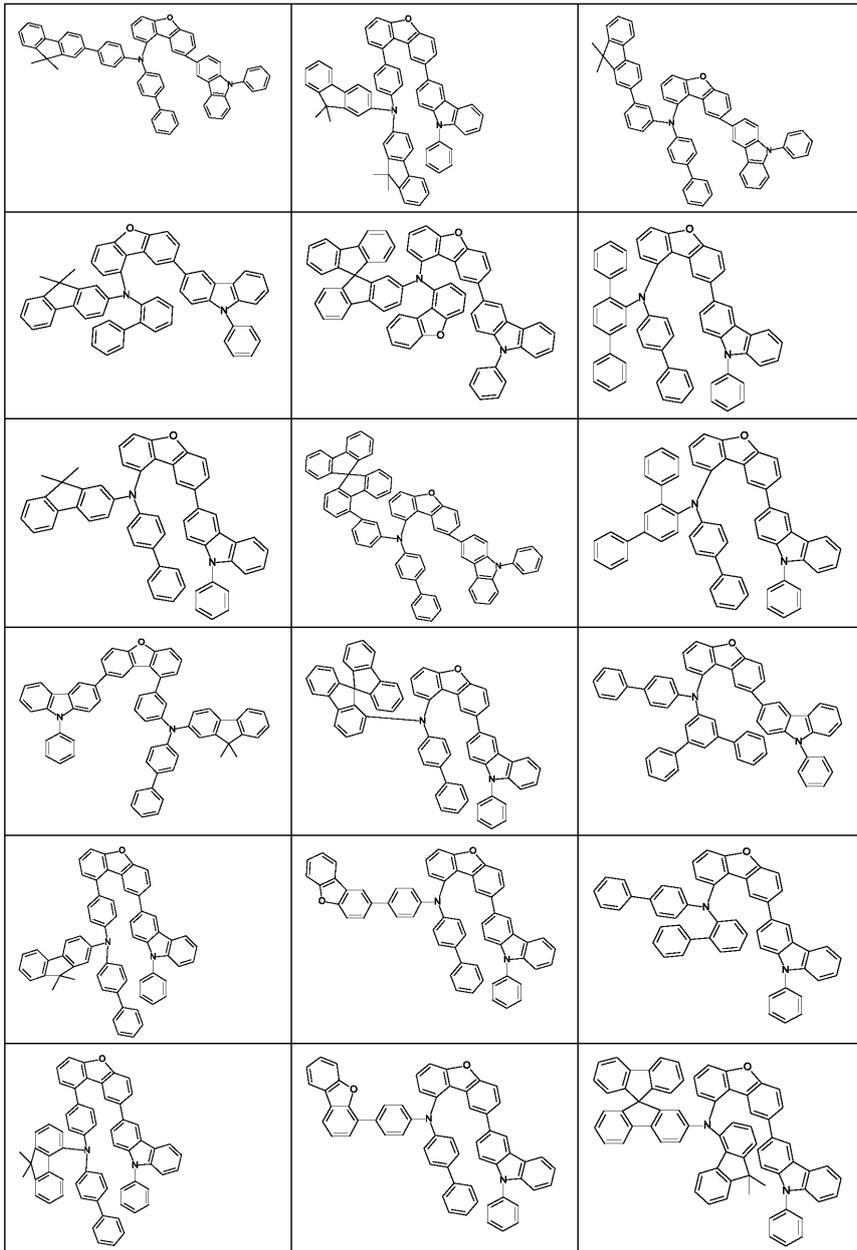
[0351]



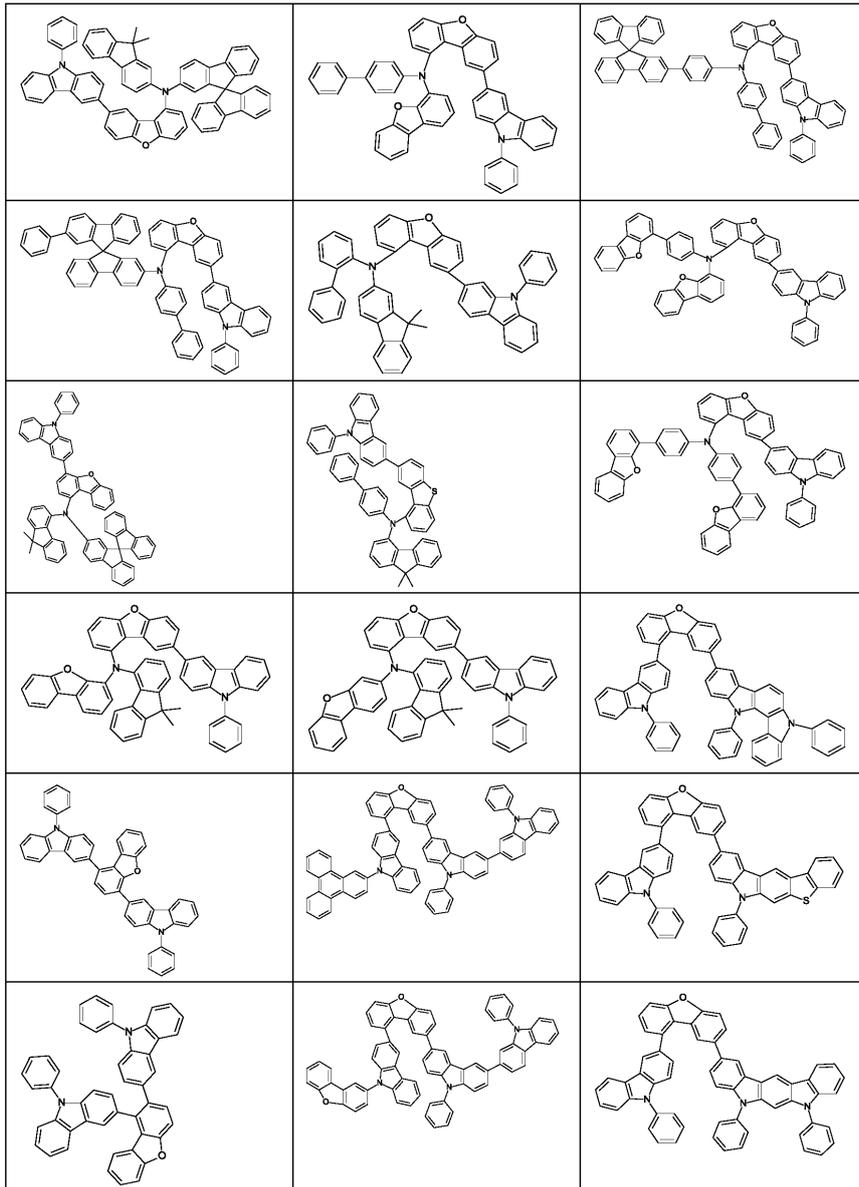
[0352]



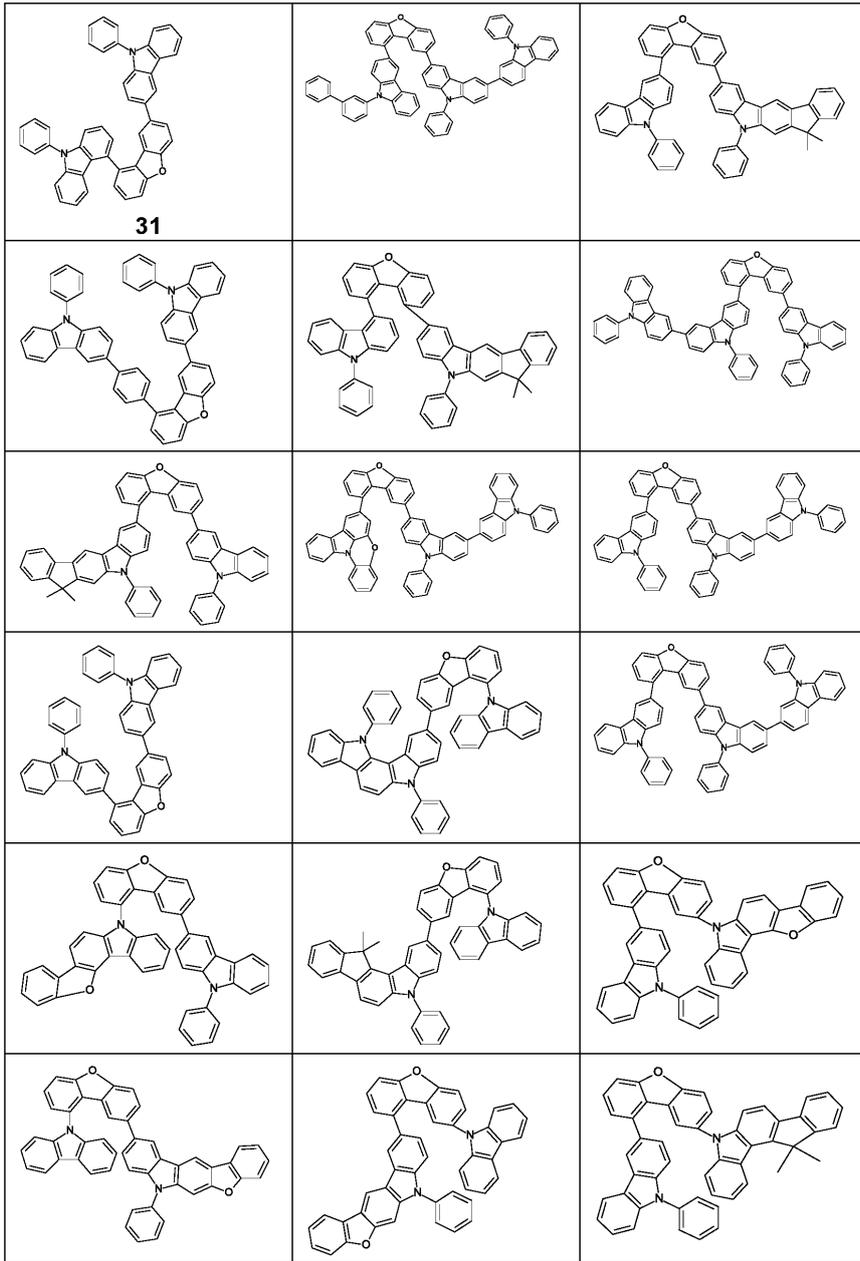
[0353]



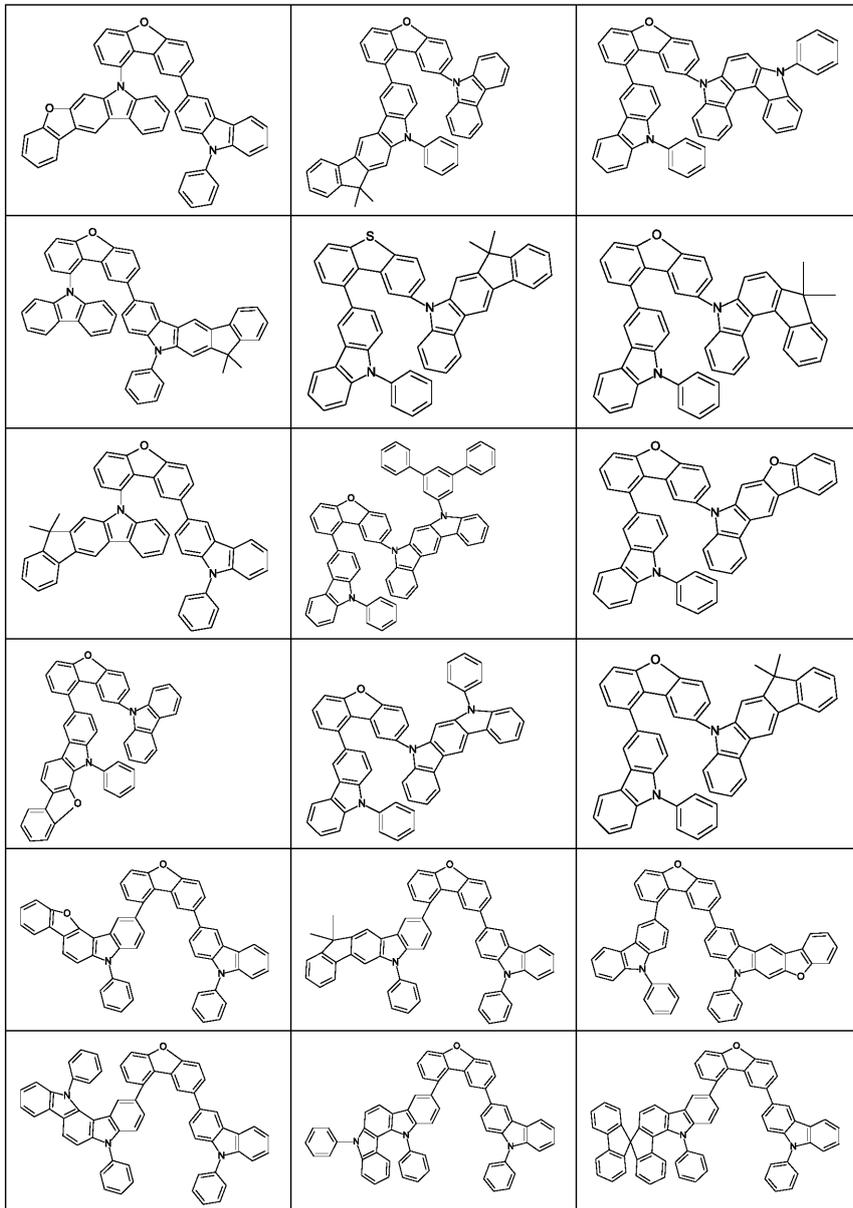
[0354]



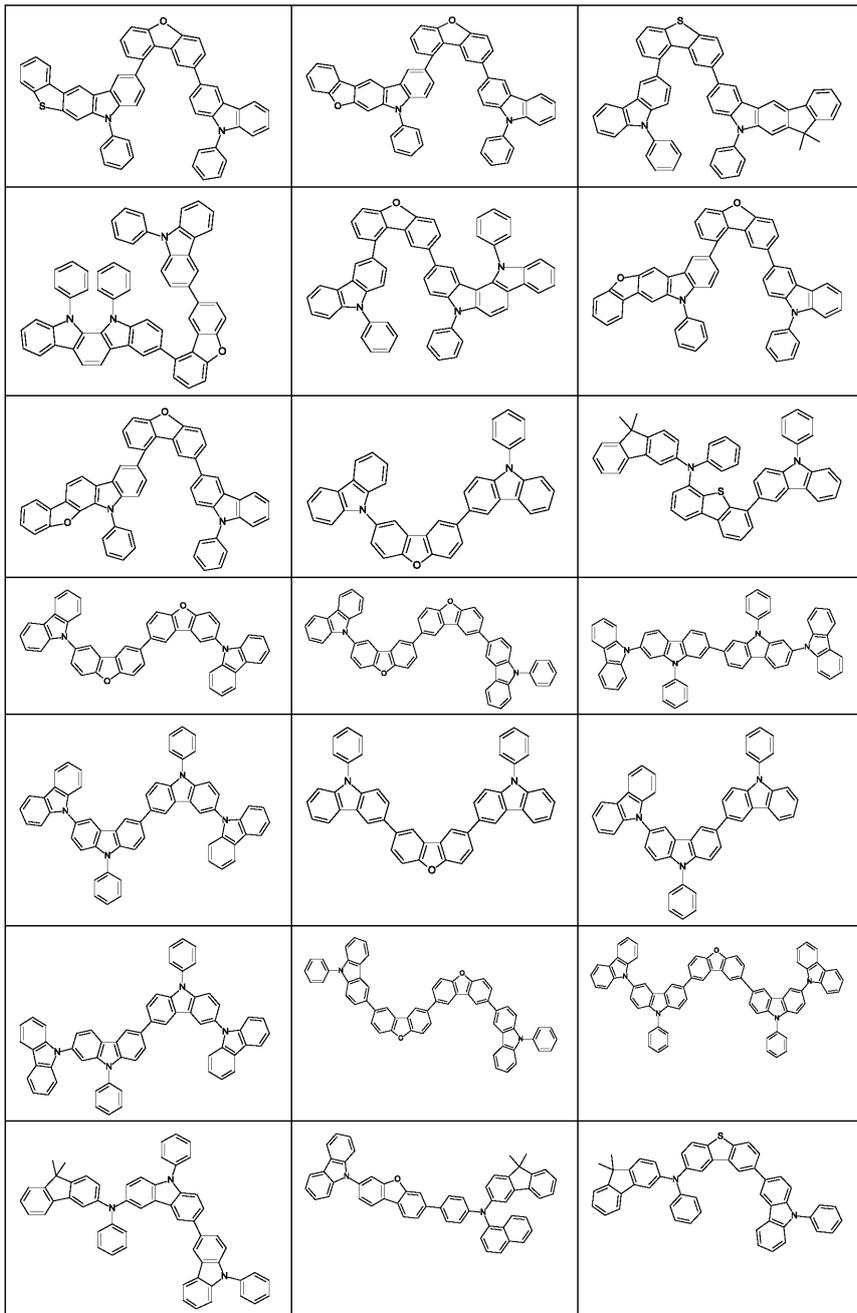
[0355]



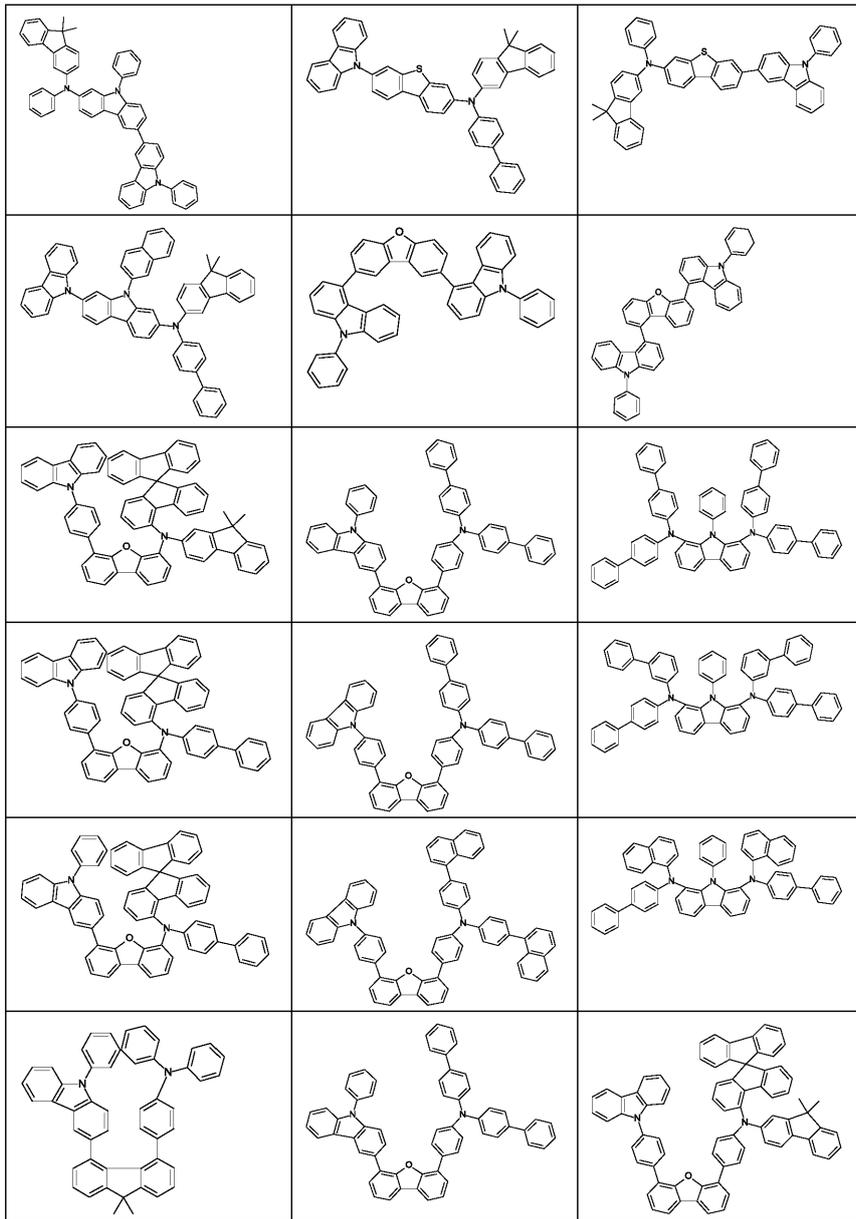
[0356]



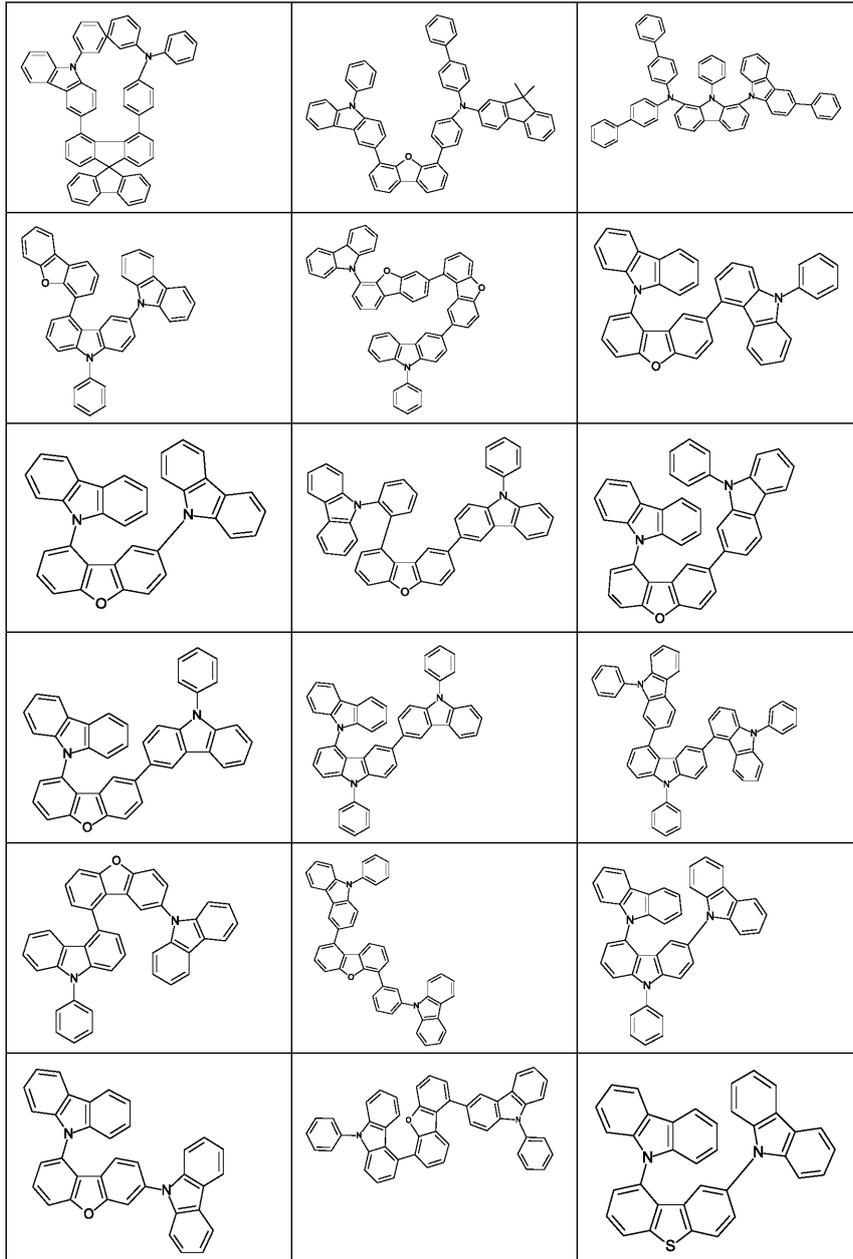
[0357]



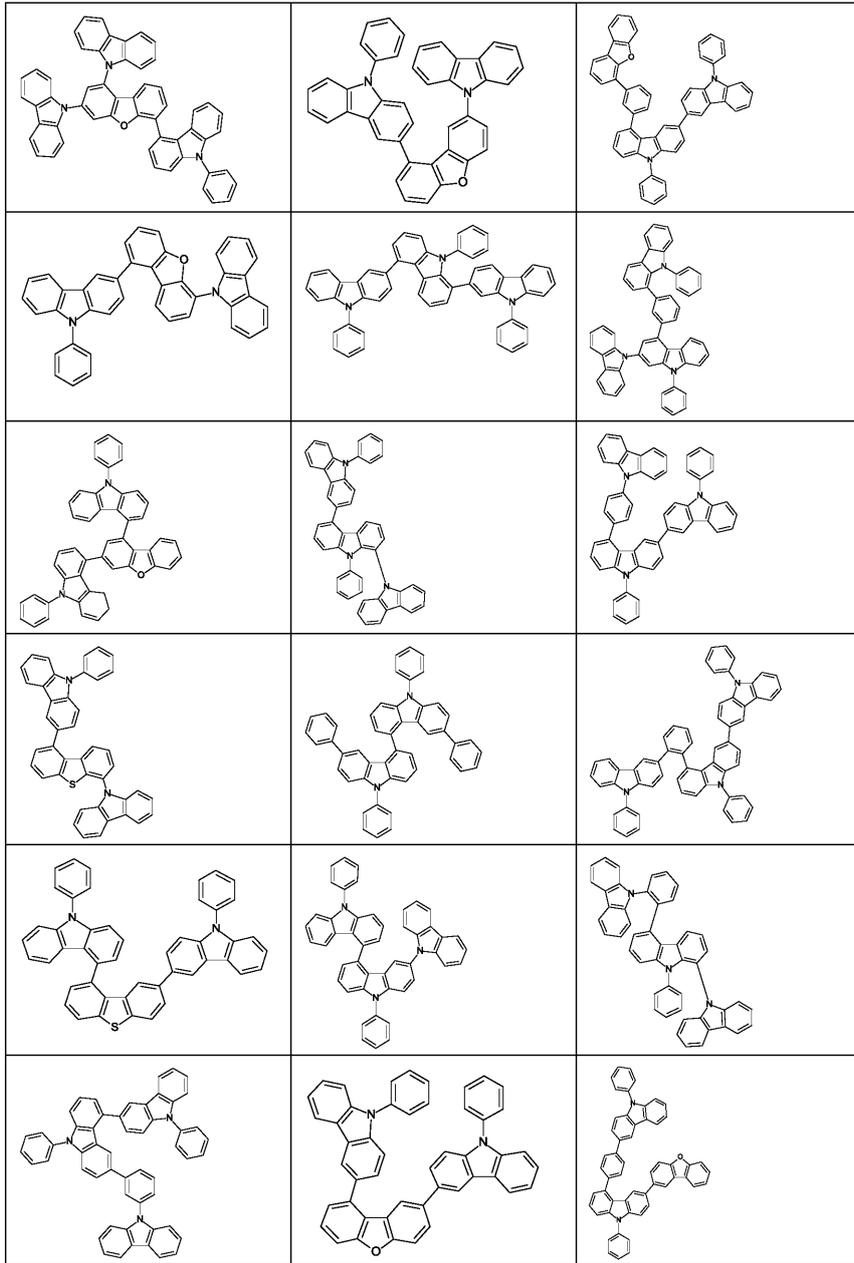
[0358]



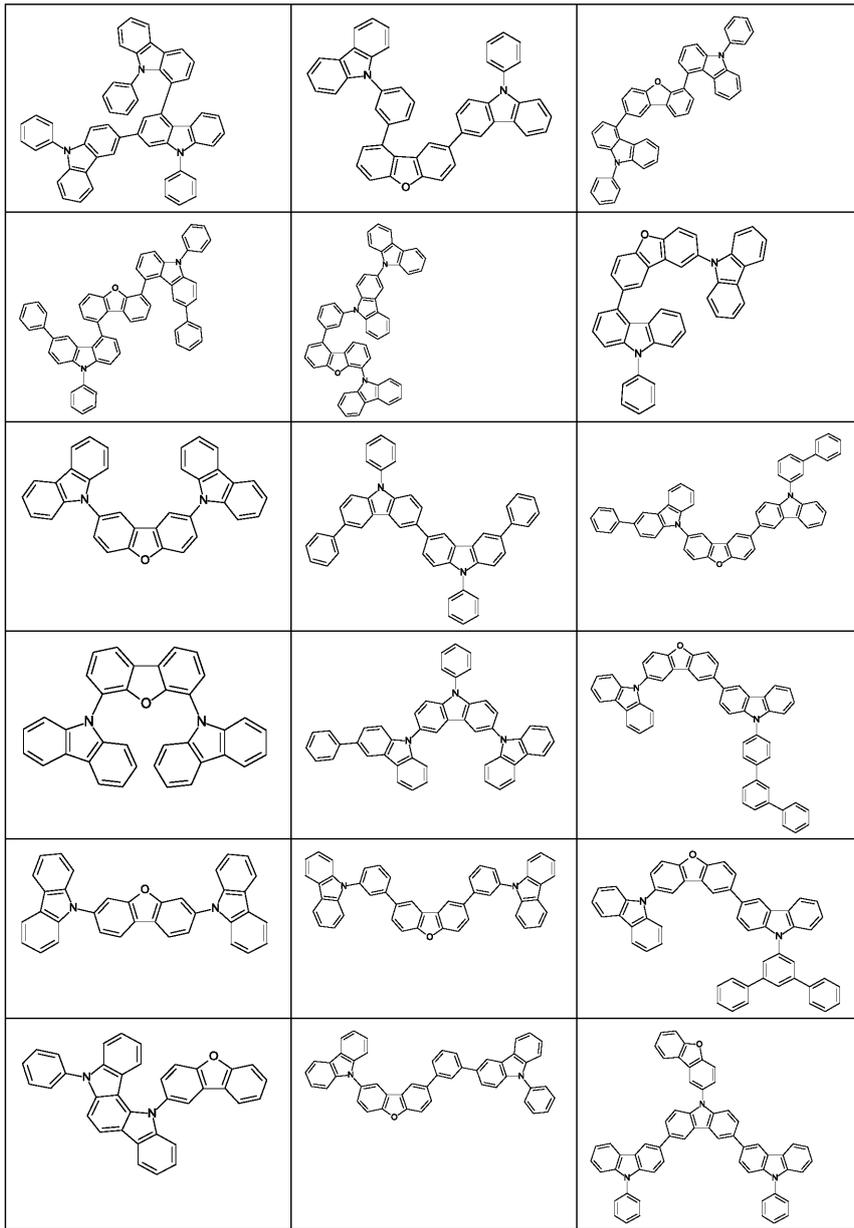
[0359]



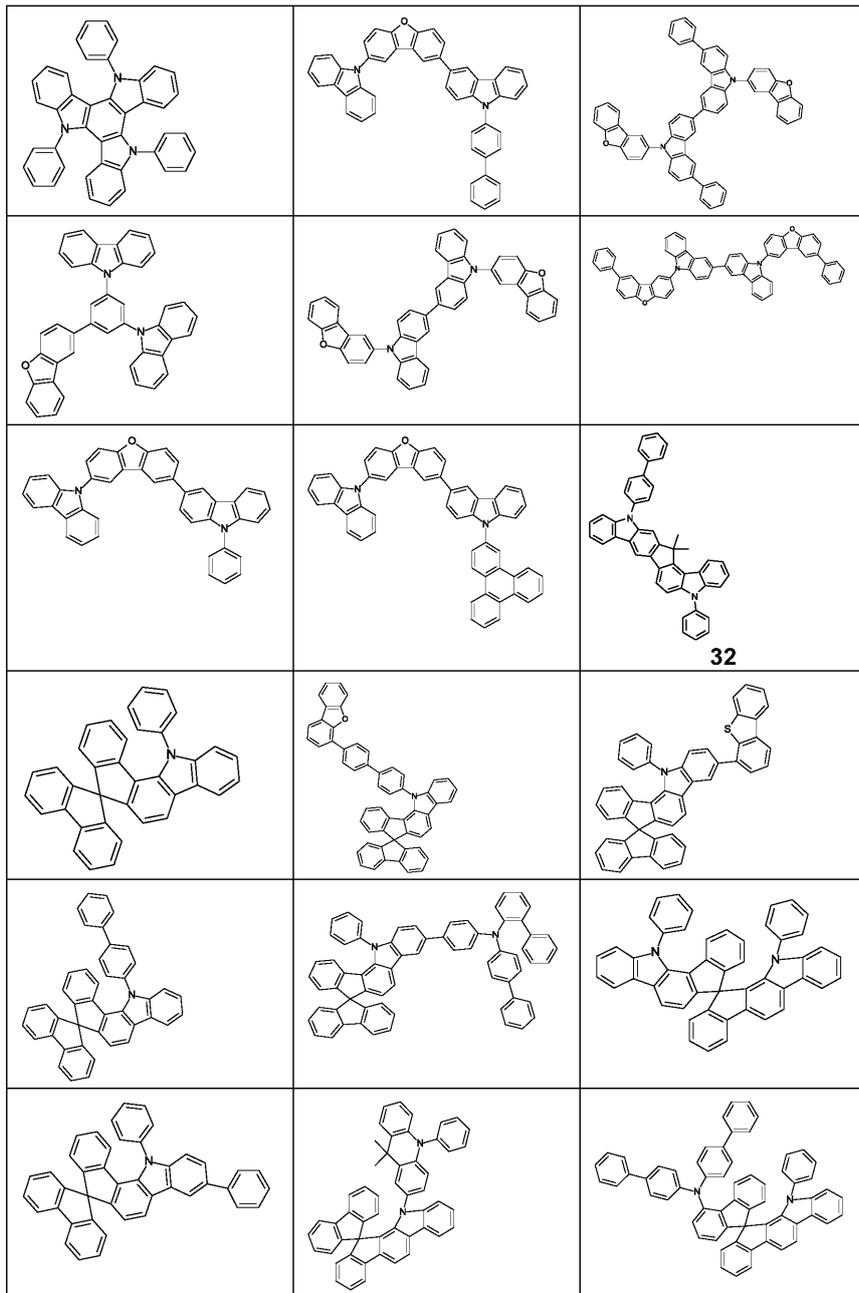
[0360]



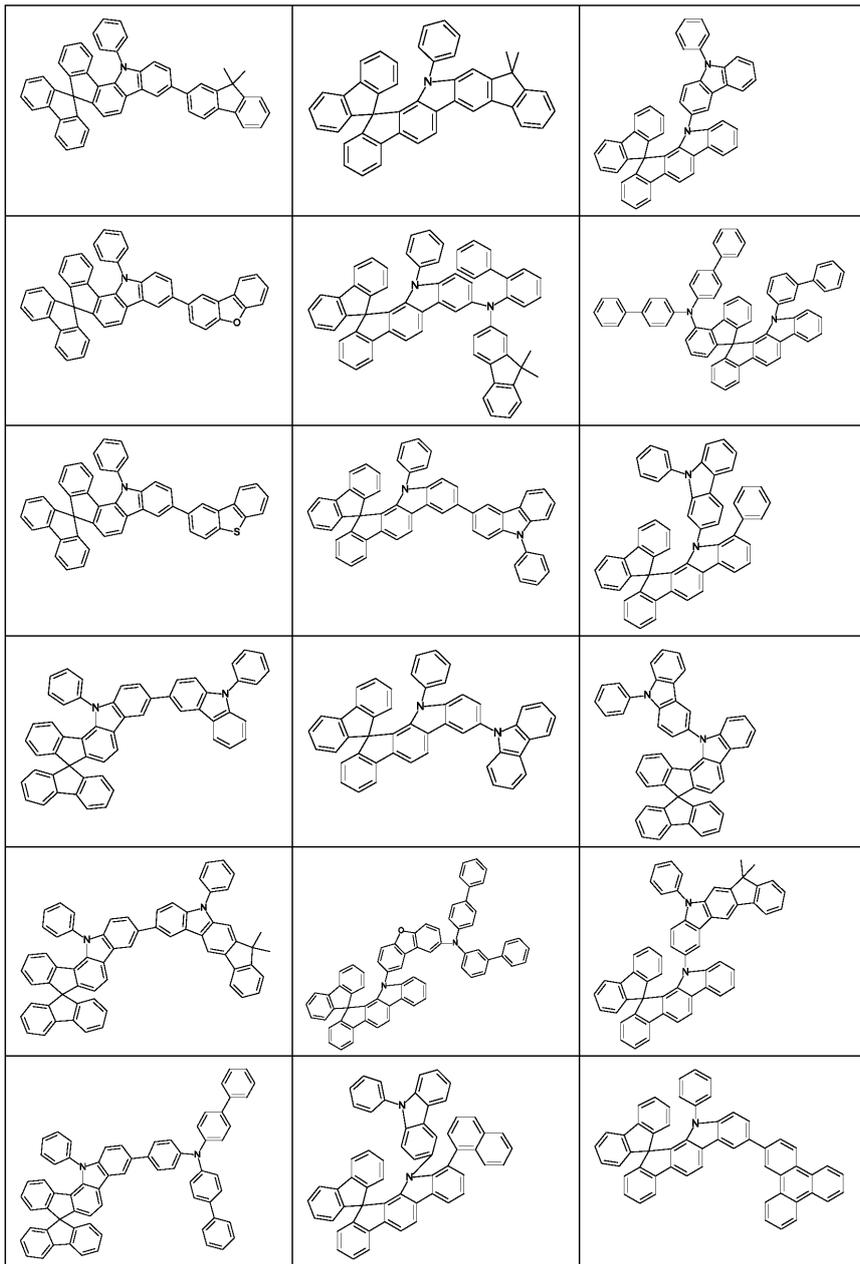
[0361]



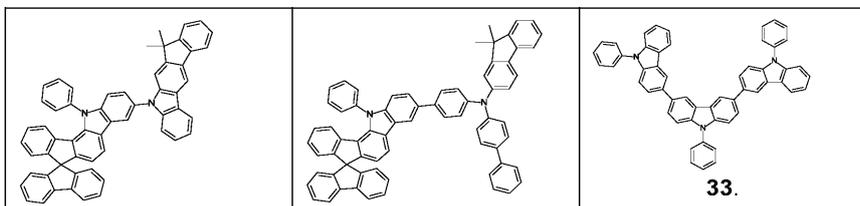
[0362]



[0363]



[0364]

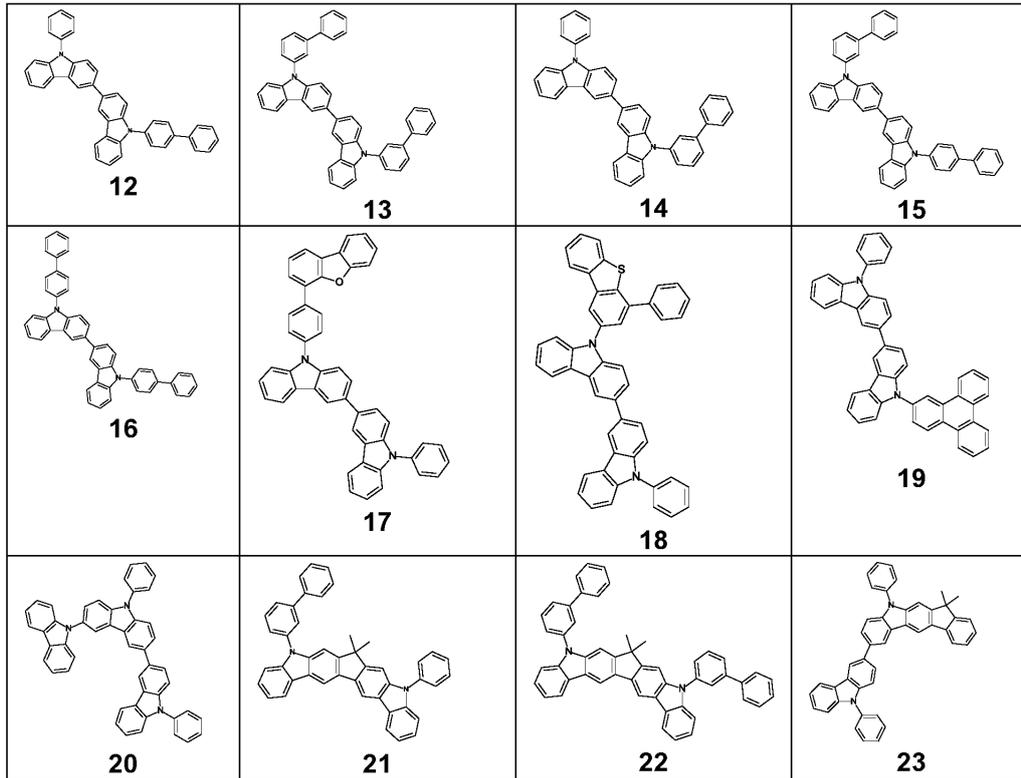


[0365]

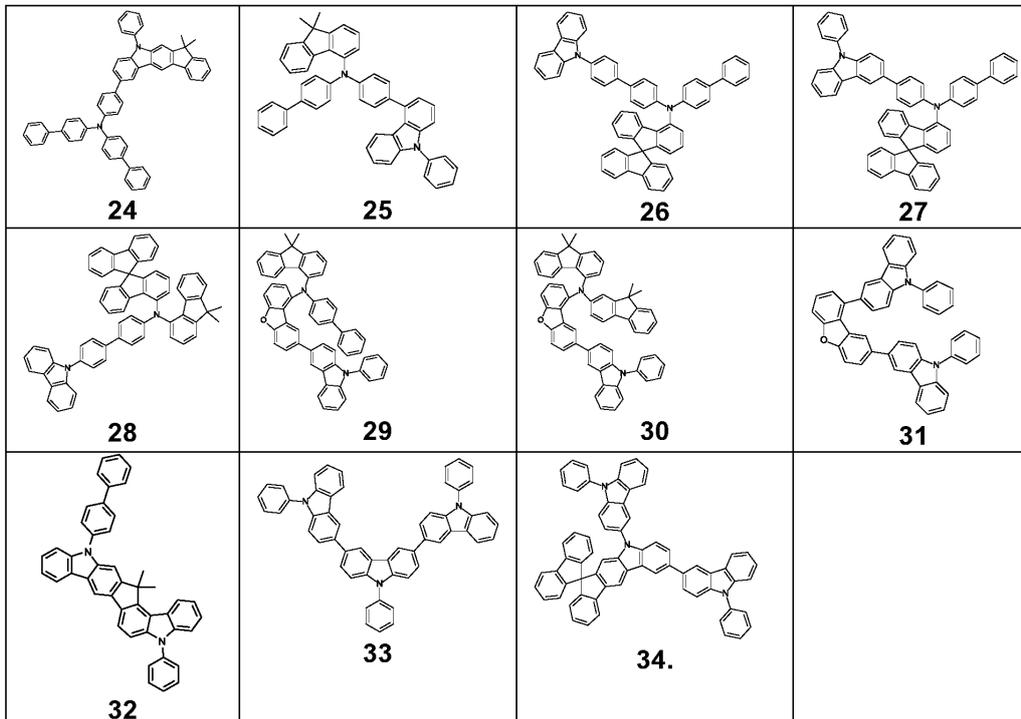
[0366]

본 발명에 따라 선택되는 식 (2), (2a), (2b), (2c), (2d), (2e), (2f), (2g), (2h) 및 (2i) 의 화합물의 특히 적합한 예는 표 4 에 설명된 바와 같은 화합물 12 내지 34 이다.

[0367] 표 4:



[0368]



[0369]

[0370] 식 (2) 의 화합물 또는 식 (2), (2a), (2b), (2c), (2d), (2e), (2f), (2g), (2h) 및 (2i) 의 바람직한 화합물 및 표 3 및 4 로부터의 화합물의 제조는 당업자에게 알려져 있다. 화합물은 당업자에게 알려진 합성 단계, 예를 들어 할로젠화, 바람직하게는 브롬화, 그리고 후속 유기금속 커플링 반응, 예를 들어 Suzuki 커플링, Heck 커플링 또는 Hartwig-Buchwald 커플링에 의해 제조될 수도 있다. 식 (2) 의 몇몇 화합물은 상업적으로 입수 가능하다.

[0371] 식 (1), (1a), (1b), (1c), (1d), (1e), (1f), (1g), (1h), (1i), (1j) 또는 (1k) 의 위에 언급된 호스트 재료

및 바람직한 것으로 설명된 이들의 실시형태 또는 표 1 및 표 2 로부터의 화합물은 식 (2), (2a), (2b), (2c), (2d), (2e), (2f), (2g), (2h) 및 (2i) 의 명시된 호스트 재료 및 바람직한 것으로 설명된 이들의 실시형태 또는 표 3 또는 4 로부터의 화합물과 본 발명에 따라 원하는대로 조합될 수 있다.

[0372] 본 발명의 조성물을 위한 식 (2) 의 호스트 재료와 식 (1) 의 호스트 재료의 특히 바람직한 혼합물은 표 3 으로부터의 화합물과 표 2로부터의 화합물 1 내지 11 의 조합에 의해 얻어진다.

[0373] 본 발명의 조성물을 위한 식 (2) 의 호스트 재료와 식 (1) 의 호스트 재료의 매우 특히 바람직한 혼합물은 이하에 표 5 에 나타낸 바처럼, 표 4 으로부터의 화합물 12 내지 34 과 표 2로부터의 화합물 1 내지 11 의 조합에 의해 얻어진다.

[0374] 표 5:

M1	1	12	M2	1	13	M3	1	14
M4	1	15	M5	1	16	M6	1	17
M7	1	18	M8	1	19	M9	1	20
M10	1	21	M11	1	22	M12	1	23
M13	1	24	M14	1	25	M15	1	26
M16	1	27	M17	1	28	M18	1	29
M19	1	30	M20	1	31	M21	1	32
M22	1	33	M23	1	34			
M24	2	12	M25	2	13	M26	2	14
M27	2	15	M28	2	16	M29	2	17
M30	2	18	M31	2	19	M32	2	20
M33	2	21	M34	2	22	M35	2	23
M36	2	24	M37	2	25	M38	2	26
M39	2	27	M40	2	28	M41	2	29
M42	2	30	M43	2	31	M44	2	32
M45	2	33	M46	2	34			
M47	3	12	M48	3	13	M49	3	14
M50	3	15	M51	3	16	M52	3	17
M53	3	18	M54	3	19	M55	3	20
M56	3	21	M57	3	22	M58	3	23
M59	3	24	M60	3	25	M61	3	26

[0375]

M62	3	27	M63	3	28	M64	3	29
M65	3	30	M66	3	31	M67	3	32
M68	3	33	M69	3	34			
M70	4	12	M71	4	13	M72	4	14
M73	4	15	M74	4	16	M75	4	17
M76	4	18	M77	4	19	M78	4	20
M79	4	21	M80	4	22	M81	4	23
M82	4	24	M83	4	25	M84	4	26
M85	4	27	M86	4	28	M87	4	29
M88	4	30	M89	4	31	M90	4	32
M91	4	33	M92	4	34			
M93	5	12	M94	5	13	M95	5	14
M96	5	15	M97	5	16	M98	5	17
M99	5	18	M100	5	19	M101	5	20
M102	5	21	M103	5	22	M104	5	23
M105	5	24	M106	5	25	M107	5	26
M108	5	27	M109	5	28	M110	5	29
M111	5	30	M112	5	31	M113	5	32
M114	5	33	M115	5	34			
M116	6	12	M117	6	13	M118	6	14
M119	6	15	M120	6	16	M121	6	17
M122	6	18	M123	6	19	M124	6	20
M125	6	21	M126	6	22	M127	6	23
M128	6	24	M129	6	25	M130	6	26
M131	6	27	M132	6	28	M133	6	29
M134	6	30	M135	6	31	M136	6	32
M137	6	33	M138	6	34			
M139	7	12	M140	7	13	M141	7	14
M142	7	15	M143	7	16	M144	7	17
M145	7	18	M146	7	19	M147	7	20
M148	7	21	M149	7	22	M150	7	23
M151	7	24	M152	7	25	M153	7	26
M154	7	27	M155	7	28	M156	7	29
M157	7	30	M158	7	31	M159	7	32
M160	7	33	M161	7	34			
M162	8	12	M163	8	13	M164	8	14
M165	8	15	M166	8	16	M167	8	17
M168	8	18	M169	8	19	M170	8	20
M171	8	21	M172	8	22	M173	8	23
M174	8	24	M175	8	25	M176	8	26

[0376]

M177	8	27	M178	8	28	M179	8	29
M180	8	30	M181	8	31	M182	8	32
M183	8	33	M184	8	34			
M185	9	12	M186	9	13	M187	9	14
M188	9	15	M189	9	16	M190	9	17
M191	9	18	M192	9	19	M193	9	20
M194	9	21	M195	9	22	M196	9	23
M197	9	24	M198	9	25	M199	9	26
M200	9	27	M201	9	28	M202	9	29
M203	9	30	M204	9	31	M205	9	32
M206	9	33	M207	9	34			
M208	10	12	M209	10	13	M210	10	14
M211	10	15	M212	10	16	M213	10	17
M214	10	18	M215	10	19	M216	10	20
M217	10	21	M218	10	22	M219	10	23
M220	10	24	M221	10	25	M222	10	26
M223	10	27	M224	10	28	M225	10	29
M226	10	30	M227	10	31	M228	10	32
M229	10	33	M230	10	34			
M231	11	12	M232	11	13	M233	11	14
M234	11	15	M235	11	16	M236	11	17
M237	11	18	M238	11	19	M239	11	20
M240	11	21	M241	11	22	M242	11	23
M243	11	24	M244	11	25	M245	11	26
M246	11	27	M247	11	28	M248	11	29
M249	11	30	M250	11	31	M251	11	32
M252	11	33	M253	11	34			

[0377]

[0378]

본 발명의 조성물에서 위에 설명된 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (1) 의 전자 수송 호스트의 농도는, 전체 조성물을 기준으로 5 중량% 내지 90 중량% 범위, 바람직하게는 10 중량% 내지 85 중량% 범위, 더욱 바람직하게는 20 중량% 내지 85 중량% 범위, 더욱 더 바람직하게는 30 중량% 내지 80 중량% 범위, 매우 특히 바람직하게는 20 중량% 내지 60 중량% 의 범위, 그리고 가장 바람직하게는 30 중량% 내지 50 중량%의 범위이다.

[0379]

조성물에서 위에 설명된 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (2) 의 정공 수송 호스트의 농도는, 전체 조성물을 기준으로 10 중량% 내지 95 중량% 범위, 바람직하게는 15 중량% 내지 90 중량% 범위, 더욱 바람직하게는 15 중량% 내지 80 중량% 범위, 더욱 더 바람직하게는 20 중량% 내지 70 중량% 범위, 매우 특히 바람직하게는 40 중량% 내지 80 중량% 범위, 그리고 가장 바람직하게는 50 중량% 내지 70 중량%의 범위이다.

[0380]

추가 바람직한 실시형태에서, 본 발명의 조성물은, 전자 수송 호스트 또는 전자 수송 매트릭스 재료로서 위에 설명되거나 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (1) 의 적어도 하나의 화합물 및 정공 수송 호스트 또는 정공 수송 매트릭스 재료로서 위에 설명되거나 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (2) 의 적어도 하나의 화합물뿐만 아니라, 추가 화합물도 역시, 특히 유기 기능성 재료도 포함할 수도 있다. 이 실시형태에서, 조성물은 바람직하게는 후술하는 바와 같이 전자 디바이스에서 유기 층을 형성한다.

[0381]

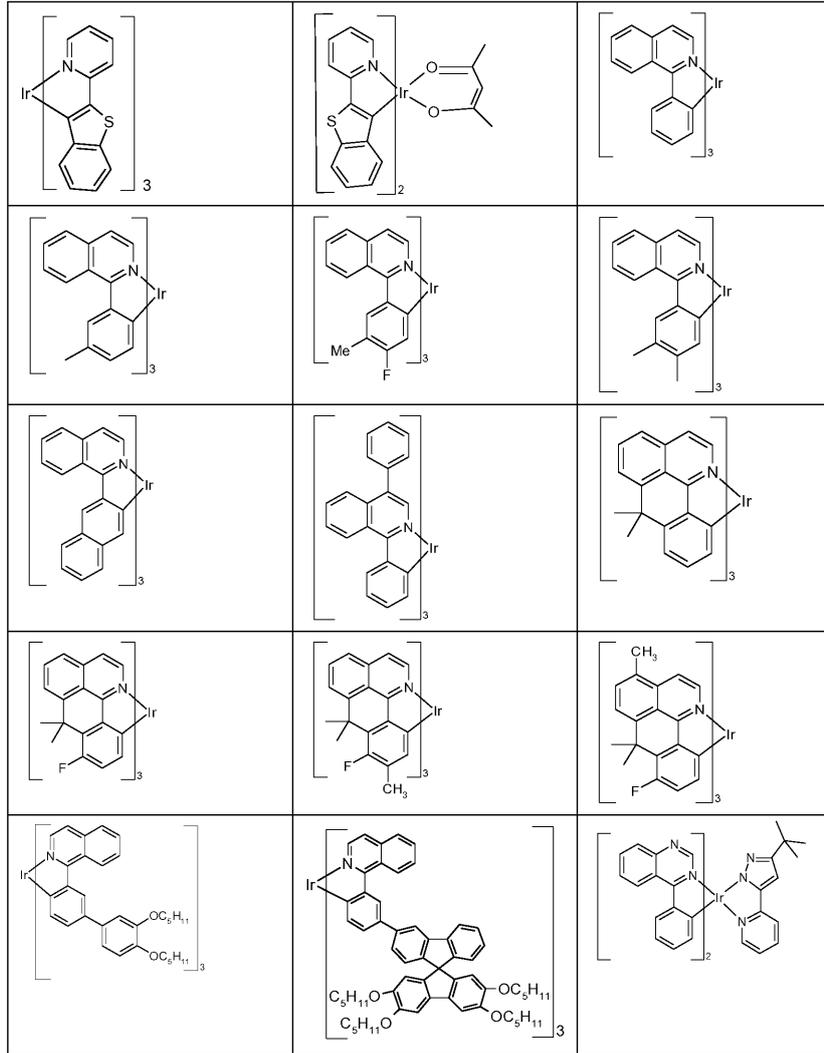
따라서, 본 발명은 또한, 위에 언급된 재료뿐만 아니라, 정공 주입 재료, 정공 수송 재료, 정공 차단 재료, 와이드 밴드갭 재료, 형광 방출체, 인광 방출체, 호스트 재료, 전자 차단 재료, 전자 수송 재료 및 전자 주입 재료, n 도펀트 및 p 도펀트로 이루어지는 군으로부터 선택된 적어도 하나의 추가 화합물도 포함하는 조성물에 관한 것이다. 당업자에게 공지된 다수의 재료로부터 이들을 선택하는 것은 당업자에게는 전혀 어려움이 없다.

[0382]

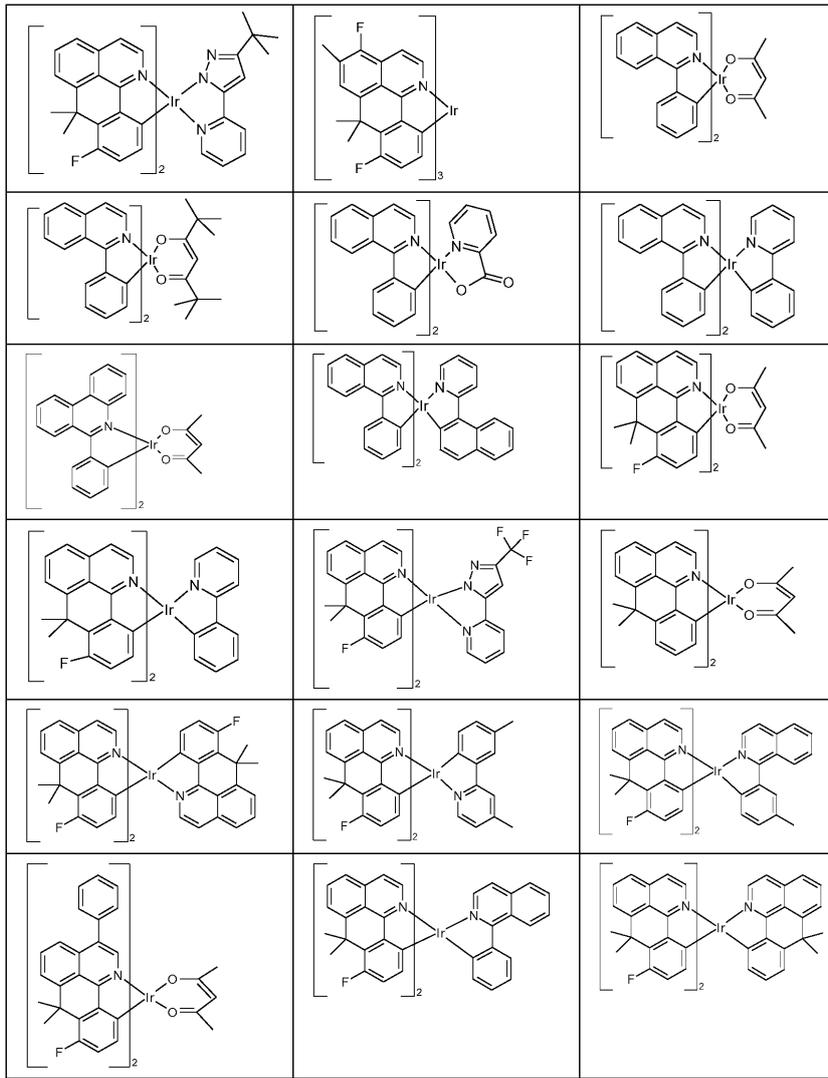
n 도펀트는 여기서 환원제, 즉 전자 공여체를 의미하는 것으로 이해된다. n 도펀트의 바람직한 예는 WO 2005/086251 A2에 따른 W(hpp)<sub>4</sub> 및 추가 전자 풍부 금속 착물, P=N 화합물 (예를 들어, WO 2012/175535 A1, WO 2012/175219 A1), 나프틸렌카르보디이미드 (예를 들어 WO 2012/168358 A1), 플루오렌 (예를 들어 WO 2012/031735 A1), 라디칼 및 디라디칼 (예를 들어 EP 1837926 A1, WO 2007/107306 A1), 피리딘 (예를 들어 EP 2452946 A1, EP 2463927 A1), N-복소환 화합물 (예를 들어 WO 2009/000237 A1) 및 아크리딘 및 페나진 (예를 들어 US 2007/145355 A1) 이다.

- [0383] 여기서 p 도펀트는 산화제, 즉 전자 수용체를 의미하는 것으로 이해된다. p 도펀트의 바람직한 예는 F<sub>4</sub>-TCNQ, F<sub>6</sub>-TNAP, NDP-2 (Novaled 제조), NDP-9 (Novaled 제조), 퀴논 (예를 들어 EP 1538684 A1, WO 2006/081780 A1, WO 2009/003455 A1, WO 2010/097433 A1), 라디알렌 재료 (예를 들어 EP 1988587 A1, US 2010/102709 A1, EP 2180029 A1, WO 2011/131185 A1, WO 2011134458 A1, US 2012/223296 A1), S-함유 전이 금속 착물 (예를 들어 WO 2007/134873 A1, WO 2008/061517 A2, WO 2008/061518 A2, DE 102008051737 A1, WO 2009/089821 A1, US 2010/096600 A1), 비스이미다졸 (예를 들어 WO 2008/138580 A1), 프탈로시아닌 (예를 들어 WO 2008/058525 A2), 보라-테트라아자펜탈렌 (예를 들어 WO 2007/115540 A1) 풀러렌 (예를 들어 DE 102010046040 A1) 및 주족 할라이드 (예를 들어 WO 2008/128519 A2) 이다.
- [0384] 와이드 밴드 갭 재료는 적어도 3.5 eV 의 밴드갭을 특징으로 하는 US 7,294,849의 개시의 범위 내의 재료를 의미하는 것으로 이해되며, 밴드 갭은 재료의 HOMO와 LUMO 에너지 사이의 갭을 의미하는 것으로 이해된다.
- [0385] 쌍극성 호스트 및 전자 수송 호스트를 포함하는 본 발명의 조성물이 적어도 하나의 발광 화합물 또는 방출체를 추가로 포함하는 경우에 바람직하고, 인광 방출체가 특히 바람직하다.
- [0386] "인광 방출체"라는 용어는 전형적으로 더 높은 스핀 다중도를 갖는 여기 상태, 즉 1 초과 스핀 상태로부터 스핀-금지 천이를 통해, 예를 들어 삼중항 상태 또는 심지어 더 높은 스핀 양자수를 갖는 상태, 예를 들어 오중항 상태로부터의 천이를 통해 광이 방출되는 화합물을 포함한다. 이것은 바람직하게 삼중항 상태로부터의 천이를 의미하는 것으로 이해된다.
- [0387] 적합한 인광 방출체 (= 삼중항 방출체) 은 특히, 적합하게 여기될 때, 바람직하게 가시 영역에서 광을 방출하고, 또한 원자 번호가 20 초과이고, 바람직하게 38 초과 그리고 84 미만이고, 보다 바람직하게 56 초과 그리고 80 미만인 적어도 하나의 원자, 특히 이 원자 번호를 갖는 금속을 함유하는 화합물이다. 사용된 바람직한 인광 방출체는 구리, 몰리브덴, 텅스텐, 레늄, 루테튬, 오스뮴, 로듐, 이리듐, 팔라듐, 백금, 은, 금 또는 유로퓸을 함유하는 화합물, 특히 이리듐 또는 백금을 함유하는 화합물이다. 본 발명의 맥락에서, 위에 언급된 금속을 함유하는 모든 발광성 화합물은 인광 방출체로서 간주된다.
- [0388] 일반적으로, 유기 전계 발광 디바이스의 분야의 당업자에게 알려지고 종래 기술에 따른 인광 OLED 에 사용되는 모든 인광 착물이 적합하다.
- [0389] 위에 기재된 방출체의 예들은 출원 WO 2016/015815, WO 00/70655, WO 2001/41512, WO 2002/02714, WO 2002/15645, EP 1191613, EP 1191612, EP 1191614, WO 05/033244, WO 05/019373, US 2005/0258742, WO 2009/146770, WO 2010/015307, WO 2010/031485, WO 2010/054731, WO 2010/054728, WO 2010/086089, WO 2010/099852, WO 2010/102709, WO 2011/032626, WO 2011/066898, WO 2011/157339, WO 2012/007086, WO 2014/008982, WO 2014/023377, WO 2014/094961, WO 2014/094960, WO 2015/036074, WO 2015/104045, WO 2015/117718, WO 2016/015815, WO 2016/124304, WO 2017/032439, WO 2015/036074, WO 2015/117718 및 WO 2016/015815 에서 찾아볼 수 있다.
- [0390] 인광 방출체의 바람직한 예는 아래 표 6 에 열거되어 있다.

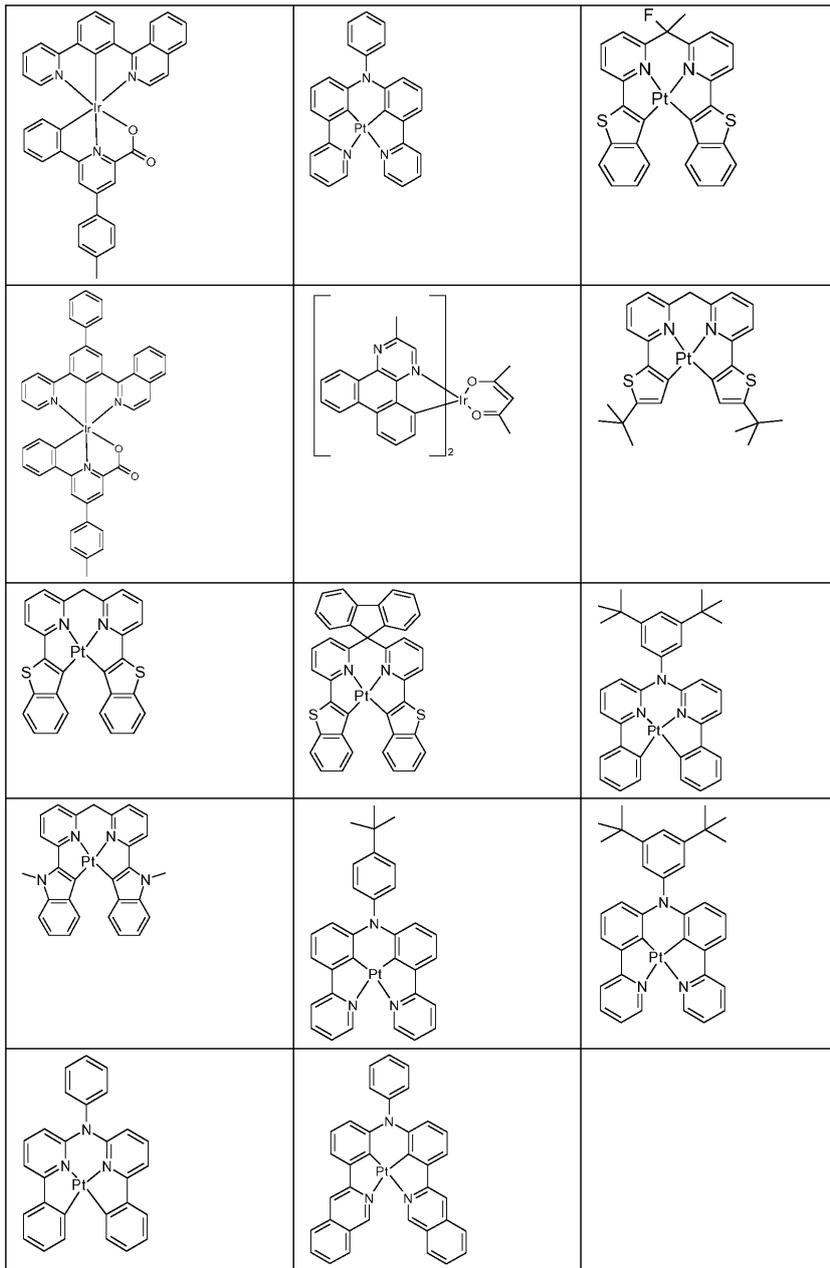
[0391] 표 6:



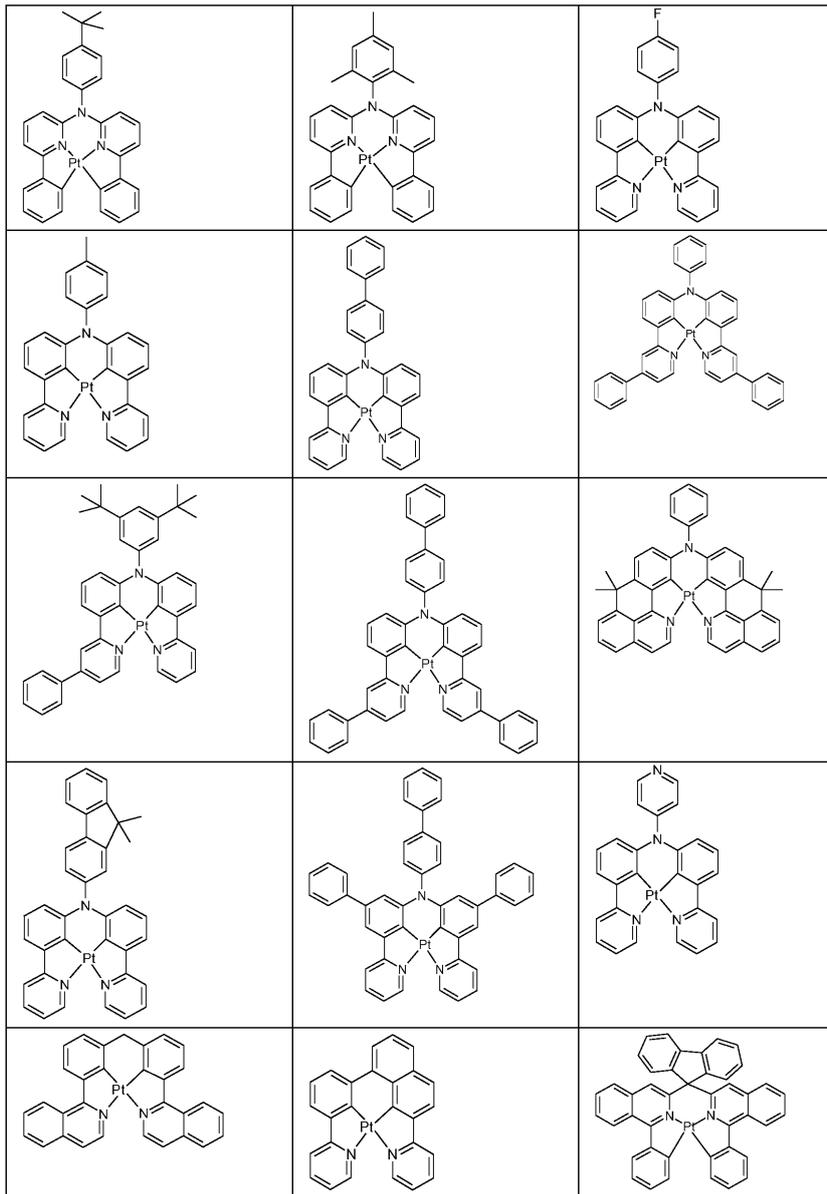
[0392]



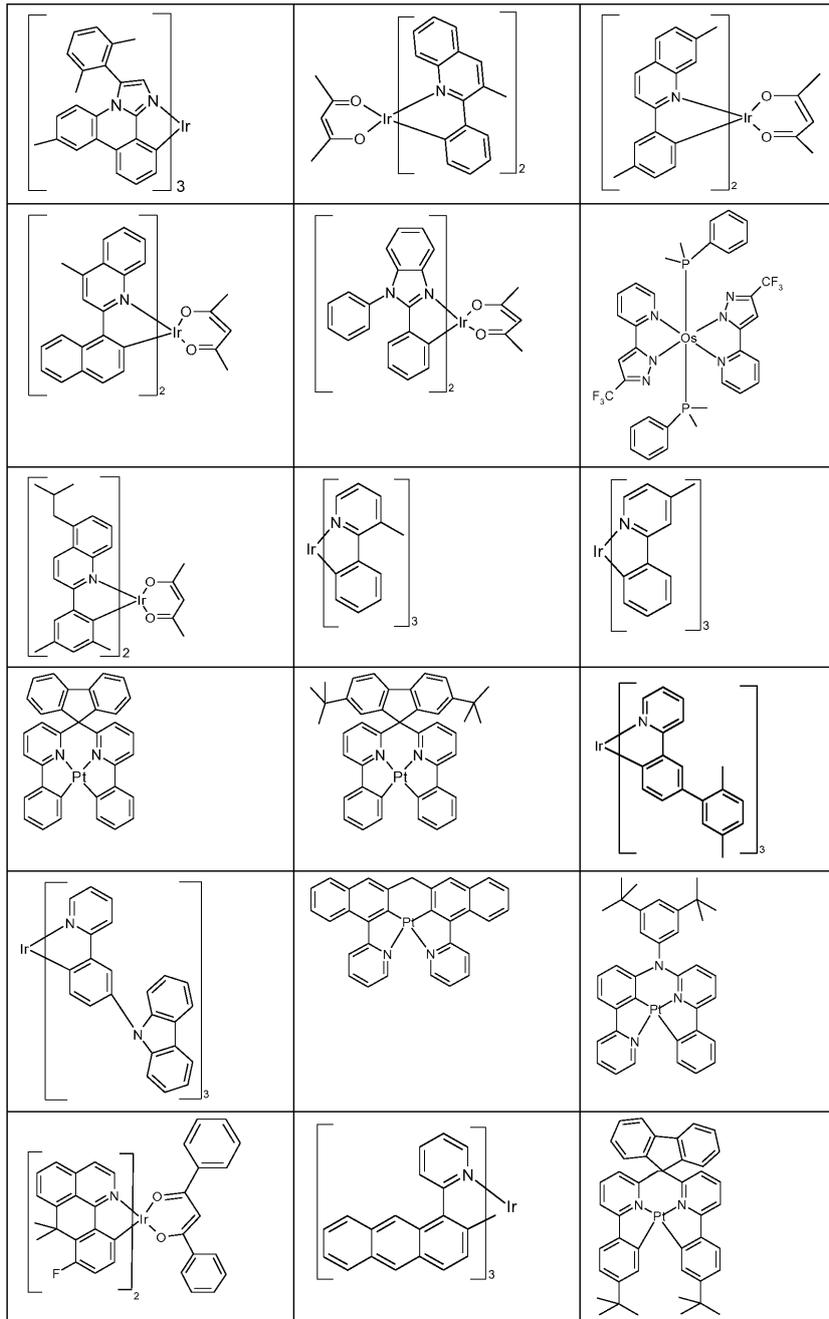
[0393]



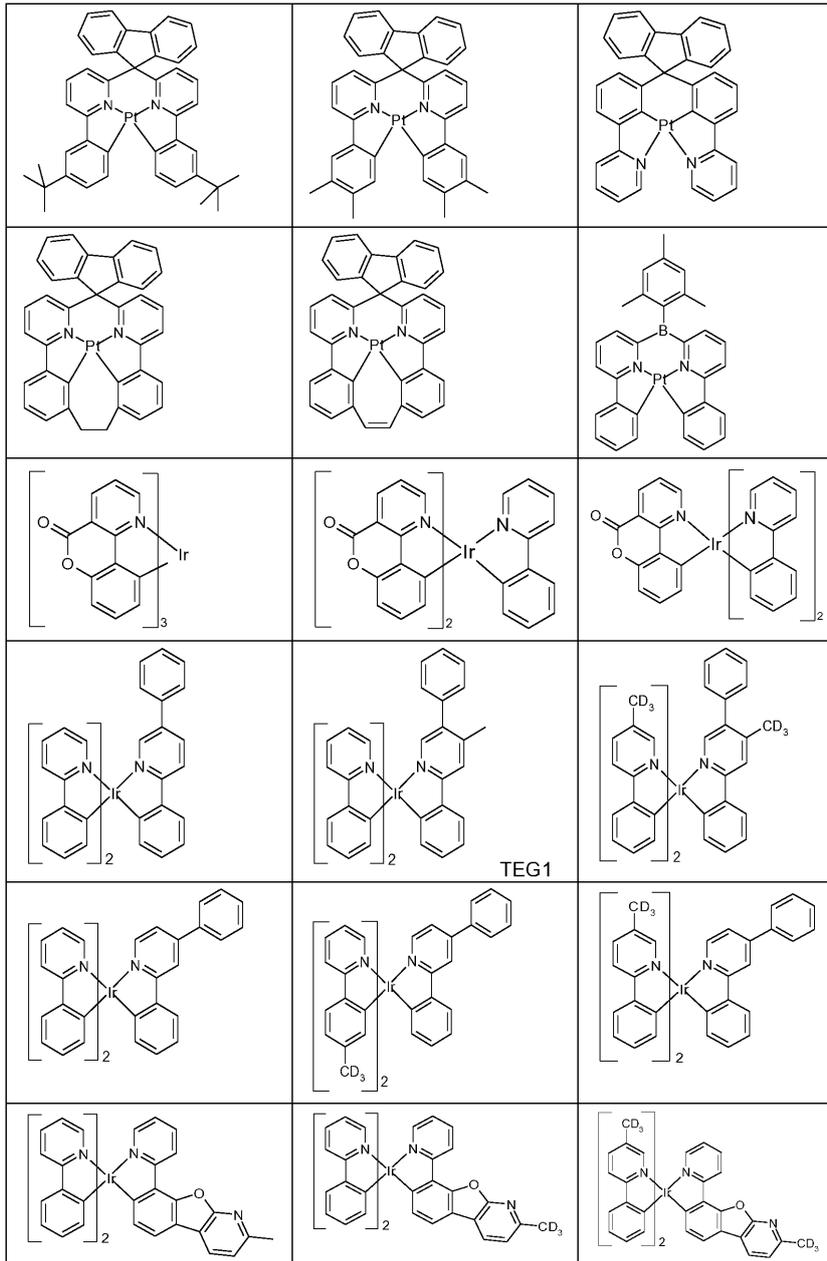
[0394]



[0395]

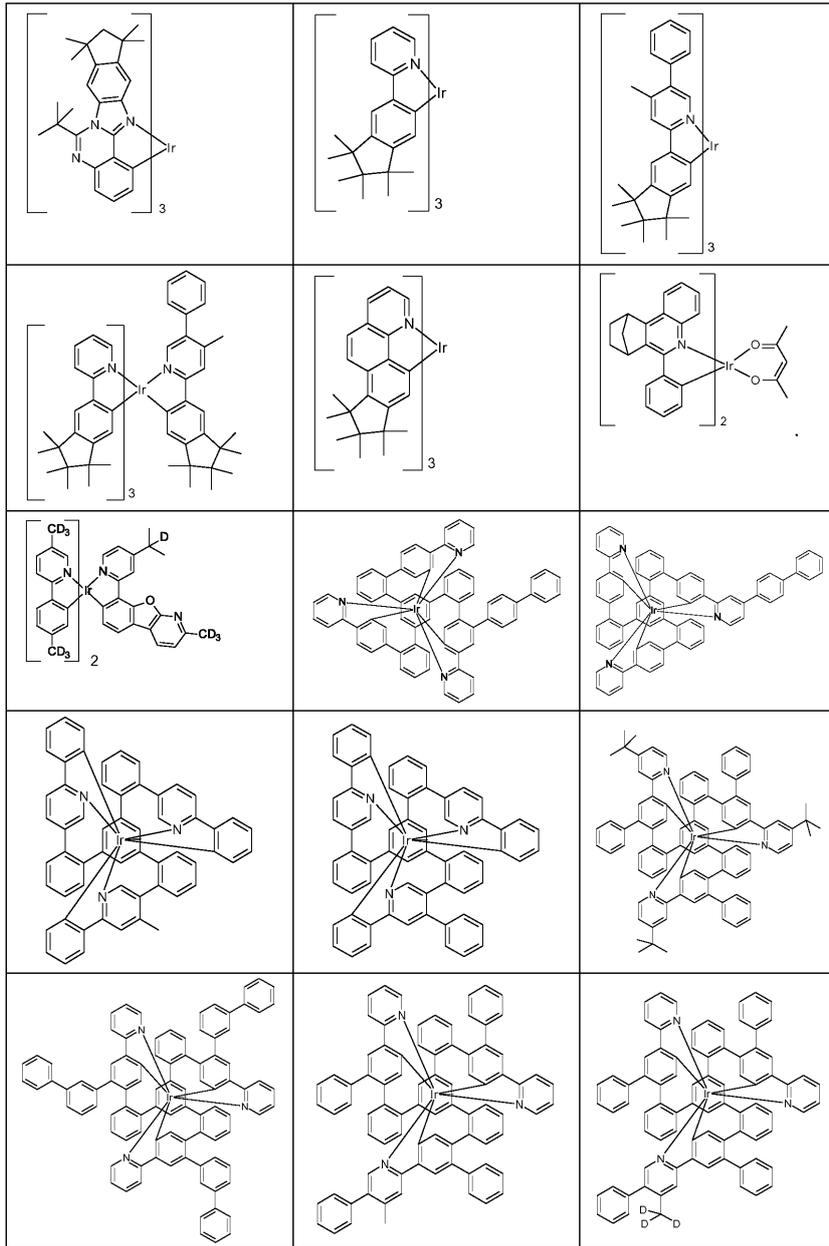


[0396]



TEG1

[0397]



[0398]

[0399]

인광 폴리포달 방출체의 바람직한 예는 아래 표 7에 열거되어 있다.

[0400] 표 7:

CAS-1269508-30-6	CAS-1989601-68-4	CAS-1989602-19-8	CAS-1989602-70-1
CAS-1215692-34-4	CAS-1989601-69-5	CAS-1989602-20-1	CAS-1989602-71-2
CAS-1370364-40-1	CAS-1989601-70-8	CAS-1989602-21-2	CAS-1989602-72-3
CAS-1370364-42-3	CAS-1989601-71-9	CAS-1989602-22-3	CAS-1989602-73-4
CAS-1989600-74-9	CAS-1989601-72-0	CAS-1989602-23-4	CAS-1989602-74-5
CAS-1989600-75-0	CAS-1989601-73-1	CAS-1989602-24-5	CAS-1989602-75-6
CAS-1989600-77-2	CAS-1989601-74-2	CAS-1989602-25-6	CAS-1989602-76-7
CAS-1989600-78-3	CAS-1989601-75-3	CAS-1989602-26-7	CAS-1989602-77-8
CAS-1989600-79-4	CAS-1989601-76-4	CAS-1989602-27-8	CAS-1989602-78-9
CAS-1989600-82-9	CAS-1989601-77-5	CAS-1989602-28-9	CAS-1989602-79-0
CAS-1989600-83-0	CAS-1989601-78-6	CAS-1989602-29-0	CAS-1989602-80-3
CAS-1989600-84-1	CAS-1989601-79-7	CAS-1989602-30-3	CAS-1989602-82-5
CAS-1989600-85-2	CAS-1989601-80-0	CAS-1989602-31-4	CAS-1989602-84-7
CAS-1989600-86-3	CAS-1989601-81-1	CAS-1989602-32-5	CAS-1989602-85-8
CAS-1989600-87-4	CAS-1989601-82-2	CAS-1989602-33-6	CAS-1989602-86-9
CAS-1989600-88-5	CAS-1989601-83-3	CAS-1989602-34-7	CAS-1989602-87-0
CAS-1989600-89-6	CAS-1989601-84-4	CAS-1989602-35-8	CAS-1989602-88-1
CAS-1989601-11-7	CAS-1989601-85-5	CAS-1989602-36-9	CAS-1989604-00-3
CAS-1989601-23-1	CAS-1989601-86-6	CAS-1989602-37-0	CAS-1989604-01-4
CAS-1989601-26-4	CAS-1989601-87-7	CAS-1989602-38-1	CAS-1989604-02-5
CAS-1989601-28-6	CAS-1989601-88-8	CAS-1989602-39-2	CAS-1989604-03-6
CAS-1989601-29-7	CAS-1989601-89-9	CAS-1989602-40-5	CAS-1989604-04-7
CAS-1989601-33-3	CAS-1989601-90-2	CAS-1989602-41-6	CAS-1989604-05-8
CAS-1989601-40-2	CAS-1989601-91-3	CAS-1989602-42-7	CAS-1989604-06-9
CAS-1989601-41-3	CAS-1989601-92-4	CAS-1989602-43-8	CAS-1989604-07-0
CAS-1989601-42-4	CAS-1989601-93-5	CAS-1989602-44-9	CAS-1989604-08-1
CAS-1989601-43-5	CAS-1989601-94-6	CAS-1989602-45-0	CAS-1989604-09-2
CAS-1989601-44-6	CAS-1989601-95-7	CAS-1989602-46-1	CAS-1989604-10-5
CAS-1989601-45-7	CAS-1989601-96-8	CAS-1989602-47-2	CAS-1989604-11-6
CAS-1989601-46-8	CAS-1989601-97-9	CAS-1989602-48-3	CAS-1989604-13-8
CAS-1989601-47-9	CAS-1989601-98-0	CAS-1989602-49-4	CAS-1989604-14-9
CAS-1989601-48-0	CAS-1989601-99-1	CAS-1989602-50-7	CAS-1989604-15-0
CAS-1989601-49-1	CAS-1989602-00-7	CAS-1989602-51-8	CAS-1989604-16-1
CAS-1989601-50-4	CAS-1989602-01-8	CAS-1989602-52-9	CAS-1989604-17-2
CAS-1989601-51-5	CAS-1989602-02-9	CAS-1989602-53-0	CAS-1989604-18-3
CAS-1989601-52-6	CAS-1989602-03-0	CAS-1989602-54-1	CAS-1989604-19-4
CAS-1989601-53-7	CAS-1989602-04-1	CAS-1989602-55-2	CAS-1989604-20-7
CAS-1989601-54-8	CAS-1989602-05-2	CAS-1989602-56-3	CAS-1989604-21-8
CAS-1989601-55-9	CAS-1989602-06-3	CAS-1989602-57-4	CAS-1989604-22-9
CAS-1989601-56-0	CAS-1989602-07-4	CAS-1989602-58-5	CAS-1989604-23-0
CAS-1989601-57-1	CAS-1989602-08-5	CAS-1989602-59-6	CAS-1989604-24-1
CAS-1989601-58-2	CAS-1989602-09-6	CAS-1989602-60-9	CAS-1989604-25-2
CAS-1989601-59-3	CAS-1989602-10-9	CAS-1989602-61-0	CAS-1989604-26-3
CAS-1989601-60-6	CAS-1989602-11-0	CAS-1989602-62-1	CAS-1989604-27-4
CAS-1989601-61-7	CAS-1989602-12-1	CAS-1989602-63-2	CAS-1989604-28-5
CAS-1989601-62-8	CAS-1989602-13-2	CAS-1989602-64-3	CAS-1989604-29-6
CAS-1989601-63-9	CAS-1989602-14-3	CAS-1989602-65-4	CAS-1989604-30-9

[0401]

CAS-1989601-64-0	CAS-1989602-15-4	CAS-1989602-66-5	CAS-1989604-31-0
CAS-1989601-65-1	CAS-1989602-16-5	CAS-1989602-67-6	CAS-1989604-32-1
CAS-1989601-66-2	CAS-1989602-17-6	CAS-1989602-68-7	CAS-1989604-33-2
CAS-1989601-67-3	CAS-1989602-18-7	CAS-1989602-69-8	CAS-1989604-34-3
CAS-1989604-35-4	CAS-1989604-88-7	CAS-1989605-52-8	CAS-1989606-07-6
CAS-1989604-36-5	CAS-1989604-89-8	CAS-1989605-53-9	CAS-1989606-08-7
CAS-1989604-37-6	CAS-1989604-90-1	CAS-1989605-54-0	CAS-1989606-09-8
CAS-1989604-38-7	CAS-1989604-92-3	CAS-1989605-55-1	CAS-1989606-10-1
CAS-1989604-39-8	CAS-1989604-93-4	CAS-1989605-56-2	CAS-1989606-11-2
CAS-1989604-40-1	CAS-1989604-94-5	CAS-1989605-57-3	CAS-1989606-12-3
CAS-1989604-41-2	CAS-1989604-95-6	CAS-1989605-58-4	CAS-1989606-13-4
CAS-1989604-42-3	CAS-1989604-96-7	CAS-1989605-59-5	CAS-1989606-14-5
CAS-1989604-43-4	CAS-1989604-97-8	CAS-1989605-61-9	CAS-1989606-15-6
CAS-1989604-45-6	CAS-1989605-09-5	CAS-1989605-62-0	CAS-1989606-16-7
CAS-1989604-46-7	CAS-1989605-10-8	CAS-1989605-63-1	CAS-1989606-17-8
CAS-1989604-47-8	CAS-1989605-11-9	CAS-1989605-64-2	CAS-1989606-18-9
CAS-1989604-48-9	CAS-1989605-13-1	CAS-1989605-65-3	CAS-1989606-19-0
CAS-1989604-49-0	CAS-1989605-14-2	CAS-1989605-66-4	CAS-1989606-20-3
CAS-1989604-50-3	CAS-1989605-15-3	CAS-1989605-67-5	CAS-1989606-21-4
CAS-1989604-52-5	CAS-1989605-16-4	CAS-1989605-68-6	CAS-1989606-22-5
CAS-1989604-53-6	CAS-1989605-17-5	CAS-1989605-69-7	CAS-1989606-23-6
CAS-1989604-54-7	CAS-1989605-18-6	CAS-1989605-70-0	CAS-1989606-24-7
CAS-1989604-55-8	CAS-1989605-19-7	CAS-1989605-71-1	CAS-1989606-26-9
CAS-1989604-56-9	CAS-1989605-20-0	CAS-1989605-72-2	CAS-1989606-27-0
CAS-1989604-57-0	CAS-1989605-21-1	CAS-1989605-73-3	CAS-1989606-28-1
CAS-1989604-58-1	CAS-1989605-22-2	CAS-1989605-74-4	CAS-1989606-29-2
CAS-1989604-59-2	CAS-1989605-23-3	CAS-1989605-75-5	CAS-1989606-30-5
CAS-1989604-60-5	CAS-1989605-24-4	CAS-1989605-76-6	CAS-1989606-31-6
CAS-1989604-61-6	CAS-1989605-25-5	CAS-1989605-77-7	CAS-1989606-32-7
CAS-1989604-62-7	CAS-1989605-26-6	CAS-1989605-78-8	CAS-1989606-33-8
CAS-1989604-63-8	CAS-1989605-27-7	CAS-1989605-79-9	CAS-1989606-34-9
CAS-1989604-64-9	CAS-1989605-28-8	CAS-1989605-81-3	CAS-1989606-35-0
CAS-1989604-65-0	CAS-1989605-29-9	CAS-1989605-82-4	CAS-1989606-36-1
CAS-1989604-66-1	CAS-1989605-30-2	CAS-1989605-83-5	CAS-1989606-37-2
CAS-1989604-67-2	CAS-1989605-31-3	CAS-1989605-84-6	CAS-1989606-38-3
CAS-1989604-68-3	CAS-1989605-32-4	CAS-1989605-85-7	CAS-1989606-39-4
CAS-1989604-69-4	CAS-1989605-33-5	CAS-1989605-86-8	CAS-1989606-40-7
CAS-1989604-70-7	CAS-1989605-34-6	CAS-1989605-87-9	CAS-1989606-41-8
CAS-1989604-71-8	CAS-1989605-35-7	CAS-1989605-88-0	CAS-1989606-42-9
CAS-1989604-72-9	CAS-1989605-36-8	CAS-1989605-89-1	CAS-1989606-43-0
CAS-1989604-73-0	CAS-1989605-37-9	CAS-1989605-90-4	CAS-1989606-44-1
CAS-1989604-74-1	CAS-1989605-38-0	CAS-1989605-91-5	CAS-1989606-45-2
CAS-1989604-75-2	CAS-1989605-39-1	CAS-1989605-92-6	CAS-1989606-46-3
CAS-1989604-76-3	CAS-1989605-40-4	CAS-1989605-93-7	CAS-1989606-48-5
CAS-1989604-77-4	CAS-1989605-41-5	CAS-1989605-94-8	CAS-1989606-49-6
CAS-1989604-78-5	CAS-1989605-42-6	CAS-1989605-95-9	CAS-1989606-53-2
CAS-1989604-79-6	CAS-1989605-43-7	CAS-1989605-96-0	CAS-1989606-55-4
CAS-1989604-80-9	CAS-1989605-44-8	CAS-1989605-97-1	CAS-1989606-56-5
CAS-1989604-81-0	CAS-1989605-45-9	CAS-1989605-98-2	CAS-1989606-61-2
CAS-1989604-82-1	CAS-1989605-46-0	CAS-1989605-99-3	CAS-1989606-62-3
CAS-1989604-83-2	CAS-1989605-47-1	CAS-1989606-00-9	CAS-1989606-63-4
CAS-1989604-84-3	CAS-1989605-48-2	CAS-1989606-01-0	CAS-1989606-67-8
CAS-1989604-85-4	CAS-1989605-49-3	CAS-1989606-04-3	CAS-1989606-69-0
CAS-1989604-86-5	CAS-1989605-50-6	CAS-1989606-05-4	CAS-1989606-70-3

[0402]

CAS-1989604-87-6	CAS-1989605-51-7	CAS-1989606-06-5	CAS-1989606-74-7
CAS-1989658-39-0	CAS-2088184-56-7	CAS-2088185-07-1	CAS-2088185-66-2
CAS-1989658-41-4	CAS-2088184-57-8	CAS-2088185-08-2	CAS-2088185-67-3
CAS-1989658-43-6	CAS-2088184-58-9	CAS-2088185-09-3	CAS-2088185-68-4
CAS-1989658-47-0	CAS-2088184-59-0	CAS-2088185-10-6	CAS-2088185-69-5
CAS-1989658-49-2	CAS-2088184-60-3	CAS-2088185-11-7	CAS-2088185-70-8
CAS-2088184-07-8	CAS-2088184-61-4	CAS-2088185-12-8	CAS-2088185-71-9
CAS-2088184-08-9	CAS-2088184-62-5	CAS-2088185-13-9	CAS-2088185-72-0
CAS-2088184-09-0	CAS-2088184-63-6	CAS-2088185-14-0	CAS-2088185-73-1
CAS-2088184-10-3	CAS-2088184-64-7	CAS-2088185-15-1	CAS-2088185-74-2
CAS-2088184-11-4	CAS-2088184-65-8	CAS-2088185-16-2	CAS-2088185-75-3
CAS-2088184-13-6	CAS-2088184-66-9	CAS-2088185-17-3	CAS-2088185-76-4
CAS-2088184-14-7	CAS-2088184-67-0	CAS-2088185-18-4	CAS-2088185-77-5
CAS-2088184-15-8	CAS-2088184-68-1	CAS-2088185-19-5	CAS-2088185-78-6
CAS-2088184-16-9	CAS-2088184-69-2	CAS-2088185-20-8	CAS-2088185-79-7
CAS-2088184-17-0	CAS-2088184-70-5	CAS-2088185-21-9	CAS-2088185-80-0
CAS-2088184-18-1	CAS-2088184-71-6	CAS-2088185-22-0	CAS-2088185-81-1
CAS-2088184-19-2	CAS-2088184-72-7	CAS-2088185-23-1	CAS-2088185-82-2
CAS-2088184-20-5	CAS-2088184-73-8	CAS-2088185-32-2	CAS-2088185-83-3
CAS-2088184-21-6	CAS-2088184-74-9	CAS-2088185-33-3	CAS-2088185-84-4
CAS-2088184-22-7	CAS-2088184-75-0	CAS-2088185-34-4	CAS-2088185-85-5
CAS-2088184-23-8	CAS-2088184-76-1	CAS-2088185-35-5	CAS-2088185-86-6
CAS-2088184-24-9	CAS-2088184-77-2	CAS-2088185-36-6	CAS-2088185-87-7
CAS-2088184-25-0	CAS-2088184-78-3	CAS-2088185-37-7	CAS-2088185-88-8
CAS-2088184-26-1	CAS-2088184-79-4	CAS-2088185-38-8	CAS-2088185-89-9
CAS-2088184-27-2	CAS-2088184-80-7	CAS-2088185-39-9	CAS-2088185-90-2
CAS-2088184-28-3	CAS-2088184-81-8	CAS-2088185-40-2	CAS-2088185-91-3
CAS-2088184-29-4	CAS-2088184-82-9	CAS-2088185-41-3	CAS-2088185-92-4
CAS-2088184-30-7	CAS-2088184-83-0	CAS-2088185-42-4	CAS-2088185-93-5
CAS-2088184-32-9	CAS-2088184-84-1	CAS-2088185-43-5	CAS-2088185-94-6
CAS-2088184-34-1	CAS-2088184-85-2	CAS-2088185-44-6	CAS-2088185-95-7
CAS-2088184-35-2	CAS-2088184-86-3	CAS-2088185-45-7	CAS-2088185-96-8
CAS-2088184-36-3	CAS-2088184-87-4	CAS-2088185-46-8	CAS-2088185-97-9
CAS-2088184-37-4	CAS-2088184-88-5	CAS-2088185-47-9	CAS-2088185-98-0
CAS-2088184-38-5	CAS-2088184-89-6	CAS-2088185-48-0	CAS-2088185-99-1
CAS-2088184-39-6	CAS-2088184-90-9	CAS-2088185-49-1	CAS-2088186-00-7
CAS-2088184-40-9	CAS-2088184-91-0	CAS-2088185-50-4	CAS-2088186-01-8
CAS-2088184-41-0	CAS-2088184-92-1	CAS-2088185-51-5	CAS-2088186-02-9
CAS-2088184-42-1	CAS-2088184-93-2	CAS-2088185-52-6	CAS-2088185-88-2
CAS-2088184-43-2	CAS-2088184-94-3	CAS-2088185-53-7	CAS-2088185-89-3
CAS-2088184-44-3	CAS-2088184-95-4	CAS-2088185-54-8	CAS-2088185-90-6
CAS-2088184-45-4	CAS-2088184-96-5	CAS-2088185-55-9	CAS-2088185-91-7
CAS-2088184-46-5	CAS-2088184-97-6	CAS-2088185-56-0	CAS-861806-70-4
CAS-2088184-47-6	CAS-2088184-98-7	CAS-2088185-57-1	CAS-1269508-30-6
CAS-2088184-48-7	CAS-2088184-99-8	CAS-2088185-58-2	
CAS-2088184-49-8	CAS-2088185-00-4	CAS-2088185-59-3	
CAS-2088184-50-1	CAS-2088185-01-5	CAS-2088185-60-6	
CAS-2088184-51-2	CAS-2088185-02-6	CAS-2088185-61-7	
CAS-2088184-52-3	CAS-2088185-03-7	CAS-2088185-62-8	
CAS-2088184-53-4	CAS-2088185-04-8	CAS-2088185-63-9	
CAS-2088184-54-5	CAS-2088185-05-9	CAS-2088185-64-0	
CAS-2088184-55-6	CAS-2088185-06-0	CAS-2088185-65-1	

[0403]

[0404]

본 발명의 조성물에서, 바람직하게는 임의의 혼합물 M1, M2, M3, M4, M5, M6, M7, M8, M9, M10, M11, M12, M13, M14, M15, M16, M17, M18, M19, M20, M21, M22, M23, M24, M25, M26, M27, M28, M29, M30, M31, M32, M33, M34, M35, M36, M37, M38, M39, M40, M41, M42, M43, M44, M45, M46, M47, M48, M49, M50, M51, M52, M53, M54, M55, M56, M57, M58, M59, M60, M61, M62, M63, M64, M65, M66, M67, M68, M69, M70, M71, M72, M73, M74, M75, M76, M77, M78, M79, M80, M81, M82, M83, M84, M85, M86, M87, M88, M89, M90, M91, M92, M93, M94, M95, M96, M97, M98, M99, M100,

[0405]

M101, M102, M103, M104, M105, M106, M107, M108, M109, M110, M111, M112, M113, M114, M115, M116, M117, M118, M119, M120, M121, M122, M123, M124, M125, M126, M127, M128, M129, M130, M131, M132, M133, M134, M135, M136, M137, M138, M139, M140, M141, M142, M143, M144, M145, M146, M147, M148, M149, M150, M151, M152, M153, M154, M155, M156, M157, M158, M159, M160, M161, M162, M163, M164, M165, M166, M167, M168, M169, M170, M171, M172, M173, M174, M175, M176, M177, M178, M179, M180, M181, M182, M183, M184, M185, M186, M187, M188, M189, M190, M191, M192, M193, M194, M195, M196, M197, M198, M199, M200,

[0406]

M201, M202, M203, M204, M205, M206, M207, M208, M209, M210, M211, M212, M213, M214, M215, M216, M217, M218, M219, M220, M221, M222, M223, M224, M225, M226, M227, M228, M229, M230, M231, M232, M233, M234, M235, M236, M237, M238, M239, M240, M241, M242, M243, M244, M245, M246, M247, M248, M249, M250, M251,

M252 또는 M253 가 표 6 또는 7 로부터의 화합물과 조합된다.

- [0407] 적어도 하나의 인광 방출체를 포함하는 본 발명의 조성물은 바람직하게는 적외 방출 또는 황색, 오렌지색, 적색, 녹색, 청색 또는 자외 방출 층, 보다 바람직하게는 황색 또는 녹색 방출 층 및 가장 바람직하게는 녹색 방출 층을 형성한다.
- [0408] 여기서 황색 방출층은 540 내지 570 nm 범위 이내에서 광루미네선스 (photoluminescence) 최대치를 갖는 층을 의미하는 것으로 이해된다. 주황색 방출층은 570 내지 600 nm 범위 이내에서 광루미네선스 최대치를 갖는 층을 의미하는 것으로 이해된다. 적색 방출층은 600 내지 750 nm 범위 이내에서 광루미네선스 최대치를 갖는 층을 의미하는 것으로 이해된다. 녹색 방출층은 490 내지 540 nm 범위 이내에서 광루미네선스 최대치를 갖는 층을 의미하는 것으로 이해된다. 청색 방출층은 440 내지 490 nm 범위 이내에서 광루미네선스 최대치를 갖는 층을 의미하는 것으로 이해된다. 층의 광루미네선스 최대치는 여기서 실온에서 층 두께가 50 nm 인 층의 광루미네선스 스펙트럼의 측정에 의해 결정되며, 여기서 상기 층은 본 발명의 조성물을 가지며, 즉 방출체 및 매트릭스를 포함한다.
- [0409] 층의 광루미네선스 스펙트럼은 예를 들어 시판되는 광루미네선스 분광계를 사용하여 기록된다.
- [0410] 선택된 방출체의 광루미네선스 스펙트럼은 일반적으로, 실온에서,  $10^{-5}$  몰 (molar) 의 무산소 용액에서, 측정되며, 선택된 방출체가 언급된 농도로 용해되는 임의의 용매가 적합하다. 특히 적합한 용매는 일반적으로 톨루엔 또는 2-메틸-THF 뿐만 아니라 디클로로메탄이다. 시판되는 광루미네선스 분광계로 측정을 수행한다. 삼중항 에너지  $T_1$  (eV 단위) 는 방출체의 광루미네선스 스펙트럼으로부터 결정된다. 먼저 광루미네선스 스펙트럼의 피크 최대  $Pl_{max}$ . (nm 단위) 를 결정한다. 다음으로, 피크 최대  $Pl_{max}$ . (nm 단위) 는 다음에 의해 eV 로 변환된다:  $E(\text{eV 단위의 } T_1) = 1240 / E(\text{nm 단위의 } T_1) = 1240 / Pl_{max}$ . (nm 단위).
- [0411] 이에 따라서 바람직한 인광 방출체는 바람직하게는 표 5 또는 6 로부터의 적외 방출체이고, 이의 삼중항 에너지  $T_1$  은 바람직하게는 ~ 1.9 eV 내지 ~ 1.0 eV이다.
- [0412] 이에 따라서 바람직한 인광 방출체는 바람직하게는 표 5 또는 6로부터의 적색 방출체이고, 이의 삼중항 에너지  $T_1$  은 바람직하게는 ~ 2.1 eV 내지 ~ 1.9 eV이다.
- [0413] 이에 따라서 바람직한 인광 방출체는 바람직하게는 표 5 또는 6로부터의 황색 방출체이고, 이의 삼중항 에너지  $T_1$  은 바람직하게는 ~ 2.3 eV 내지 ~ 2.1 eV이다.
- [0414] 이에 따라서 바람직한 인광 방출체는 바람직하게는 표 5 또는 6로부터의 녹색 방출체이고, 이의 삼중항 에너지  $T_1$  은 바람직하게는 ~ 2.5 eV 내지 ~ 2.3 eV이다.
- [0415] 이에 따라서 바람직한 인광 방출체는 바람직하게는 표 5 또는 6로부터의 청색 방출체이고, 이의 삼중항 에너지  $T_1$  은 바람직하게는 ~ 3.1 eV 내지 ~ 2.5 eV이다.
- [0416] 이에 따라서 바람직한 인광 방출체는 바람직하게는 표 5 또는 6로부터의 자외 방출체이고, 이의 삼중항 에너지  $T_1$  은 바람직하게는 ~ 4.0 eV 내지 ~ 3.1 eV이다.
- [0417] 이에 따라서, 특히 바람직한 인광 방출체는, 위에 설명된 바와 같이 바람직하게는 표 6 또는 7 으로부터의, 녹색 또는 황색 방출체이다.
- [0418] 이에 따라서 매우 특히 바람직한 인광 방출체는 바람직하게는 표 6 또는 7로부터의 녹색 방출체이고, 이의 삼중항 에너지  $T_1$  은 바람직하게는 ~ 2.5 eV 내지 ~ 2.3 eV이다.
- [0419] 가장 바람직하게는, 위에 설명된 바와 같이 바람직하게는 표 6 또는 7로부터의 녹색 방출체가 본 발명의 조성물 또는 본 발명의 방출 층을 위해 선택된다.
- [0420] 바람직한 형광 방출체는 아릴아민의 부류로부터 선택된다. 아릴아민 또는 방향족 아민은 본 발명의 맥락상 질소에 직접 결합된 3 개의 치환된 또는 비치환된 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템을 함유하는 화합물을 의미하는 것으로 이해된다. 바람직하게는, 이러한 방향족 또는 헤테로방향족 고리 시스템들 중 적어도 하나는, 보다 바람직하게는 적어도 14 개의 방향족 고리 원자를 갖는, 융합 고리 시스템이다. 이들의 바람직한 예는 방향족 안트라센아민, 방향족 안트라센디아민, 방향족 피렌아민, 방향족 피렌디아민, 방향족 크리센아민

또는 방향족 크리센디아민이다. 방향족 안트라센아민은 디아릴아미노 기가, 바람직하게는 9 위치에서, 안트라센 기에 직접 결합되는 화합물을 의미하는 것으로 이해된다. 방향족 안트라센디아민은 2 개의 디아릴아미노 기가, 바람직하게는 9,10 위치에서, 안트라센 기에 직접 결합되는 화합물을 의미하는 것으로 이해된다. 방향족 피렌아민, 피렌디아민, 크리센아민 및 크리센디아민은 유사하게 정의되는데, 여기서 디아릴아미노 기는 바람직하게는 1 위치 또는 1,6 위치에서 피렌에 결합된다. 추가의 바람직한 형광 방출체는 인데노플루오렌아민 또는 -디아민 (예를 들어 WO 2006/108497 또는 WO 2006/122630 에 따름), 벤조인데노플루오렌아민 또는 -디아민 (예를 들어 WO 2008/006449 에 따름), 및 디벤조인데노플루오렌아민 또는 -디아민 (예를 들어 WO 2007/140847 에 따름), 및 WO 2010/012328 에 개시된 융합된 아릴 기를 갖는 인데노플루오렌 유도체이다.

[0421] 본 발명의 더욱 바람직한 실시형태에서, 본 발명의 조성물은 혼합 매트릭스 시스템의 성분으로서 사용된다. 혼합 매트릭스 시스템은 바람직하게는 3 개 또는 4 개의 상이한 매트릭스 재료, 보다 바람직하게는 3 개의 상이한 매트릭스 재료 (즉, 본 발명의 조성물 이외에 하나의 추가 매트릭스 성분) 를 포함한다. 혼합 매트릭스 시스템에서 매트릭스 성분으로서 본 발명의 조성물과 조합하여 사용될 수 있는 적합한 매트릭스 재료의 예는 와이드 밴드 갭 재료, 전자 수송 재료 (ETM) 및 정공 수송 재료 (HTM) 로부터 선택된다.

[0422] 인광 유기 전계 발광 디바이스에서 혼합 매트릭스 시스템을 사용하는 것이 바람직하다. 혼합 매트릭스 시스템에 대한 보다 상세한 정보의 한 소스는 출원 WO 2010/108579 이다. 인광 또는 형광 유기 전계 발광 디바이스에서 혼합 매트릭스 시스템의 매트릭스 성분으로서 본 발명의 조성물과 조합하여 사용될 수 있는 특히 적합한 매트릭스 재료는, 사용되는 방출체 타입에 따라, 인광 방출체에 대해 아래에 명시된 바람직한 매트릭스 재료 또는 형광 방출체에 대해 바람직한 매트릭스 재료로부터 선택된다. 바람직하게, 혼합 매트릭스 시스템은 표 6 또는 7 로부터의 방출체를 위해 최적화된다.

[0423] 보다 바람직하게는 M1 내지 M253 으로부터 선택된 재료의 혼합물을 포함하는, 위에 설명된 바와 같은 본 발명의 조성물 뿐만 아니라, 바람직하게는 형광 방출체를 위한 추가의 호스트 재료로서 다양한 물질 부류가 유용하다. 바람직한 추가 호스트 재료는 올리고아릴렌의 부류 (예를 들어 EP 676461 에 따른 2,2',7,7'-테트라페닐스피로바이플루오렌 또는 디나프틸안트라센), 특히 융합 방향족 기를 함유하는 올리고아릴렌의 부류, 올리고아릴렌 비닐렌 (예를 들어 EP 676461 에 따른 DPVBi 또는 스피로-DPVBi), 폴리포달 (polypodal) 금속 착물 (예를 들어 WO 2004/081017 에 따름), 정공 전도 화합물 (예를 들어 WO 2004/058911 에 따름), 전자 전도 화합물, 특히 케톤, 포스핀 옥사이드, 술폰사이드, 등 (예를 들어 WO 2005/084081 및 WO 2005/084082 에 따름), 아트로프이성질체 (예를 들어 WO 2006/048268 에 따름), 보론산 유도체 (예를 들어 WO 2006/117052 에 따름) 또는 벤즈안트라센 (예를 들어 WO 2008/145239 에 따름) 으로부터 선택된다. 특히 바람직한 호스트 재료는 나프탈렌, 안트라센, 벤즈안트라센 및/또는 피렌 또는 이들 화합물의 아트로프 이성질체를 포함하는 올리고아릴렌, 올리고아릴렌비닐렌, 케톤, 포스핀 옥사이드 및 술폰사이드의 부류에서 선택된다. 매우 특히 바람직한 매트릭스 재료는 안트라센, 벤즈안트라센, 벤조페난트렌 및/또는 피렌 또는 이들 화합물의 아트로프이성질체를 포함하는 올리고아릴렌의 부류로부터 선택된다. 본 발명의 맥락상 올리고아릴렌은 적어도 3 개의 아릴 또는 아릴렌 기가 서로 결합되는 화합물을 의미하는 것으로 이해될 것이다.

[0424] 보다 바람직하게는 M1 내지 M253 로부터 선택된 재료의 혼합물을 포함하는, 위에 설명된 바와 같은 본 발명의 조성물뿐만 아니라, 바람직하게는 인광 방출체를 위한, 추가의 호스트 재료로서 다양한 물질 부류가 유용하다. 바람직한 추가 매트릭스 재료는 예를 들어 US 2005/0069729 에 따른 방향족 아민의 부류, 특히 트리아릴아민, 카르바졸 유도체 (예를 들어, CBP, N,N-비스카르바졸릴바이페닐) 또는 WO 2005/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527 또는 WO 2008/086851 에 따른 화합물, 브릿지된 카르바졸 유도체 (예를 들어 WO 2011/088877 및 WO 2011/128017 에 따름), 인데노카르바졸 유도체 (예를 들어 WO 2010/136109 및 WO 2011/000455 에 따름), 아자카르바졸 유도체 (예를 들어 EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160 에 따름), 인돌로카르바졸 유도체 (예를 들어 WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따름), 케톤 (예를 들어 WO 2004/093207 또는 WO 2010/006680 에 따름), 포스핀 옥사이드, 술폰사이드 및 술폰 (예를 들어 WO 2005/003253 에 따름), 올리고페닐렌, 쌍극성 매트릭스 재료 (예를 들어 WO 2007/137725 에 따름), 실란 (예를 들어 WO 2005/111172 에 따름), 아자보롤 또는 보론 에스테르 (예를 들어 WO 2006/117052 에 따름), 트리아진 유도체 (예를 들어 WO 2010/015306, WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따름), 아연 착물 (예를 들어 EP 652273 또는 WO 2009/062578 에 따름), 알루미늄 착물, 예를 들어, BA1q, 디아자실롤 유도체 및 테트라아자실롤 유도체 (예를 들어 WO 2010/054729 에 따름), 디아자포스폴 유도체 (예를 들어 WO 2010/054730 에 따름), 및 알루미늄 착물, 예를 들어, BA1Q 이다.

[0425] 본 발명의 대안의 실시형태에서, 조성물은, 전자 수송 호스트 및 정공 수송 호스트의 구성 성분 이외에, 임의의

추가 구성 성분, 즉 임의의 기능성 재료를 함유하지 않는다. 이 실시형태는 유기 층의 제조를 위해 그것으로서 사용되는 재료 혼합물에 관한 것이다. 이들 시스템은 또한, 증착에서 단독 재료 소스로서 사용되는 프리믹스 시스템으로도 알려져 있다. 이러한 방식으로, 다수의 재료 소스의 정확한 작동의 필요 없이도 성분의 균일한 분포를 갖는 층의 증착을 간단하고 신속한 방식으로 달성할 수 있다.

- [0426] 따라서 본 발명은 또한 식 (1), (1a) 내지 (1k) 의 화합물 또는 1 내지 11 로부터 선택된 화합물 및 식 (2), (2a) 내지 (2i) 의 화합물 또는 12 내지 34 로부터 선택된 화합물로 이루어지는 조성물을 제공한다.
- [0427] 위에 설명된 또는 바람직한 것으로 설명된, 본 발명의 조성물은, 유기 전자 디바이스에서 사용하기에 적합하다. 여기서 유기 전자 디바이스는 적어도 하나의 유기 화합물을 함유하는 적어도 하나의 층을 함유하는 디바이스를 의미하는 것으로 이해된다. 그러나, 디바이스는 또한 무기 재료 또는 그렇지 않으면 전적으로 무기 재료로부터 형성된 층을 포함할 수 있다.
- [0428] 따라서, 본 발명은 또한 유기 전자 디바이스에서의, 위에 설명된 또는 바람직한 것으로 설명된 조성물, 특히 M1 내지 M253 로부터 선택된 혼합물의 용도를 제공한다.
- [0429] 조성물의 성분 또는 구성 성분은 증착에 의해 또는 용액으로부터 프로세싱될 수 있다. 조성물이 용액으로부터 도포되는 경우, 적어도 하나의 추가 용매를 포함하는 본 발명의 조성물의 포블레이션이 필요하다. 이러한 포블레이션은 예를 들어 용액, 분산액 또는 유화액일 수 있다. 이러한 목적을 위해, 둘 이상의 용매의 혼합물을 사용하는 것이 바람직할 수 있다.
- [0430] 따라서, 본 발명은 또한 본 발명의 조성물 및 적어도 하나의 용매를 포함하는 포블레이션을 제공한다.
- [0431] 적합하고 바람직한 용매는 예를 들어, 톨루엔, 아니솔, o-, m- 또는 p-자일렌, 메틸 벤조에이트, 메시틸렌, 테트라린, 베라트롤, THF, 메틸-THF, THP, 클로로벤젠, 디옥산, 페녹시톨루엔, 특히 3-페녹시톨루엔, (-)-벤존, 1,2,3,5-테트라메틸벤젠, 1,2,4,5-테트라메틸벤젠, 1-메틸나프탈렌, 2-메틸벤조티아졸, 2-페녹시에탄올, 2-피롤리디논, 3-메틸아니솔, 4-메틸아니솔, 3,4-디메틸아니솔, 3,5-디메틸아니솔, 아세토페논, α-테르피네올, 벤조티아졸, 부틸 벤조에이트, 쿠멘, 시클로헥산올, 시클로헥산논, 시클로헥실벤젠, 데칼린, 도데실벤젠, 에틸 벤조에이트, 인단, 메틸 벤조에이트, NMP, p-시멘, 페넬, 1,4-다이소프로필벤젠, 디벤질 에테르, 디에틸렌 글리콜 부틸 메틸 에테르, 트리에틸렌 글리콜 부틸 메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디부틸 에테르, 트리에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르, 트리프로필렌 글리콜 디메틸 에테르, 테트라에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 2-이소프로필나프탈렌, 펜틸벤젠, 헥실벤젠, 헵틸벤젠, 옥틸벤젠, 1,1-비스(3,4-디메틸페닐)에탄, 헥사메틸인단 또는 이들 용매의 혼합물이다.
- [0432] 포블레이션은 또한, 전자 디바이스에서 마찬가지로 사용되는 적어도 하나의 추가 유기 또는 무기 화합물, 특히 방출 화합물, 특히 인광 방출체 및/또는 추가 매트릭스 재료를 포함할 수도 있다. 적합한 방출 화합물 및 추가의 매트릭스 재료는 위에서 이미 상세히 설명되었다.
- [0433] 본 발명은 또한 유기 전자 디바이스, 바람직하게는 전자 수송 층 및/또는 방출 층에서의 본 발명의 조성물의 용도를 제공한다.
- [0434] 유기 전자 디바이스는 바람직하게는 유기 집적 회로 (OIC), 유기 전계-효과 트랜지스터 (OFET), 유기 박막 트랜지스터 (OTFT), 유기 전계 발광 디바이스, 유기 태양 전지 (OSC), 유기 광학 검출기 및 유기 광수용체로부터 선택되고, 특히 유기 전계 발광 디바이스가 바람직하다.
- [0435] 본 발명의 조성물의 사용을 위한 매우 특히 바람직한 유기 전계 발광 디바이스는 유기 발광 트랜지스터 (OLET), 유기 전계 켄치 디바이스 (OFQD), 유기 발광 전기 화학 전지 (OLEC, LEC, LEEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 및 유기 발광 다이오드 (OLED) 이고; 특히 바람직하게는 OLEC 및 OLED 이고, 가장 바람직하게는 OLED 이다.
- [0436] 바람직하게는, 위에 설명된 또는 바람직한 것으로 설명된 본 발명의 조성물은 전자 디바이스에서 전자-수송 기능을 갖는 층에 사용된다. 층은 바람직하게는 전자 주입층 (EIL), 전자 수송층 (ETL), 정공 차단층 (HBL) 및/또는 방출층 (EML), 보다 바람직하게는 ETL, EIL 및/또는 EML이다. 가장 바람직하게는, 본 발명의 조성물은 EML 에서, 특히 매트릭스 재료로서 사용된다.
- [0437] 따라서, 본 발명은 더욱 또한 특히 위에 언급된 전자 디바이스 중 하나로부터 선택되고, 위에 설명된 또는 바람직한 것으로 설명된 본 발명의 조성물을 바람직하게 방출층 (EML), 전자 수송층 (ETL), 전자 주입층 (EIL) 및/또는 정공 차단층 (HBL), 매우 바람직하게는 EML, EIL 및/또는 ETL 에, 그리고 가장 바람직하게는 EML에 포함하

는 유기 전자 디바이스를 제공한다.

- [0438] 층이 방출층인 경우, 이는, 위에 설명된 또는 바람직한 것으로 설명된 조성물 이외에, 특히 표 6 또는 7로부터의 방출체 또는 위에 설명된 바람직한 방출체와 함께, 인광 방출체를 포함하는 것을 특징으로 하는 인광 층이 특히 바람직하다.
- [0439] 따라서, 본 발명의 특히 바람직한 실시 형태에서, 전자 디바이스는 유기 전계 발광 디바이스, 가장 바람직하게는 유기 발광 다이오드 (OLED) 로서, 방출 층 (EML) 에서 인광 방출체와 함께, 위에 설명되거나 또는 바람직한 것으로 설명된 바와 같은 본 발명에 따른 조성물을 함유한다.
- [0440] 바람직한 실시형태에서 본 발명의 그리고 방출 화합물의 조성은 방출체 및 매트릭스 재료의 전체 조성을 기준으로, 바람직한 실시형태에 따라 식 (1) 의 적어도 하나의 화합물 및 식 (2) 의 적어도 하나의 화합물로 구성되는 매트릭스 재료를 바람직하게는 99.9부피% 내지 1부피%, 더욱 바람직하게는 99부피% 내지 10부피%, 특히 바람직하게는 98부피% 내지 60부피%, 아주 특히 바람직하게는 97부피% 내지 80부피% 로 함유한다. 대응하여, 조성물은 방출체 및 매트릭스 재료의 전체 조성을 기준으로, 바람직하게는 0.1 부피% 내지 99 부피%, 더 바람직하게는 1 부피% 내지 90 부피%, 보다 바람직하게는 2 부피% 내지 40 부피%, 가장 바람직하게는 3 부피% 내지 20 부피% 의 방출체를 함유한다. 화합물이 용액으로부터 프로세싱되는 경우, 위에 명시된 부피% 단위의 양 대신에 대응하는 중량% 단위의 양을 사용하는 것이 바람직하다.
- [0441] 캐소드, 애노드 및 본 발명의 조성물을 포함하는 층 이외에, 전자 디바이스는 추가 층을 포함할 수도 있다. 이들은 예를 들어, 각 경우에 하나 이상의 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 차단층, 방출층, 전자 수송층, 전자 주입층, 전자 차단층, 여기자 차단층, 중간층, 전하 생성층 (IDMC 2003, Taiwan; Session 21 OLED (5), T. Matsumoto, T. Nakada, J. Endo, K. Mori, N. Kawamura, A. Yokoi, J. Kido, *Multiphoton Organic EL Device Having Charge Generation Layer*) 및/또는 유기 또는 무기 p/n 접합에서 선택된다. 그러나, 이러한 층들 중 모든 층이 반드시 존재할 필요는 없다는 것에 주목해야 한다.
- [0442] 유기 전계 발광 디바이스에서 층의 순서는 바람직하게는 하기와 같다:
- [0443] 애노드 / 정공 주입층 / 정공 수송층 / 방출층 / 전자 수송층 / 전자 주입층 / 캐소드.
- [0444] 이 층 순서가 바람직한 순서이다.
- [0445] 동시에, 언급된 층 모두가 존재할 필요는 없다는 것 및/또는 추가 층이 또한 존재할 수도 있다는 것에 다시 주목해야 한다.
- [0446] 본 발명의 조성물을 포함하는 유기 전계 발광 디바이스는 다중 방출 층을 포함할 수 있다. 더욱 바람직하게는, 이들 방출층은 이 경우 전체적으로 380 nm 내지 750 nm 사이에서 여러 방출 최대치를 가져 전체 결과가 백색 방출이 되게 하고; 다른 말로는, 형광 또는 인광을 발할 수 있고 청색 또는 황색 또는 오렌지색 또는 적색 광을 방출하는 다양한 방출 화합물이 방출층에 사용된다. 특히 바람직한 것은 3층 시스템, 즉, 3개의 방출 층을 갖는 시스템으로, 여기서 3층은 청색, 녹색 및 오렌지색 또는 적색 방출을 나타낸다 (기본 구조에 대해서는, 예를 들어, WO 2005/011013 을 참고). 백색광의 생성을 위해, 넓은 파장 범위에서 방출하는 개별적으로 사용되는 방출체 화합물이, 색을 방출하는 복수의 방출체 화합물 대신에 또한 적합할 수 있다는 것을 유의해야 한다.
- [0447] 본 발명의 유기 전계 발광 디바이스의 정공 주입 또는 정공 수송 층 또는 전자 차단층에서 또는 전자 수송층에서 이용될 수 있는 적합한 전하 수송 재료는, 예를 들어 Y. Shirota 등의, Chem. Rev. 2007, 107(4), 953-1010 에 개시되어 있는 화합물, 또는 종래 기술에 따라 이들 층에서 사용되는 다른 재료이다.
- [0448] 전자 수송층에 사용되는 재료는 전자 수송층에서 전자 수송 재료로서 종래 기술에 따라 사용되는 임의의 재료일 수도 있다. 특히 적합한 것은 알루미늄 착물, 예를 들어 Alq<sub>3</sub>, 지르코늄 착물, 예를 들어 Zrq<sub>4</sub>, 벤즈이미다졸 유도체, 트리아진 유도체, 피리미딘 유도체, 피리딘 유도체, 피라진 유도체, 퀴놀살린 유도체, 퀴놀린 유도체, 옥사디아졸 유도체, 방향족 케톤, 락탐, 보란, 디아자포스폴 유도체 및 포스핀 옥사이드 유도체이다. 추가의 적합한 재료는 JP 2000/053957, WO 2003/060956, WO 2004/028217, WO 2004/080975 및 WO 2010/072300 에 개시된 바와 같은 위에 언급된 화합물의 유도체이다.
- [0449] 바람직한 정공 수송 재료는 특히 정공 수송, 정공 주입 또는 전자 차단 층에 사용될 수 있는 재료이며, 예컨대 인데노플루오렌아민 유도체 (예를 들어, WO 06/122630 또는 WO 06/100896 에 따름), EP 1661888 에 개시되어

있는 아민 유도체, 헥사아자트리페닐렌 유도체 (예를 들어, WO 01/049806 에 따름), 융합 방향족 시스템을 갖는 아민 유도체 (예를 들어, US 5,061,569 에 따름), WO 95/09147 에 개시되어 있는 아민 유도체, 모노벤조인테노플루오렌아민 (예를 들어, WO 08/006449 에 따름), 디벤조인테노플루오렌아민 (예를 들어, WO 07/140847 에 따름), 스피로바이플루오렌아민 (예를 들어, WO 2012/034627 또는 아직 미공개되었던 EP 12000929.5 에 따름), 플루오렌아민 (예를 들어, WO 2014/015937, WO 2014/015938 및 WO 2014/015935 에 따름), 스피로디벤조피란아민 (예를 들어, WO 2013/083216 에 따름) 및 디히드로아크리딘 유도체 (예를 들어, WO 2012/150001 에 따름) 이다.

[0450] 전자 디바이스의 바람직한 캐소드는 낮은 일함수를 갖는 금속, 다양한 금속, 예를 들어 알칼리 토금속, 알칼리 금속, 주족 금속 또는 란타노이드 (예를 들어, Ca, Ba, Mg, Al, In, Mg, Yb, Sm 등) 로 구성되는 금속 합금 또는 다층 구조이다. 추가적으로, 알칼리 금속 또는 알칼리 토금속 및 은으로 구성된 합금, 예를 들어 마그네슘 및 은으로 구성된 합금이 적합하다. 다층 구조의 경우, 언급된 금속 이외에, 비교적 높은 일 함수를 갖는 추가의 금속, 예를 들어 Ag 또는 Al 을 사용하는 것이 또한 가능하고, 이 경우 예를 들어 Ca/Ag, Mg/Ag 또는 Ba/Ag 와 같은 금속의 조합이 일반적으로 사용된다. 또한 금속 캐소드와 유기 반도체 사이에 높은 유전 상수를 갖는 재료의 얇은 중간층을 도입하는 것이 바람직할 수 있다. 이러한 목적을 위해 유용한 재료의 예는 알칼리 금속 또는 알칼리 토금속 플루오라이드 뿐만 아니라 대응하는 산화물 또는 카보네이트 (예를 들어, LiF, Li<sub>2</sub>O, BaF<sub>2</sub>, mgO, NaF, CsF, Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 등) 이다. 또한 이 목적을 위해 리튬 퀴놀리네이트 (LiQ) 를 사용하는 것이 가능하다. 이러한 층의 층 두께는 바람직하게는 0.5 내지 5 nm 이다.

[0451] 바람직한 애노드는 높은 일함수를 갖는 재료이다. 바람직하게, 애노드는 진공에 대하여 4.5 eV 초과의 일함수를 갖는다. 첫째, 산화환원 전위가 높은 금속, 예를 들어 Ag, Pt 또는 Au 가 이 목적에 적합하다. 둘째, 금속/금속 산화물 전극들 (예를 들면, Al/Ni/NiO<sub>x</sub>, Al/PtO<sub>x</sub>) 이 또한 바람직할 수도 있다. 일부 응용의 경우, 전극 중 적어도 하나가, 유기 재료의 조사 (유기 태양 전지) 또는 광의 방출 (OLED, O-레이저) 중 어느 일방을 가능하게 하기 위해 투명하거나 또는 부분적으로 투명해야 한다. 여기서, 바람직한 애노드 재료는 전도성 혼합 금속 산화물이다. ITO (indium tin oxide) 또는 IZO (indium zinc oxide) 가 특히 바람직하다. 또한, 전도성 도핑된 유기 재료, 특히 전도성 도핑된 폴리머가 바람직하다. 추가적으로, 애노드는 또한 둘 이상의 층, 예를 들어 ITO 의 내부층 및 금속 산화물, 바람직하게는 텅스텐 산화물, 몰리브덴 산화물 또는 바나듐 산화물의 외부층으로 이루어질 수도 있다.

[0452] 제조 과정 중에 유기 전자 디바이스는, 물 및/또는 공기의 존재 하에서 본 발명의 디바이스의 수명이 단축되기 때문에, 적절하게 (응용에 따라) 구조화되고, 점점-접속되고, 최종적으로 밀봉된다.

[0453] 추가의 바람직한 실시형태에서, 본 발명의 조성물을 포함하는 유기 전자 디바이스는 본 발명의 조성물을 포함하는 하나 이상의 유기 층이 승화 방법에 의해 코팅되는 것을 특징으로 한다. 이 경우, 재료는 10<sup>-5</sup> mbar 미만, 바람직하게는 10<sup>-6</sup> mbar 미만의 초기 압력에서 진공 승화 시스템에서 기상 증착에 의해 적용된다. 그러나, 이 경우, 초기 압력이 훨씬 더 낮은, 예를 들어 10<sup>-7</sup> mbar 미만인 것도 가능하다.

[0454] 마찬가지로, 하나 이상의 층이 OVPD (organic vapor phase deposition) 방법에 의해 또는 캐리어 기체 승화의 도움으로 코팅되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 디바이스가 바람직하다. 이러한 경우, 재료들은 10<sup>-5</sup> mbar 내지 1 bar 사이의 압력에서 적용된다. 이러한 방법의 특별한 경우는 OVJP (organic vapor jet printing) 법으로, 여기서 재료는 노즐에 의해 직접 도포되고 이에 따라 구조화된다 (예를 들어, M. S. Arnold 등의, Appl. Phys. Lett. 2008, 92, 053301).

[0455] 또한, 본 발명의 조성물을 포함하는 하나 이상의 유기 층이 예를 들어, 스핀 코팅에 의해서, 또는 임의의 프린팅 방법, 예를 들어, 스크린 프린팅, 플렉소그래픽 프린팅, 노즐 프린팅 또는 오프셋 프린팅, 그러나 보다 바람직하게는 LITI (광 유도 열 이미징, 열 전사 프린팅) 또는 잉크젯 프린팅에 의해서 용액으로부터 제조되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 디바이스가 바람직하다. 이를 위해, 본 발명의 조성물의 성분들의 가용성 화합물이 필요하다. 높은 용해도는 대응하는 화합물의 적합한 치환에 의해 달성될 수 있다. 용액으로부터의 프로세싱은 본 발명의 조성물을 포함하는 층이 매우 간단하고 저가의 방식으로 적용될 수 있다는 이점을 갖는다. 이 기술은 특히 유기 전자 디바이스의 대량 생산에 적합하다.

[0456] 또한, 예를 들어, 하나 이상의 층이 용액으로부터 도포되고 하나 이상의 추가 층이 기상 증착에 의해 적용되는 혼성 방법이 가능하다.

- [0457] 이들 방법은 일반적으로 당업자에게 공지되어 있으며, 유기 전계 발광 디바이스에 적용될 수 있다.
- [0458] 따라서 본 발명은 위에 설명된 또는 바람직한 것으로 설명된 본 발명의 조성물을 포함하는 유기 전자 디바이스를 제조하는 방법을 제공하며, 본 발명의 조성물을 포함하는 적어도 하나의 유기 층이 기상 증착에 의해, 특히 승화 방법에 의해 및/또는 OVPD (유기 기상 증착) 방법에 의해 또는 담체 기체 승화의 도움으로, 또는 용액으로부터, 특히 스핀 코팅에 의해 또는 프린팅 방법에 의해 적용되는 것을 특징으로 한다.
- [0459] 기상 증착에 의한 유기 전자 디바이스의 제조에서, 본 발명의 조성물을 포함하고 다수의 상이한 구성 성분을 포함할 수도 있는 유기 층이 임의의 기관에 적용될 수 있거나 또는 기상 증착에 의해 적용될 수 있는 두 가지 방법이 원칙적으로 존재한다. 첫째로, 사용되는 재료는 각각 재료 소스에 초기에 투입되고 궁극적으로 상이한 재료 소스 ("공-증발") 으로부터 증발될 수 있다. 둘째로, 다양한 재료가 사전 혼합될 수 있고, 혼합물은 궁극적으로 증발되는 단일 재료 소스에서 초기에 투입될 수 있다 ("프리믹스 증발"). 이러한 방식으로, 다수의 재료 소스의 정확한 작동의 필요 없이도 성분의 균일한 분포를 갖는 층의 증착을 간단하고 신속한 방식으로 달성할 수 있다.
- [0460] 따라서, 본 발명은 또한 위에 설명된 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (1) 의 적어도 하나의 화합물 및 위에 설명된 또는 바람직한 것으로 설명된 식 (2) 의 적어도 하나의 화합물이, 위에 설명된 또는 바람직한 것으로 설명된 다른 재료와 선택적으로, 적어도 2 개의 재료 소스로부터 연속적으로 또는 동시에 기상으로부터 증착되어 유기 층을 형성하는 것을 특징으로 하는 방법을 제공한다.
- [0461] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, 적어도 하나의 유기 층은 기상 증착에 의해 적용되고, 여기서 조성물의 구성 성분은 사전 혼합되고 단일 재료 소스로부터 증발된다.
- [0462] 따라서, 본 발명은 또한, 위에 설명된 또는 바람직한 것으로 설명된 본 발명의 조성물이 호스트 시스템의 기상 증착을 위한 재료 소스로서 이용되고 선택적으로 추가 재료와 함께 유기 층을 형성하는 것을 특징으로 하는 방법을 제공한다.
- [0463] 본 발명은 또한 위에 설명된 또는 바람직한 것으로 설명된 본 발명의 조성물을 포함하는 유기 전자 디바이스의 제조 방법에 관한 것으로, 위에 설명된 본 발명의 포물레이션은 유기 층을 적용하기 위해 사용되는 것을 특징으로 한다.
- [0464] 본 발명의 조성물 및 본 발명의 디바이스는 종래 기술에 비해 하기의 놀라운 이점을 갖는다:
- [0465] 유기 전자 디바이스에서, 특히 유기 전계 발광 디바이스에서, 그리고 특히 OLED 또는 OLEC 에서 본 발명의 조성물의 사용은 디바이스의 수명을 뚜렷하게 증가시킨다.
- [0466] 유기 전자 디바이스에서, 특히 유기 전계 발광 디바이스에서, 그리고 특히 OLED 또는 OLEC 에서 본 발명의 조성물의 사용은 마찬가지로 디바이스의 효율 및/또는 작동 전압을 뚜렷하게 증가시킨다.
- [0467] 아래에 제시된 예 1에서 명백한 바와 같이, 종래 기술 화합물, 예를 들어, 화합물 SoA1의 사용을 통해, 12 % 의 EML에서의 낮은 방출체 농도에서 우수한 전압 및 효율을 달성할 수 있다. 그러나, 성분의 수명이 짧다.
- [0468] 10 % 내지 40 %, 예를 들어 표 10 의 예로부터의 대표적인 수치로서 12 % 내지 37 %의 수명 개선과, 비슷한 작동 전압 증가 및 비슷하거나 또는 개선된 전류 효율이 본 발명의 위에 설명된 바와 같은 식 (1) 의 화합물과 위에 설명된 바와 같은 식 (2) 의 화합물의 조합에 의해 달성될 수 있다.
- [0469] 이러한 수명의 개선과 비슷한 작동 전압 및 비슷하거나 개선된 전류 효율은 방출층에서의 2 중량% 내지 15 중량% 방출체 농도에서, 본 발명의 위에서 설명된 식 (1) 의 화합물과 위에서 설명된 식 (2) 의 화합물의 조합 덕분에 바람직하게 달성될 수 있다.
- [0470] 비교 예와의 차이는, 표 9에 나타낸 바처럼, 비교 화합물 SoA1 로부터 화합물 1 및 6 의 전자 수송 호스트의 전자 구조에 있다.
- [0471] 당업자에게 예견될 수 없는 방식으로, 직접 또는 링커를 통해 디벤조푸란/디벤조티오펜에 결합된 스피로바이폴루오레닐에 대한 카르바졸의 교환은 약 10 % 내지 40 %의 전자 디바이스, 특히 OLED 의 수명 향상을 낳는다.
- [0472] 당업자에게 예견될 수 없는 방식으로, 디벤조푸란 또는 디벤조티오펜의 위치 1 및 8 에서의 링크는 디벤조푸란 또는 디벤조티오펜의 위치 4 또는 6에서의 링크와 비교하여 전자 디바이스의 수명 향상을 낳는다.
- [0473] 본 발명의 조성물은, 방출 층에 사용하기에 아주 양호하게 적합하고, 위에 설명된 바와 같은 종래 기술로부터의

화합물에 비해, 특히 수명, 작동 전압 및/또는 전류 효율과 관련하여, 향상된 성능 데이터를 나타낸다.

- [0474] 본 발명의 조성물은 용이하게 프로세싱될 수 있으며, 따라서 상업적 용도의 대량 생산에 매우 적합하다.
- [0475] 본 발명의 조성물은 단일 재료 소스로부터 사전 혼합 및 증착될 수 있으므로, 사용되는 성분의 균일한 분포를 갖는 유기 층을 간단하고 신속한 방식으로 제조할 수 있다.
- [0476] 이들 위에서 언급된 이점들은 전자 디바이스의 추가 전자 특성의 열화를 수반하지 않는다.
- [0477] 본 발명에 설명된 실시형태들의 변형들은 본 발명의 범위에 의해 커버된다는 것에 주목해야 한다. 본 발명에서 개시된 임의의 특징은, 이것이 명시적으로 배제되지 않는 한, 동일한 목적 또는 동등하거나 유사한 목적에 알맞은 대안의 특징과 교환될 수도 있다. 따라서 본 발명에서 개시된 임의의 특징은, 다르게 언급되지 않는 한, 일반 시리즈로부터의 예로서 또는 동등하거나 유사한 특징으로서 고려되어야 한다.
- [0478] 본 발명의 모든 특징들은, 특성의 특징 및/또는 단계가 상호 배타적이지 않는 한, 임의의 방식으로 서로 조합될 수도 있다. 이것은 특히 본 발명의 바람직한 특징들에 해당된다. 동일하게, 비본질적인 조합들의 특징들은 (조합이 아니라) 따로 사용될 수도 있다.
- [0479] 본 발명에 개시된 기술적 교시는 추출될 수도 있고 다른 실시예들과 조합될 수도 있다.
- [0480] 본 발명은 하기 예에 의해 보다 상세히 예시되지만, 이로써 본 발명을 제한하고자 하는 의도는 없다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

- [0481] 일반적 방법:
- [0482] **오비탈 에너지 및 전자적 상태의 결정**
- [0483] 재료의 HOMO 및 LUMO 에너지 및 삼중항 준위 및 단일항 준위는 양자-화학 계산을 통해 결정된다. 이러한 목적으로, 본 발명의 경우에, "Gaussian09, Revision D.01" 소프트웨어 패키지 (Gaussian Inc.) 가 사용된다. 금속 없는 유기 물질의 계산을 위해 ("org." 방법으로 지칭됨), 기하학적 최적화를 반-실험적 방법 AM1 (Gaussian input line "#AM1 opt") 에 의해, 전하 0 및 다중도 1 로 먼저 수행한다. 후속하여, 최적화된 지오메트리를 기초로 하여, (단일점) 에너지 계산을 전자 바닥 상태 및 삼중항 준위에 대해 시행한다. 이는 6-31G(d) 기초 세트 (가우시안 입력 라인 "# B3PW91/6-31G(d) td=(50- 50,nstates=4)") (전하 0, 다중도 1) 로 TDDFT (time dependent density functional theory) 방법 B3PW91 를 이용하여 수행한다. 유기금속 화합물 ("M-org." 방법이라고 함) 의 경우, Hartree-Fock 방법과 LanL2MB 베이스 세트 (가우스 입력 라인 "# HF/LanL2MB opt") (전하 0, 다중도 1) 에 의해 지오메트리가 최적화된다. 에너지 계산은, 전술된 바처럼, "LanL2DZ" 베이스 세트가 금속 원자를 위해 사용되고 "6-31G(d)" 베이스 세트가 리간드들을 위해 사용되는 것 (가우스 입력 라인 "#B3PW91/gen pseudo=lanl2 td=(50-50,nstates=4)") 을 제외하고는, 유기 물질들에 대한 것과 유사하게 수행된다. 에너지 계산으로부터, HOMO 는 두 개의 전자에 의해 점유되는 마지막 오비탈 (알파 occ. 고유치) 로서 수득되고 LUMO 는 첫번째 비점유 오비탈 (알파 virt. 고유치) 로서 Hartree 단위로 수득되며, 여기서 HEh 및 LEh 는 각각 HOMO 에너지 (Hartree 단위) 및 LUMO 에너지 (Hartree 단위) 를 나타낸다. 이것은 다음과 같이 순환 전압 전류 측정 (cyclic voltammetry measurement) 에 의해 교정된 전자 볼트 단위 HOMO 및 LUMO 값을 결정하는 데 사용된다.
- [0484]  $HOMO (eV) = (HEh * 27.212) * 0.8308 - 1.118;$
- [0485]  $LUMO (eV) = (LEh * 27.212) * 1.0658 - 0.5049.$
- [0486] 재료의 삼중항 준위 T1 는 양자 화학적 에너지 계산에 의해 구해진 최저 에너지를 갖는 삼중항 상태의 상대적 여기 에너지 (eV 단위) 로 정의된다.
- [0487] 재료의 단일항 준위 S1 는 양자 화학적 에너지 계산에 의해 구해진 제 2 최저 에너지를 갖는 단일항 상태의 상대적 여기 에너지 (eV 단위) 로 정의된다.
- [0488] 에너지적으로 최저의 단일항 상태는 S0 로 지칭된다.
- [0489] 본원에 기재된 방법은 사용된 소프트웨어 패키지와 독립적이며 항상 동일한 결과를 제공한다. 이러한 목적으로 빈번하게 이용된 프로그램의 예는 "Gaussian09" (Gaussian Inc.) 및 Q-Chem 4.1 (Q-Chem, Inc.) 이다. 본 경우, 에너지는 소프트웨어 패키지 "Gaussian09, Revision D.01" 을 이용해 계산된다.

- [0490] 예 1: **OLED**의 제조
- [0491] 이하의 예 C1 내지 I10 (표 8 참조)는 OLED에서의 본 발명의 재료 조합의 사용을 제시한다.
- [0492] **예 C1 내지 I10를 위한 전처리:** 두께 50nm의 구조화된 ITO (indium tin oxide)로 코팅된 유리 플라크를 먼저 산소 플라즈마로, 다음으로 아르곤 플라즈마로, 코팅 전에, 처리한다. 이들 플라즈마 처리 유리 플라크는, OLED가 적용되는 기판을 형성한다.
- [0493] OLED는 기본적으로 하기의 층 구조를 갖는다: 기판/정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/전자 차단층(EBL)/방출층(EML)/선택적 정공 차단층(HBL)/전자 수송층(ETL)/선택적 전자 주입층(EIL) 및 마지막으로 캐소드. 캐소드는 두께 100 nm의 알루미늄 층에 의해 형성된다. OLED의 정확한 구조는 표 8에서 찾아볼 수 있다. OLED의 제조에 필요한 재료를 표 9에 나타낸다. OLED들의 데이터가 표 10에 열거되어 있다. 예 C1-C8는 종래 기술에 따른 비교예이고; 예 I1 내지 I10은 본 발명의 OLED의 데이터를 제시한다.
- [0494] 모든 재료는 진공 챔버에서 열 기상 증착에 의해 적용된다. 이러한 경우, 방출층은 항상, 본 발명의 목적을 위한, 적어도 하나의 매트릭스 재료(호스트 재료), 적어도 2개의 매트릭스 재료, 및 공-증발에 의해 특정 부피 비율로 매트릭스 재료(들)에 첨가되는 방출 도펀트(방출체)로 이루어진다. SoA1:CoH1:TEG1 (45%:45%:10%)과 같은 그러한 형태로 주어진 세부사항은, 여기서 재료 SoA1가 층에서 45%의 부피 비율로 존재하고 CoH1이 45%의 부피 비율로, 그리고 TEG1가 10%의 부피 비율로 존재한다는 것을 의미한다. 유사하게, 전자 수송 층은 또한 2개의 재료들의 혼합물로 이루어질 수도 있다.
- [0495] OLED는 표준 방식으로 특성화된다. 이 목적을 위하여, 전계 발광 스펙트럼 및 람버트 방출 특성(Lambertian emission characteristic)을 가정하는 전류-전압-루미넌스 특성으로부터 산출된, 루미넌스의 합수로서의 전류 효율(CE, cd/A 단위로 측정됨), 및 수명이 측정된다. 전계 발광 스펙트럼을 10 mA/cm<sup>2</sup>의 전류 밀도에서 결정하고, CIE 1931 x 및 y 색 좌표를 이로부터 산출하였다. 표 10에서의 파라미터 U10은 10 mA/cm<sup>2</sup>의 전류 밀도에 필요한 전압을 나타낸다. CE10은 10 mA/cm<sup>2</sup>의 전류 밀도에서 얻어진 전류 효율을 나타낸다.
- [0496] 수명 LT는, 일정한 전류 밀도 j<sub>0</sub>로 작동하는 동안 루미넌스가 시작 루미넌스로부터 특정한 비율 L1로 하락하는 시간으로서 정의된다. 표 10에서의 L1 = 80%의 수치는 LT 열에 보고된 수명이, 루미넌스가 그 시작 값의 80%까지 떨어진 후의 시간에 대응하는 것을 의미한다.
- [0497] **OLED에서의 본 발명의 혼합물의 용도**
- [0498] 본 발명의 재료 조합들은 인광 녹색 OLED에서의 방출 층에 사용될 수 있다. 본 발명의 화합물 1 및 6과 화합물 15, 19, 23, 26 또는 27의 조합이 방출층에서 매트릭스 재료로서 예 I1 내지 I10에서 사용된다.

[0499] 표 8 : OLED 의 구조

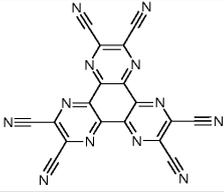
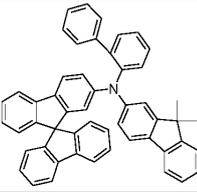
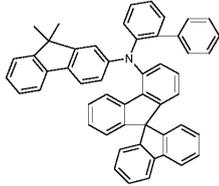
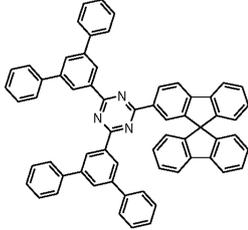
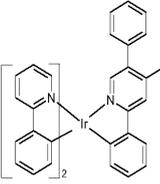
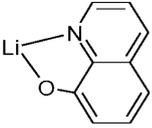
예	HIL 두께	HTL 두께	EBL 두께	EML 두께	HBL 두께	ETL 두께	EIL 두께
C1	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	SoA1:15:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
C2	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	SoA1:19:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
C3	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	SoA1:23:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
C4	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	SoA1:26:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
C5	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	SoA1:27:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
C6	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	SoA2:23:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
C7	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	SoA3:15:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
C8	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	SoA3:23:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I1	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	6:15:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I2	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	6:19:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I3	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	6:23:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I4	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	6:26:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I5	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	6:27:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I6	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	1:15:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm

[0500]

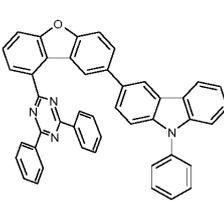
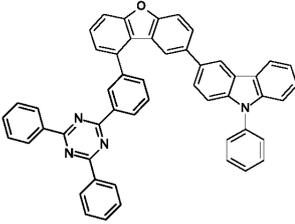
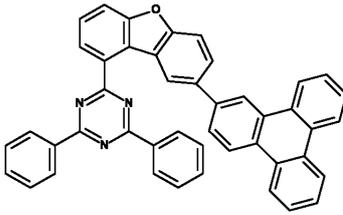
I7	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	1:19:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I8	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	1:23:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I9	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	1:26:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I10	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	1:27:TEG1 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm

[0501]

[0502] 표 9: OLED 를 위한 재료의 구조식

	
<p>HATCN</p>	<p>SpMA1</p>
	
<p>SpMA2</p>	<p>ST2</p>
	
<p>TEG1</p>	<p>LiQ</p>

[0503]

	
<p>SoA1</p>	<p>SoA2</p>
	
<p>SoA3</p>	

[0504]

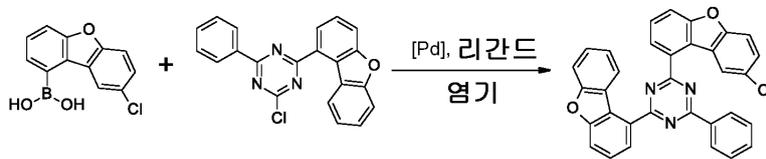
[0505] 표 10: OLED 의 데이터

예	U10 (V)	CE10 (cd/A)	CIE x/y at 10 mA/cm <sup>2</sup>	j <sub>0</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	L1 (%)	LT (h)
C1	4.1	59	0.33/0.63	40	80	410
C7	4.3	63	0.33/0.63	40	80	470
I1	4.1	65	0.33/0.63	40	80	560
I6	4.0	65	0.33/0.63	40	80	490
C2	4.1	58	0.33/0.63	40	80	460
I2	4.0	64	0.33/0.63	40	80	610
I7	4.0	63	0.33/0.63	40	80	550
C3	4.0	57	0.32/0.64	40	80	320
C6	4.0	62	0.33/0.63	40	80	200
C8	4.3	62	0.33/0.63	40	80	350
I3	4.0	62	0.32/0.64	40	80	400
I8	4.0	61	0.32/0.64	40	80	380
C4	3.9	60	0.32/0.63	40	80	240
I4	3.9	65	0.32/0.63	40	80	310
I9	3.9	59	0.32/0.63	40	80	270
C5	3.9	60	0.33/0.63	40	80	280
I5	3.9	64	0.33/0.63	40	80	360
I10	3.9	60	0.33/0.63	40	80	330

[0506]

[0507] 예 2: 본 발명의 화합물의 합성

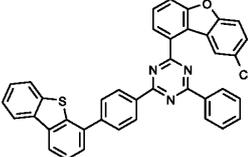
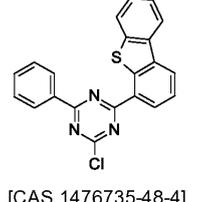
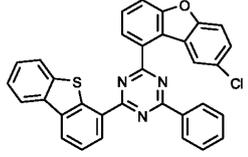
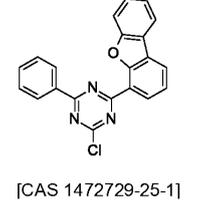
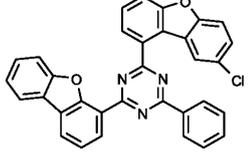
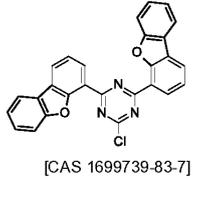
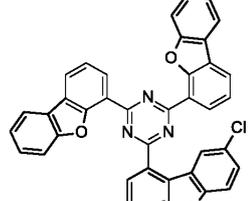
[0508] a)2-{12-클로로-8-옥사트리시클로[7.4.0.0<sup>2,7</sup>]트리데카-1(13),2(7),3,5,9,11-헥사엔-3-일}-4-{8-옥사트리시클로[7.4.0.0<sup>2,7</sup>]트리데카-1(9),2,4,6,10,12-헥사엔-3-일}-6-페닐-1,3,5-트리아진



[0509]

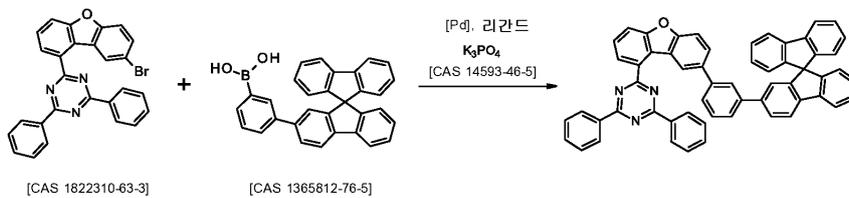
[0510] 58 g (210 mmol; 1.00 당량) 의 1-보로닐-8-클로로디벤조푸란 [CAS 162667-19-4], 90.2 g (252 mmol; 1.20 당량) 의 2-클로로-4-{8-옥사트리시클로[7.4.0.0<sup>2,7</sup>]트리데카-1(9),2(7),3,5,10,12-헥사엔-3-일}-6-페닐-1,3,5-트리아진 [CAS 1883265-32-4] 및 44.5 g (420 mmol, 2.00 당량) 의 탄산 나트륨 [CAS 497-19-8] 이 1000 ml 의 디옥산 [CAS 123-91-1], 1000 ml 의 톨루엔 [CAS 108-88-3] 및 400 ml 의 물의 혼합물에 현탁된다. 이 현탁액에 4.85 g (4.20 mmol; 0.02 당량) 의 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) [CAS 14221-01-3] 을 첨가하고, 반응 혼합물을 16 시간 동안 환류하에 가열한다.냉각 후, 유기 상을 제거하고, 실리카 겔을 통해 여과하고, 200 ml 의 물로 3 회 세척한 다음 농축 건조시킨다. 수율은 79.1 g 이다 (151 mmol; 이론치의 72%).

[0511] 유사한 방식으로, 하기의 화합물을 수득하는 것이 가능하다:

No.	반응물 1	생성물	수율
1a	 [CAS 2074632-09-8]		80%
2a	 [CAS 1476735-48-4]		65%
3a	 [CAS 1472729-25-1]		67%
4a	 [CAS 1699739-83-7]		75%

[0512]

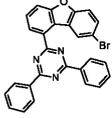
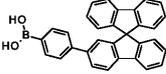
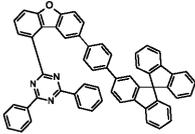
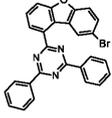
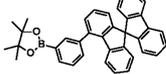
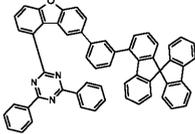
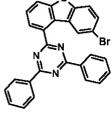
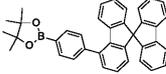
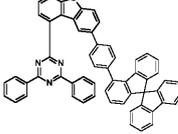
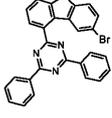
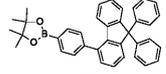
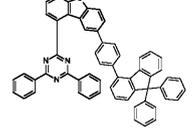
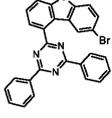
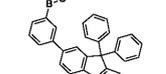
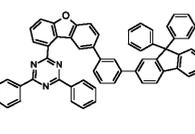
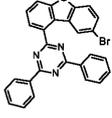
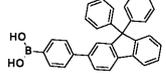
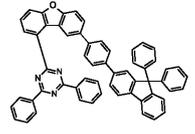
[0513] b) 2,4-디페닐-6-[12-(3-{9,9'-스피로바이[플루오렌]-7-일}페닐)-8-옥사트리시클로[7.4.0.0<sup>2,7</sup>]트리테카-1(9),2(7),3,5,10,12-헥사엔-3-일]-1,3,5-트리아진



[0514]

[0515] 100 g (209 mmol; 1.00 당량) 의 2-{12-브로모-8-옥사트리시클로[7.4.0.0<sup>2,7</sup>]트리테카-1(9),2(7),3,5,10,12-헥사엔-3-일}-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 [CAS 1160861-53-9], 114 g (220 mmol; 1.05 당량) 의 (3-{9,9'-스피로바이[플루오렌]-2-일}페닐)보론산 [CAS 1365812-76-5] 및 133 g (627 mmol; 3.00 당량) 의 인산 삼칼륨 [CAS 14593-46-5] 이 800 ml 의 디옥산 [CAS 123-91-1], 800 ml 의 톨루엔 [CAS 108-88-3] 및 800 ml 의 물의 혼합물에 현탁된다. 이 현탁액에, 3.86 g (4.80 mmol; 4.5 mol%) 의 디시클로헥실(2',6'-디메톡시바이페닐-2-일)포스핀 (SPhos) [CAS 657408-07-6] 및 2.87 g (3.14 mmol; 1.5 mol%) 의 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐 [CAS 51364-51-3] 를 첨가하고 그 반응 혼합물을 16 시간 동안 환류하 가열시켰다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고 상들을 분리한다. 수성 상을 추출한 후, 조합된 유기상을 식염수로 세척하고 황산 나트륨 상에서 건조시킨다. alox 를 통해 여과한 후 용매를 제거한다. 결과적인 고체에 에틸 아세이트로부터 2번 재결정화한다. 고진공 하에서 최종 승화한 후, 정제된 생성물은 무색 고체 96.3 g (122 mmol; 58%) 으로서 얻어진다.

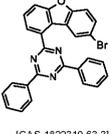
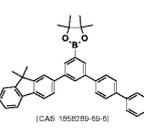
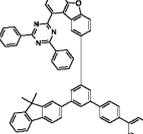
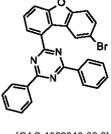
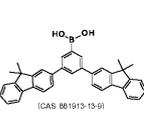
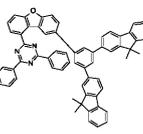
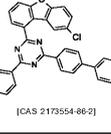
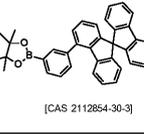
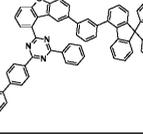
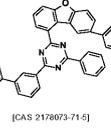
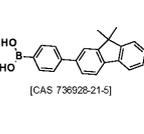
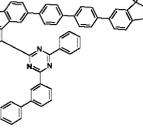
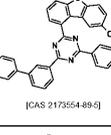
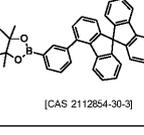
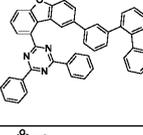
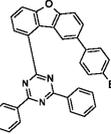
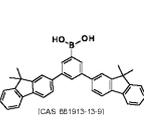
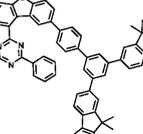
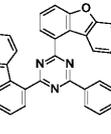
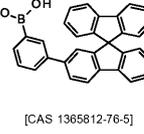
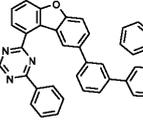
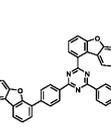
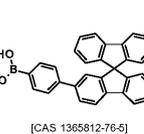
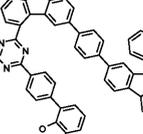
[0516] 유사한 방식으로, 하기의 화합물을 수득하는 것이 가능하다:

No.	반응물 1	반응물 2	생성물	수율
1b	 [CAS 1822310-63-3]	 [CAS 1365812-76-5]		42%
2b	 [CAS 1822310-63-3]	 [CAS 2112854-30-3]		45%
3b	 [CAS 1822310-63-3]	 [CAS 1813574-89-8]		55%
4b	 [CAS 1822310-63-3]	 [CAS 1813574-77-4]		50%
5b	 [CAS 1822310-63-3]	 [CAS 1813574-80-9]		60%
6b	 [CAS 1822310-63-3]	 [CAS 736928-24-8]		53%

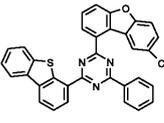
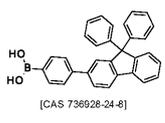
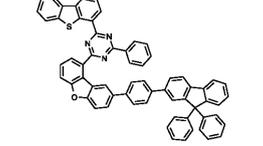
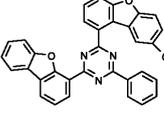
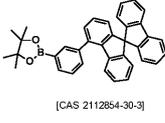
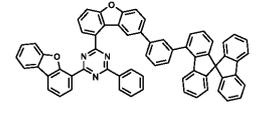
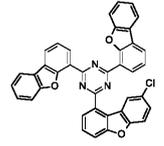
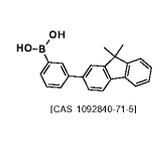
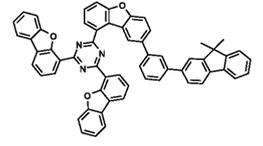
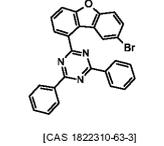
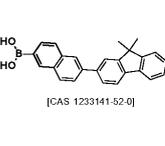
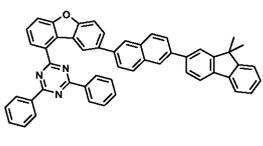
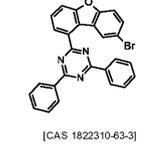
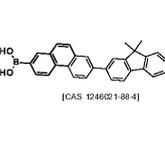
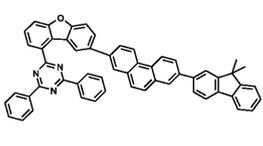
[0517]

<b>7b</b>	 [CAS 2178073-69-1]	 [CAS 1224976-40-2]	 49%
<b>8b</b>	 [CAS 2178073-69-1]	 [CAS 1207559-33-8]	 28%
<b>9b</b>	 [CAS 1822310-63-3]	 [CAS 736928-21-5]	 15%
<b>10b</b>	 [CAS 1822310-63-3]	 [CAS 1092840-71-5]	 55%
<b>11b</b>	 [CAS 2178073-69-1]	 [CAS 1246022-50-3]	 61%
<b>12b</b>	 [CAS 2178073-68-0]	 [CAS 1246022-50-3]	 51%
<b>13b</b>	 [CAS 1822310-63-3]	 [CAS 1612245-56-3]	 38%
<b>14b</b>	 [CAS 1822310-63-3]	 [CAS 2101632-14-6]	 42%

[0518]

<p><b>15b</b></p>	 <p>[CAS 1822310-63-3]</p>	 <p>[CAS 1858289-69-6]</p>		<p>48%</p>
<p><b>16b</b></p>	 <p>[CAS 1822310-63-3]</p>	 <p>[CAS 881913-13-9]</p>		<p>44%</p>
<p><b>17b</b></p>	 <p>[CAS 2173554-86-2]</p>	 <p>[CAS 2112854-30-3]</p>		<p>62%</p>
<p><b>18b</b></p>	 <p>[CAS 2178073-71-5]</p>	 <p>[CAS 736928-21-5]</p>		<p>48%</p>
<p><b>19b</b></p>	 <p>[CAS 2173554-89-5]</p>	 <p>[CAS 2112854-30-3]</p>		<p>55%</p>
<p><b>20b</b></p>	 <p>[CAS 2178073-68-0]</p>	 <p>[CAS 881913-13-9]</p>		<p>49%</p>
<p><b>21b</b></p>	 <p>[CAS 1365812-76-5]</p>	 <p>[CAS 1365812-76-5]</p>		<p>53%</p>
<p><b>22b</b></p>	 <p>[CAS 1365812-76-5]</p>	 <p>[CAS 1365812-76-5]</p>		<p>59%</p>

[0519]

<p><b>23b</b></p>		 <p>[CAS 736928-24-6]</p>		<p>65%</p>
<p><b>24b</b></p>		 <p>[CAS 2112854-30-3]</p>		<p>57%</p>
<p><b>25b</b></p>		 <p>[CAS 1092840-71-5]</p>		<p>57%</p>
<p><b>26b</b></p>	 <p>[CAS 1822310-63-3]</p>	 <p>[CAS 1233141-52-0]</p>		<p>53%</p>
<p><b>27b</b></p>	 <p>[CAS 1822310-63-3]</p>	 <p>[CAS 1246021-88-4]</p>		<p>49%</p>

[0520]