(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2018 년 12 월 13 일 (13.12.2018)

WIPO | PCT

(10) 국제공개번호
WO 2018/225992 A1

(51) 국제특허분류:
H01L 51/00 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)

(21) 국제출원번호: PCT/KR2018/006291

(22) 국제출원일: 2018 년 6 월 1 일 (01.06.2018)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:
10-2017-0071573 2017 년 6 월 8 일 (08.06.2017) KR

(71) 출원인: **덕산네오룩스 주식회사 (DUK SAN NEOLUX CO., LTD.)** [KR/KR]; 31027 충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32, Chungcheongnam-do (KR).

(72) 발명자: **정연석 (JEONG, Yeon Seok)**; 25222 강원도 횡성군 횡성읍 삼일로 50 대동아파트 101동 407호, Gangwon-do (KR). **박형근 (PARK, Hyoung Keun)**; 24311 강원도 춘천시 후석로228번길 24 석사2지구아파트 211동 1501호, Gangwon-do (KR). **박정환 (PARK, Jung Hwan)**; 18440 경기도 화성시 금반1길 15-13, 2호, Gyeonggi-do (KR). **박치현 (PARK, Chi Hyun)**; 10304 경기도 고양시 일산동구 은행마을로 16 101동 702호, Gyeonggi-do (KR). **조민지 (JO, Min Ji)**; 21995 인천시 연수구 해돋이로120번길 16 204동 2103호 (송도동, 풍림아이원아파트), Incheon (KR).

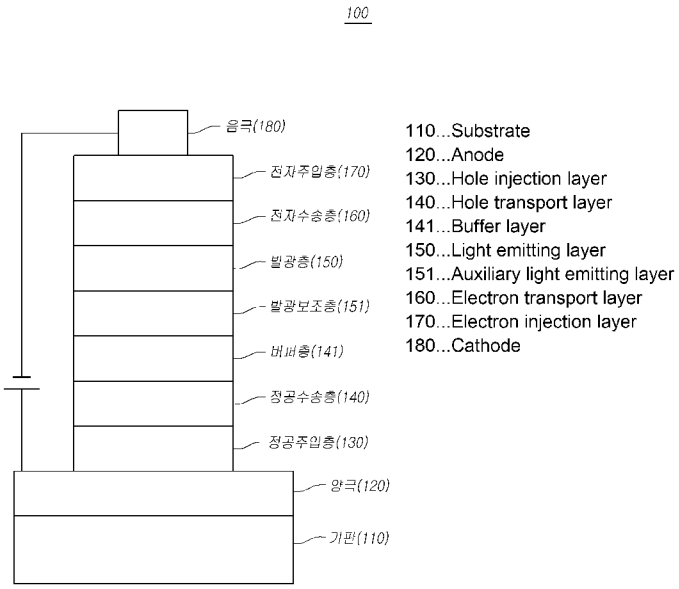
(74) 대리인: **특허법인(유한)유일하이스트 (YUIL HIGHEST INTERNATIONAL PATENT AND LAW FIRM)**; 06130 서울시 강남구 강남대로94길 59, 2층(역삼동, 옥산빌딩), Seoul (KR).

(81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD,

WO 2018/225992 A1

(54) **Title:** COMPOUND FOR ORGANIC ELECTRIC ELEMENT, ORGANIC ELECTRIC ELEMENT USING SAME, AND ELECTRONIC APPARATUS USING SAME

(54) **발명의 명칭:** 유기전기 소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치



(57) **Abstract:** The present invention provides: a compound capable of achieving high luminous efficiency, a low driving voltage, and improved use lifetime of an element; an organic electric element using the same; and an electronic apparatus using the same.

(57) **요약서:** 본 발명은 소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압 및 수명을 향상시킬 수 있는 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공한다.

[다음 쪽 계속]

SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))

명세서

발명의 명칭: 유기전기 소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치

기술분야

[1] 본 발명은 유기전기 소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치에 관한 것이다.

배경기술

[2] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛 에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기전기소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기전기소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.

[3] 유기전기소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다.

[4] 현재 휴대용 디스플레이 시장은 대면적 디스플레이로 그 크기가 증가하고 있는 추세이며, 이로 인해 기존 휴대용 디스플레이에서 요구하던 소비전력보다 더 큰 소비전력이 요구되고 있다. 따라서, 배터리라는 제한적인 전력 공급원을 가지고 있는 휴대용 디스플레이 입장에서는 소비전력이 중요한 요소가 되었고, 효율과 수명 문제 또한 반드시 해결해야 하는 중요한 요소이다.

[5] 효율과 수명, 구동전압 등은 서로 연관이 있으며, 효율이 증가되면 상대적으로 구동전압이 떨어지고, 구동전압이 떨어지면서 구동시 발생되는 주울열(Joule heating)에 의한 유기물질의 결정화가 적어져 결과적으로 수명이 높아지는 경향을 나타낸다. 하지만 상기 유기물층을 단순히 개선한다고 하여 효율을 극대화시킬 수는 없다. 왜냐하면 각 유기물층 간의 에너지 준위 및 T1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성 할 수 있기 때문이다.

[6] 또한, 최근 유기 전기 발광소자에 있어 정공수송층에서의 발광 문제를 해결하기 위해 정공수송층과 발광층 사이에 발광보조층이 사용하는 방법이 연구되어져 왔으며, 각각의 발광층(R, G, B)에 따라 원하는 물질적 특성이 상이하여, 각각의 발광층에 따른 발광보조층의 개발이 필요한 시점이다.

[7] 일반적으로 전자수송층에서 발광층으로 전자(electron)가 전달되고 정공(hole)이 정공수송층에서 발광층으로 전달되어 재조합(recombination)에 의해 엑시톤(exciton)이 생성된다.

[8] 하지만 정공수송층에 사용되는 물질의 경우 낮은 HOMO 값을 가져야 하기 때문에 대부분 낮은 T1 값을 가지며, 이로 인해 발광층에서 생성된 엑시톤(exciton)이 정공수송층 계면 또는 정공수송층쪽으로 넘어가게 되어 결과적으로 정공 수송층 계면에서의 발광 또는 발광층 내 전하 불균형(charge unbalance)을 초래하여 정공수송층 계면에서 발광하게 된다.

[9] 정공수송층 계면에서 발광될 경우, 유기전기소자의 색순도 및 효율이 저하되고 수명이 짧아지는 문제점이 발생하게 된다. 따라서, 정공수송층 HOMO 에너지 준위와 발광층의 HOMO 에너지 준위 사이의 HOMO 준위를 갖는 물질이어야 하며, 높은 T1 값을 가지고, 적당한 구동전압 범위 내(full device의 blue 소자 구동전압 범위 내) 정공 이동도(hole mobility)를 갖는 발광보조층의 개발이 절실히 요구된다.

[10] 하지만 이는 단순히 발광보조층 물질의 코어에 대한 구조적 특성으로 이루어질 수 없으며, 발광보조층 물질의 코어 및 sub-치환기의 특성 그리고 발광보조층과 정공수송층, 발광보조층과 발광층 간의 알맞은 조합이 이루어졌을 때 고효율 및 고수명의 소자가 구현될 수 있는 것이다.

[11] 한편, 소자 구동시 발생되는 주울열(Joule heating)에 대해서도 안정된 특성, 즉 높은 유리 전이온도를 갖는 정공주입/수송층 및 발광보조층 재료에 개발 역시 필요한 상태이다.

[12] 정공수송층 및 발광보조층 재료의 낮은 유리전이 온도는 소자 구동시, 박막 표면의 균일도를 저하 및 소자 구동 시 발생하는 열로 인하여 물질이 변형될 수 있어, 이는 소자수명에 큰 영향을 미치는 것으로 보고되고 있다.

[13] 또한, OLED 소자는 주로 증착 방법에 의해 형성되는데, 증착시 오랫동안 견딜 수 있는 재료, 즉 내열특성이 강한 재료 개발이 필요한 실정이다.

[14] 즉, 유기전기소자가 갖는 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨데 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질, 발광보조층 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하나, 아직까지 안정되고 효율적인 유기전기소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이다. 따라서, 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있으며, 특히 발광보조층과 정공수송층의 재료에 대한 개발이 절실히 요구되고 있다.

발명의 상세한 설명

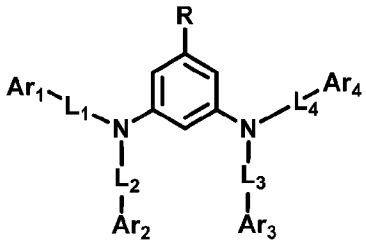
기술적 과제

[15] 본 발명은 상기와 같은 종래의 문제점을 해결하기 위하여 제안된 것으로, 효율적인 정공수송능력 및 전자저지능력을 갖는 화합물을 제공함과 동시에, 이러한 화합물을 이용하여 소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압, 고내열성, 색순도 및 수명을 향상시킬 수 있는 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

[16] 일 측면에서, 본 발명은 하기 화학식으로 표시되는 화합물을 제공한다.

[17] **화학식 1**



[18] 다른 측면에서, 본 발명은 상기 화학식으로 표시되는 화합물을 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공한다.

발명의 효과

[19] 본 발명에 따른 혼합물을 유기전기소자의 재료로 이용함으로써, 정공 수송 능력(hole transfer ability)이 향상되고, 발광층 내 에 전하균형을 이루기에 용이한 HOMO 에너지 레벨과 T1 값을 가져 유기 전기소자의 발광효율, 내열성, 수명 등이 향상될 수 있고 구동전압을 낮출 수 있다.

도면의 간단한 설명

[20] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기발광소자의 단면도이다.

발명의 실시를 위한 최선의 형태

[21] 이하, 본 발명의 실시예를 첨부된 도면을 참조하여 상세하게 설명한다.

[22] 각 도면의 구성요소들에 참조부호를 부가함에 있어서, 동일한 구성요소들에 대해서는 비록 다른 도면상에 표시되더라도 가능한 한 동일한 부호를 가지도록 하고 있음에 유의해야 한다. 또한, 본 발명을 설명함에 있어, 관련된 공지 구성 또는 기능에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명은 생략한다.

[23] 또한, 본 발명의 구성 요소를 설명하는 데 있어서, 제 1, 제 2, A, B, (a), (b) 등의 용어를 사용할 수 있다. 이러한 용어는 그 구성 요소를 다른 구성 요소와 구별하기 위한 것일 뿐, 그 용어에 의해 해당 구성 요소의 본질이나 차례 또는 순서 등이 한정되지 않는다. 어떤 구성 요소가 다른 구성요소에 "연결", "결합" 또는 "접속"된다고 기재된 경우, 그 구성 요소는 그 다른 구성요소에 직접적으로 연결되거나 또는 접속될 수 있지만, 각 구성 요소 사이에 또 다른 구성 요소가 "연결", "결합" 또는 "접속"될 수도 있다고 이해되어야 할 것이다.

[24] 본 명세서 및 첨부된 청구의 범위에서 사용된 바와 같이, 달리 언급하지 않는 한, 하기 용어의 의미는 하기와 같다.

[25] 본 명세서에서 사용된 용어 "할로" 또는 "할로겐"은 다른 설명이 없는 한 불소(F), 브롬(Br), 염소(Cl) 또는 요오드(I)이다.

[26] 본 발명에 사용된 용어 "알킬" 또는 "알킬기"는 다른 설명이 없는 한 1 내지

60의 탄소수의 단일결합을 가지며, 직쇄 알킬기, 분지쇄 알킬기, 사이클로알킬(지환족)기, 알킬-치환된 사이클로알킬기, 시클로알킬-치환된 알킬기를 비롯한 포화 지방족 작용기의 라디칼을 의미한다.

[27] 본 발명에 사용된 용어 "할로알킬기" 또는 "할로겐알킬기"는 다른 설명이 없는 한 할로겐으로 치환된 알킬기를 의미한다.

[28] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로알킬기"는 알킬기를 구성하는 탄소 원자 중 하나 이상이 헤테로원자로 대체된 것을 의미한다.

[29] 본 발명에 사용된 용어 "알케일기" 또는 "알킨일기"는 다른 설명이 없는 한 각각 2 내지 60의 탄소수의 이중결합 또는 삼중결합을 가지며, 직쇄형 또는 측쇄형 사슬기를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[30] 본 발명에 사용된 용어 "시클로알킬"은 다른 설명이 없는 한 3 내지 60의 탄소수를 갖는 고리를 형성하는 알킬을 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[31] 본 발명에 사용된 용어 "알콕실기", "알콕시기", 또는 "알킬옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 알킬기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[32] 본 발명에 사용된 용어 "알켄옥실기", "알켄옥시기", "알켄일옥실기", 또는 "알켄일옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 알켄일기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 2 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[33] 본 발명에 사용된 용어 "아릴옥실기" 또는 "아릴옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 아릴기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[34] 본 발명에 사용된 용어 "아릴기" 및 "아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 이에 제한되는 것은 아니다. 본 발명에서 아릴기 또는 아릴렌기는 단일 고리 또는 다중 고리의 방향족을 의미하며, 이웃한 치환기가 결합 또는 반응에 참여하여 형성된 방향족 고리를 포함한다. 예컨대, 아릴기는 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 안트라센일기, 플루오렌기, 스파이로플루오렌기, 스파이로바이플루오렌기일 수 있다.

[35] 접두사 "아릴" 또는 "아르"는 아릴기로 치환된 라디칼을 의미한다. 예를 들어 아릴알킬기는 아릴기로 치환된 알킬기이며, 아릴알켄일기는 아릴기로 치환된 알켄일기이며, 아릴기로 치환된 라디칼은 본 명세서에서 설명한 탄소수를 가진다.

[36] 또한 접두사가 연속으로 명명되는 경우 먼저 기재된 순서대로 치환기가 나열되는 것을 의미한다. 예를 들어, 아릴알콕시기의 경우 아릴기로 치환된 알콕시기를 의미하며, 알콕실카르보닐기의 경우 알콕실기로 치환된 카르보닐기를 의미하며, 또한 아릴카르보닐알켄일기의 경우 아릴카르보닐기로 치환된 알켄일기를 의미하며 여기서 아릴카르보닐기는 아릴기로 치환된 카르보닐기이다.

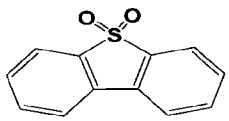
[37] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로알킬"은 다른 설명이 없는 한 하나 이상의

헤테로원자를 포함하는 알킬을 의미한다. 본 발명에 사용된 용어 "헤테로아릴기" 또는 "헤테로아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 탄소수 2 내지 60의 아릴기 또는 아릴렌기를 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니며, 단일 고리 및 다중 고리 중 적어도 하나를 포함하며, 이웃한 작용기기가 결합하여 형성될 수도 있다.

[38] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로고리기"는 다른 설명이 없는 한 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고, 2 내지 60의 탄소수를 가지며, 단일 고리 및 다중 고리 중 적어도 하나를 포함하며, 헤테로지방족 고리 및 헤테로방향족 고리를 포함한다. 이웃한 작용기가 결합하여 형성될 수도 있다.

[39] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로원자"는 다른 설명이 없는 한 N, O, S, P 또는 Si를 나타낸다.

[40] 또한 "헤테로고리기"는, 고리를 형성하는 탄소 대신 SO_2를 포함하는 고리도 포함할 수 있다. 예컨대, "헤테로고리기"는 다음 화합물을 포함한다.

[41] 

[42] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "지방족"은 탄소수 1 내지 60의 지방족 탄화수소를 의미하며, "지방족고리"는 탄소수 3 내지 60의 지방족 탄화수소 고리를 의미한다.

[43] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "고리"는 탄소수 3 내지 60의 지방족고리 또는 탄소수 6 내지 60의 방향족고리 또는 탄소수 2 내지 60의 헤테로고리 또는 이들의 조합으로 이루어진 융합 고리를 말하며, 포화 또는 불포화 고리를 포함한다.

[44] 전술한 헤테로화합물 이외의 그 밖의 다른 헤테로화합물 또는 헤테로라디칼은 하나 이상의 헤테로원자를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[45] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "카르보닐"이란 -COR'로 표시되는 것이며, 여기서 R'은 수소, 탄소수 1 내지 20 의 알킬기, 탄소수 6 내지 30 의 아릴기, 탄소수 3 내지 30의 사이클로알킬기, 탄소수 2 내지 20의 알켄일기, 탄소수 2 내지 20의 알킨일기, 또는 이들의 조합인 것이다.

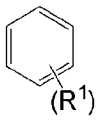
[46] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "에테르"란 -R-O-R'로 표시되는 것이며, 여기서 R 또는 R'은 각각 서로 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 탄소수 3 내지 30의 사이클로알킬기, 탄소수 2 내지 20의 알켄일기, 탄소수 2 내지 20의 알킨일기, 또는 이들의 조합인 것이다.

[47] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용된 용어 "치환 또는 비치환된"에서 "치환"은 중수소, 할로겐, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C_1~C_{20}의 알킬기, C_1~C_{20}의 알콕실기, C_1~C_{20}의 알킬아민기, C_1~C_{20}의 알킬티오펜기, C_6~C_{20}의 아릴티오펜기, C_2~C_{20}의 알켄일기, C_2~C_{20}의 알킨일기, C_3~C_{20}의

시클로알킬기, C_6~C_{20}의 아릴기, 중수소로 치환된 C_6~C_{20}의 아릴기, C_8~C_{20}의 아릴알켄일기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, 및 C_2~C_{20}의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환됨을 의미하며, 이들 치환기에 제한되는 것은 아니다.

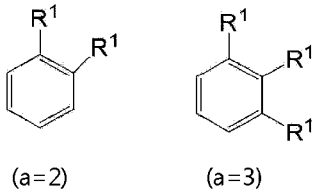
[48] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용되는 화학식은 하기 화학식의 지수 정의에 의한 치환기 정의와 동일하게 적용된다.

[49]



[50] 여기서, a가 0의 정수인 경우 치환기 R^1은 부존재하며, a가 1의 정수인 경우 하나의 치환기 R^1은 벤젠 고리를 형성하는 탄소 중 어느 하나의 탄소에 결합하며, a가 2 또는 3의 정수인 경우 각각 다음과 같이 결합하며 이때 R^1은 서로 동일하거나 다를 수 있으며, a가 4 내지 6의 정수인 경우 이와 유사한 방식으로 벤젠 고리의 탄소에 결합하며, 한편 벤젠 고리를 형성하는 탄소에 결합된 수소의 표시는 생략한다.

[51]



[52] 도 1은 본 발명에 일 실시예에 따른 유기전기소자에 대한 예시도이다.

[53] 도 1을 참조하면, 본 발명에 따른 유기전기소자(100)는 기판(110) 상에 형성된 제 1전극(120), 제 2전극(180) 및 제 1전극(110)과 제 2전극(180) 사이에 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 유기물층을 구비한다. 이때, 제 1전극(120)은 애노드(양극)이고, 제 2전극(180)은 캐소드(음극)일 수 있으며, 인버트형의 경우에는 제 1전극이 캐소드이고 제 2전극이 애노드일 수 있다.

[54] 유기물층은 제 1전극(120) 상에 순차적으로 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160) 및 전자주입층(170)을 포함할 수 있다. 이때, 발광층(150)을 제외한 나머지 층들이 형성되지 않을 수 있다. 정공저지층, 전자저지층, 발광보조층(151), 전자수송보조층, 버퍼층(141) 등을 더 포함할 수도 있고, 전자수송층(160) 등이 정공저지층의 역할을 할 수도 있을 것이다.

[55] 또한, 미도시하였지만, 본 발명에 따른 유기전기소자는 제 1전극과 제 2전극 중 적어도 일면 중 상기 유기물층과 반대되는 일면에 형성된 보호층 또는 광효율 개선층(Capping layer)을 더 포함할 수 있다.

[56] 상기 유기물층에 적용되는 본 발명에 따른 화합물은 정공주입층(130), 정공수송층(140), 전자수송층(160), 발광보조층(151), 전자수송보조층, 전자주입층(170), 발광층(150)의 호스트 또는 도펀트 또는 광효율 개선층의

재료로 사용될 수 있을 것이다. 바람직하게는, 본 발명의 화합물은 정공수송층 및/또는 발광보조층(151)의 재료로 사용될 수 있을 것이다.

[57] 한편, 동일한 코어일지라도 어느 위치에 어느 치환기를 결합시키냐에 따라 밴드갭(band gap), 전기적 특성, 계면 특성 등이 달라질 수 있으므로, 코어의 선택 및 이에 결합된 서브(sub)-치환체의 조합도 아주 중요하며, 특히 각 유기물층 간의 에너지 준위 및 T1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 장수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있다.

[58] 따라서, 본 발명에서는 화학식 1로 표시되는 화합물을 사용하여 정공수송층 및/또는 발광보조층(151)을 형성함으로써 발광층을 형성함으로써 각 유기물층 간의 에너지 레벨(level) 및 T1 값, 물질의 고유특성(mobility, 계면특성 등) 등을 최적화하여 유기전기소자의 수명 및 효율을 동시에 향상시킬 수 있다.

[59] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기소자는 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여 제조될 수 있다. 예컨대, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극(120)을 형성하고, 그 위에 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160) 및 전자주입층(170)을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극(180)으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 또한, 정공수송층(140)과 발광층(150) 사이에 발광보조층(151)을, 발광층(150)과 전자수송층(160) 사이에 전자수송보조층을 추가로 더 형성할 수 있다.

[60] 또한, 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 용액 공정 또는 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정, 롤투롤 공정, 닥터 블레이딩 공정, 스크린 프린팅 공정, 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다. 본 발명에 따른 유기물층은 다양한 방법으로 형성될 수 있으므로, 그 형성방법에 의해 본 발명의 권리범위가 제한되는 것은 아니다.

[61] 본 발명에 따른 유기전기소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[62] WOLED(White Organic Light Emitting Device)는 고해상도 실현이 용이하고 공정성이 우수한 한편, 기존의 LCD의 칼라필터 기술을 이용하여 제조될 수 있는 이점이 있다. 주로 백라이트 장치로 사용되는 백색 유기전기소자에 대한 다양한 구조들이 제안되고 특허화되고 있다. 대표적으로, R(Red), G(Green), B(Blue) 발광부들을 상호평면적으로 병렬배치(side-by-side) 방식, R, G, B 발광층이 상하로 적층되는 적층(stacking) 방식이 있고, 청색(B) 유기발광층에 의한 전계발광과 이로부터의 광을 이용하여 무기형광체의 자발광(photo-luminescence)을 이용하는 색변환물질(color conversion material, CCM) 방식 등이 있는데, 본 발명은 이러한 WOLED에도 적용될 수 있을 것이다.

[63] 또한, 본 발명에 따른 유기전기소자는 유기전기소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC), 유기트랜지스터(유기 TFT), 단색 또는 백색 조명용 소자 중

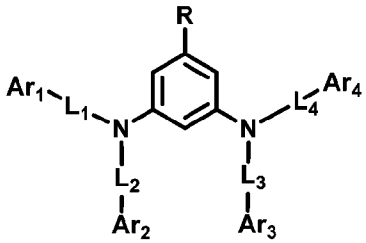
하나일 수 있다.

[64] 본 발명의 다른 실시예는 상술한 본 발명의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치와, 이 디스플레이장치를 제어하는 제어부를 포함하는 전자장치를 포함할 수 있다. 이때, 전자장치는 현재 또는 장래의 유무선 통신단말일 수 있으며, 휴대폰 등의 이동 통신 단말기, PDA, 전자사전, PMP, 리모콘, 네비게이션, 게임기, 각종 TV, 각종 컴퓨터 등 모든 전자장치를 포함한다.

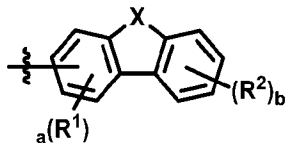
[65] 이하, 본 발명의 일 측면에 따른 화합물에 대하여 설명한다. 본 발명의 일 측면에 따른 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[66]

화학식 1



화학식 2



[67] 상기 화학식 1에서,

[68] 1) R은 C_1-C_{50}의 알킬기; C_2-C_{20}의 알케닐기; C_3-C_{30}의 사이클로 알킬기 중 어느 하나로 선택되고,

[69] 2) Ar^1 내지 Ar^4는 각각 서로 독립적으로 동일하거나 상이하며, C_6-C_{60}의 아릴기; 상기 화학식 2; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60}의 헤테로고리기; C_6-C_{60}의 방향족 고리와 C_3-C_{60}의 지방족 고리의 융합고리기; C_1-C_{50}의 알킬기; C_2-C_{20}의 알켄일기; C_2-C_{20}의 알킨일기; C_1-C_{30}의 알콕실기; 및 C_6-C_{30}의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 각각 어느 하나로 선택되며,

[70] 단 Ar^1 내지 Ar^4 중 적어도 하나는 상기 화학식 2의 구조이고,

[71] 3) L^1 내지 L^4는 각각 서로 독립적으로 동일하거나 상이하며, 단일결합; C_6-C_{60}의 아릴렌기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60}의 헤테로고리기; 플루오렌일렌기; C_3-C_{60}의 지방족고리와 C_6-C_{60}의 방향족고리의 2가 융합고리기; 및 C_1-C_{60}의 지방족 탄화수소기로 이루어진 군에서 각각 어느 하나로 선택되며,

[72] 4) X는 O, S 및 Se 중 어느 하나로 선택되고,

[73] 5) R_1 및 R_2는 각각 서로 독립적으로 동일하거나 상이하며, 수소; 중수소; 삼중수소; 할로겐; 시아노기; 나이트로기; C_6-C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60}의 헤테로고리기; C_3-C_{60}의 지방족고리와 C_6-C_{60}의 방향족고리의 융합고리기; C_1-C_{50}의 알킬기; C_2-C_{20}의 알켄일기; C_2-C_{20}의 알킨일기; C_1-C_{30}의 알콕실기; 및 C_6-C_{30}의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택되고, 복수의 R^1끼리 혹은 복수의 R^2

끼리 서로 결합하여 방향족 고리 또는 헤테로방향족 고리를 형성할 수 있으며,

[74] 6) a 및 b는 0 내지 4의 정수 중 어느 하나로 선택된다.

[75] 여기서, 상기 아릴기, 아릴렌기, 플루오렌일렌기, 플루오렌일기, 헤테로고리기, 알킬기, 융합고리기, 알켄일기, 알콕시기, 아릴옥시기 각각은 중수소; 할로겐; C_1-C_{20}의 알킬기 또는 C_6-C_{20}의 아릴기로 치환 또는 비치환된 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; C_1-C_{20}의 알킬싸이오기; C_1-C_{20}의 알콕실기; C_1-C_{20}의 알킬기; C_2-C_{20}의 알켄일기; C_2-C_{20}의 알킨일기; C_6-C_{20}의 아릴기; 중수소로 치환된 C_6-C_{20}의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{20}의 헤테로고리기; C_3-C_{20}의 시클로알킬기; C_7-C_{20}의 아릴알킬기; 및 C_8-C_{20}의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더욱 치환될 수 있으며, 이들 각 치환기가 인접한 경우 이들은 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

[76] 여기서 '고리'란 탄소수 3 내지 60의 지방족고리 또는 탄소수 6 내지 60의 방향족고리 또는 탄소수 2 내지 60의 헤테로고리 또는 이들의 조합으로 이루어진 융합 고리를 말하며, 포화 또는 불포화 고리를 포함한다.

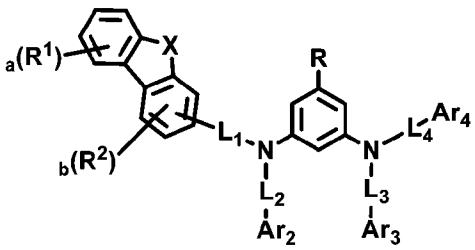
[77] 여기서, 상기 아릴기인 경우 탄소수는 6~60, 바람직하게는 탄소수 6~40, 보다 바람직하게는 탄소수 6~30의 아릴기일 수 있으며, 상기 헤테로고리기인 경우 탄소수는 2~60, 바람직하게는 탄소수 2~30, 보다 바람직하게는 탄소수 2~20의 헤테로고리일 수 있으며, 상기 알킬기인 경우 탄소수는 1~50, 바람직하게는 탄소수 1~30, 보다 바람직하게는 탄소수 1~20, 특히 바람직하게는 탄소수 1~10의 알킬기일 수 있다.

[78] 상기 전술한 아릴기 또는 아릴렌기일 경우, 구체적으로 아릴기 또는 아릴렌기는 서로 독립적으로 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 페난트릴기, 파이렌, 트리페닐렌, 또는 페닐렌기, 비페닐렌기, 터페닐렌기, 나프틸렌기 또는 페난트릴렌기 등일 수 있다.

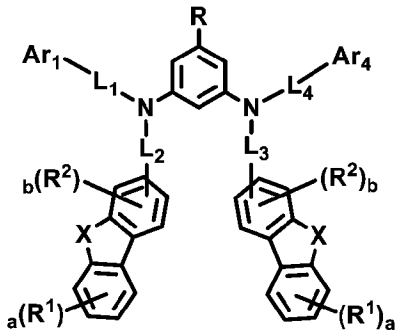
[79] 보다 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물들 중 어느 하나일 수 있으며, 하기 화합물에만 한정하는 것은 아니다.

[80] 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 내지 화학식 1-5 중 하나로 표시될 수 있다.

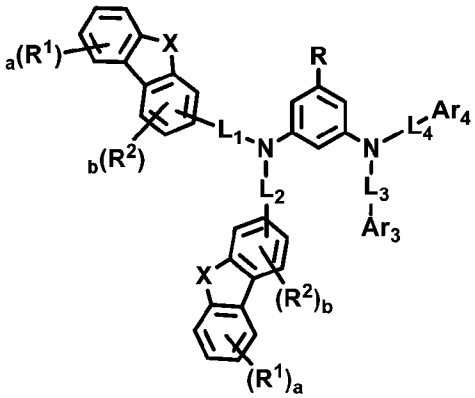
[81]



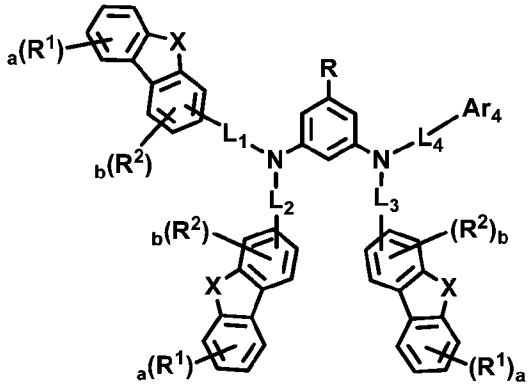
(화학식 1-1)



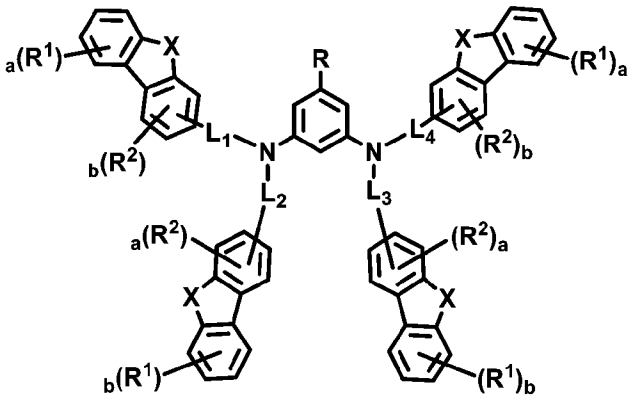
(화학식 1-2)



(화학식 1-3)



(화학식 1-4)



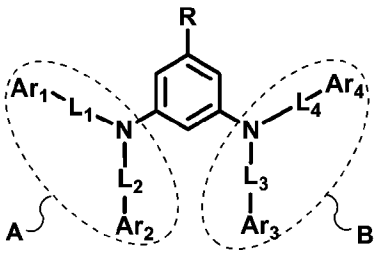
(화학식 1-5)

[82] 상기 화학식 1-1 내지 화학식 1-5에서,

[83] R, Ar^1 내지 Ar^4, L^1 내지 L^4, X, a 및 b는 상기 화학식 1에서 정의된 R, Ar^1 내지 Ar^4, L^1 내지 L^4, X, a 및 b와 동일하다.

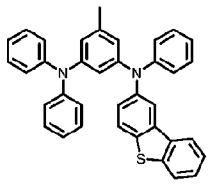
[84] 한편, 상술한 화학식 1에서 하기 A로 표시되는 부분과 B로 표시되는 부분은 서로 상이할 수 있다. 화학식 1에서 A로 표시되는 부분과 B로 표시되는 부분이 서로 상이하게 이루어짐으로써, 화학식 1로 표시되는 화합물의 내열성이 향상될 수 있다. 따라서, 화학식 1로 표시되는 화합물을 증착 공정에 적용하였을 때, 증착 시 변형 없이 오랫동안 견딜 수 있는 효과가 있다.

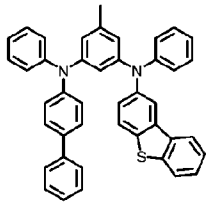
[85] **화학식 1**

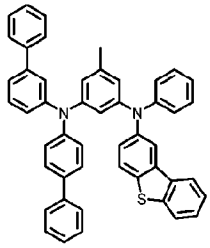


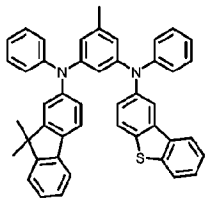
[86] 보다 구체적으로, 상기 화학식 1과 화학식 2의 조합으로 표시되는 화합물은 하기 화합물들 중 어느 하나일 수 있으며, 하기 화합물에만 한정하는 것은 아니다.

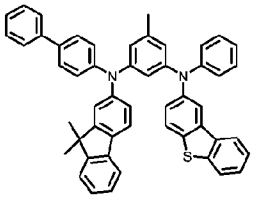
[87]

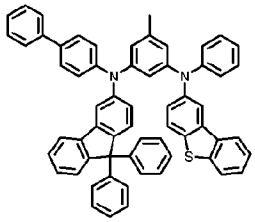

P-1

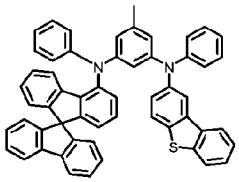

P-2

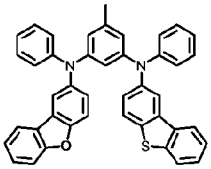

P-3


P-4

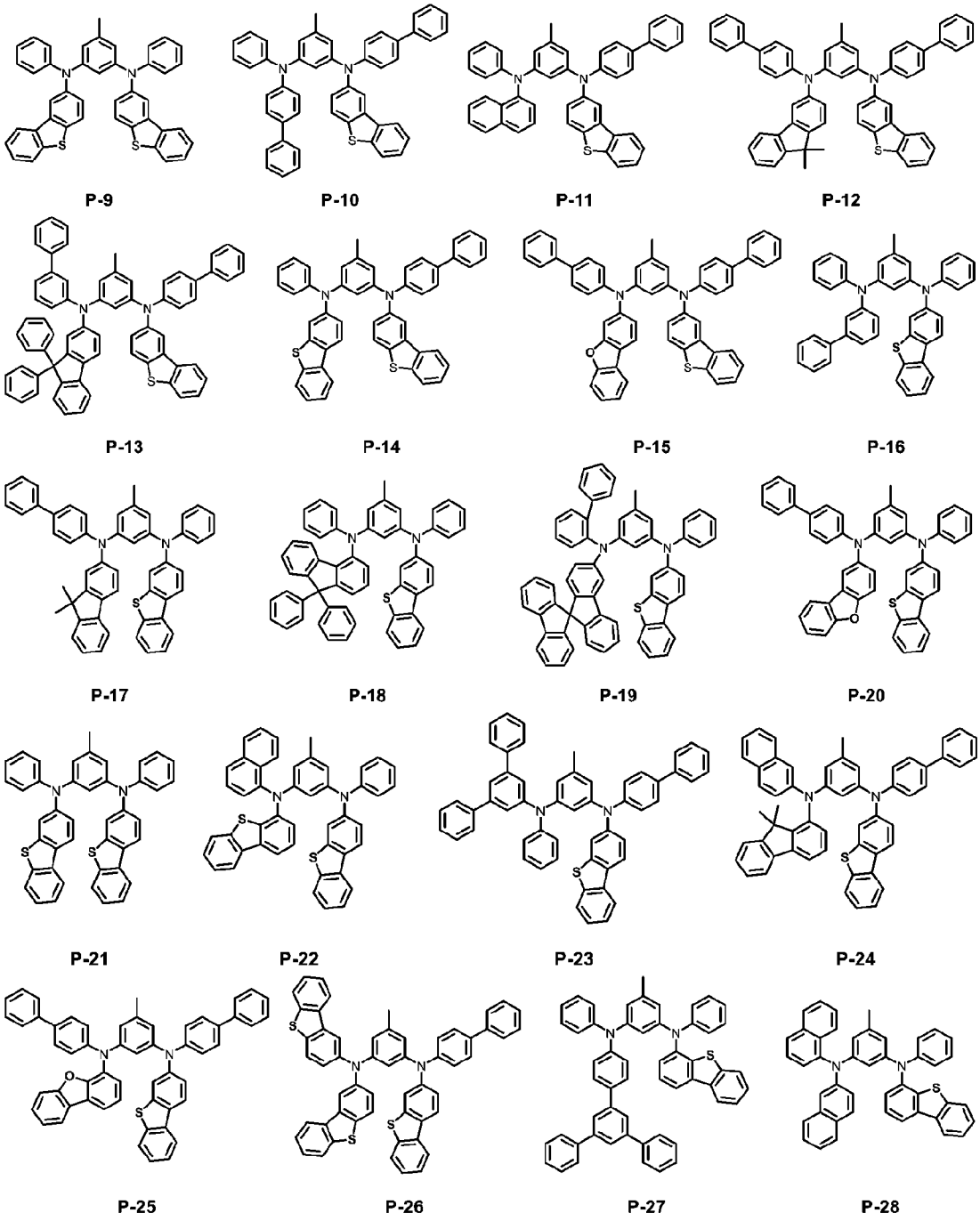

P-5


P-6

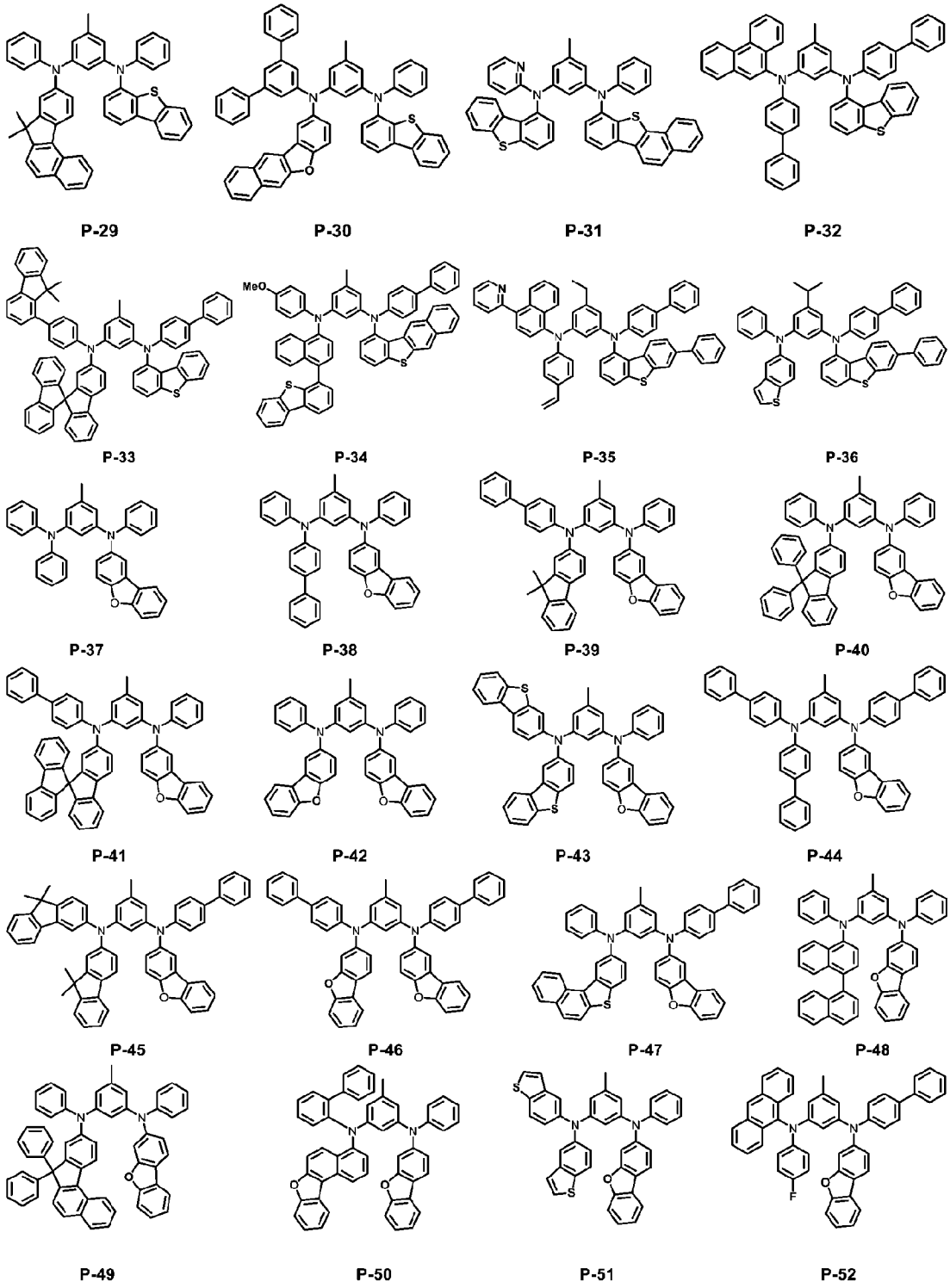

P-7


P-8

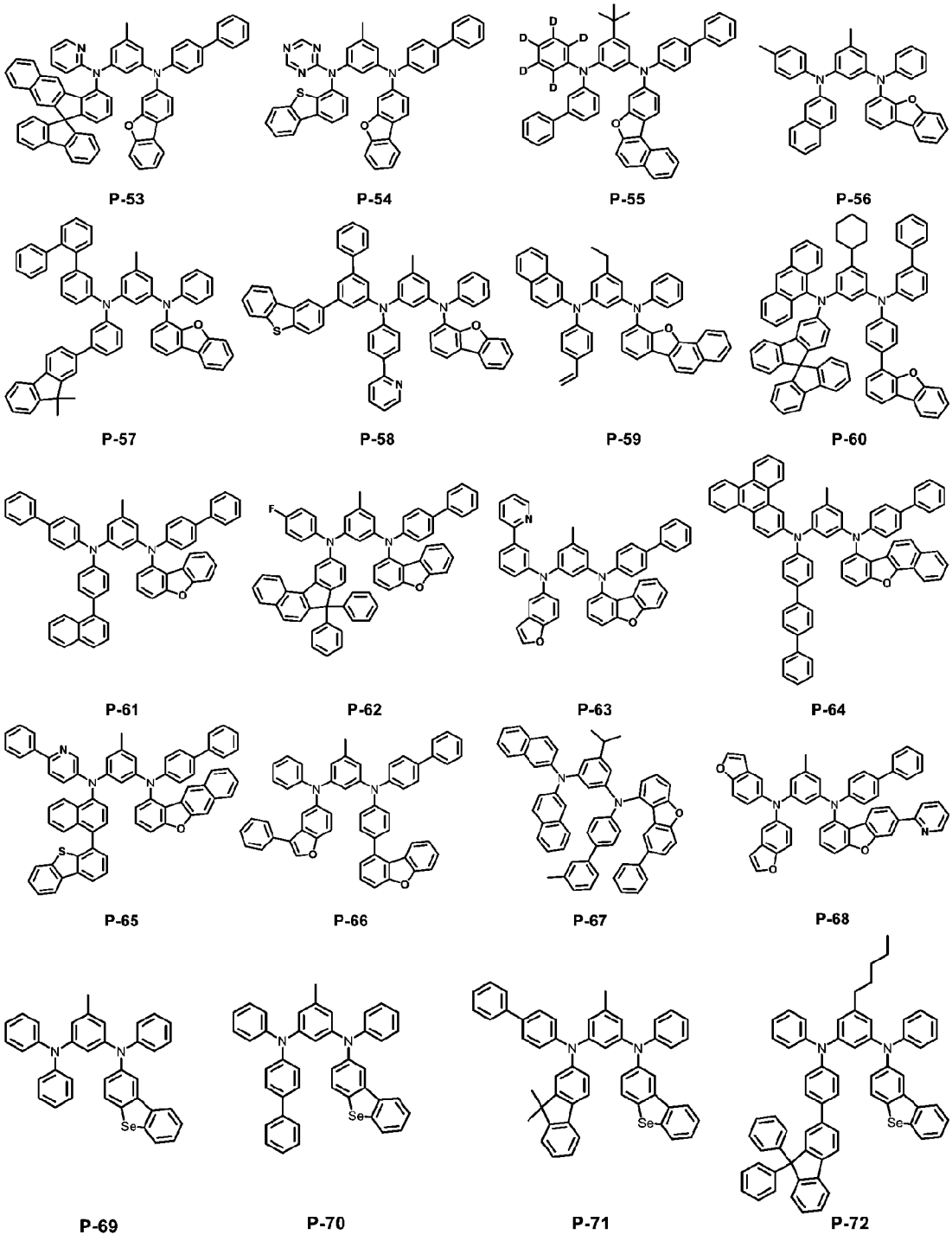
[88]


P-9
P-10
P-11
P-12
P-13
P-14
P-15
P-16
P-17
P-18
P-19
P-20
P-21
P-22
P-23
P-24
P-25
P-26
P-27
P-28

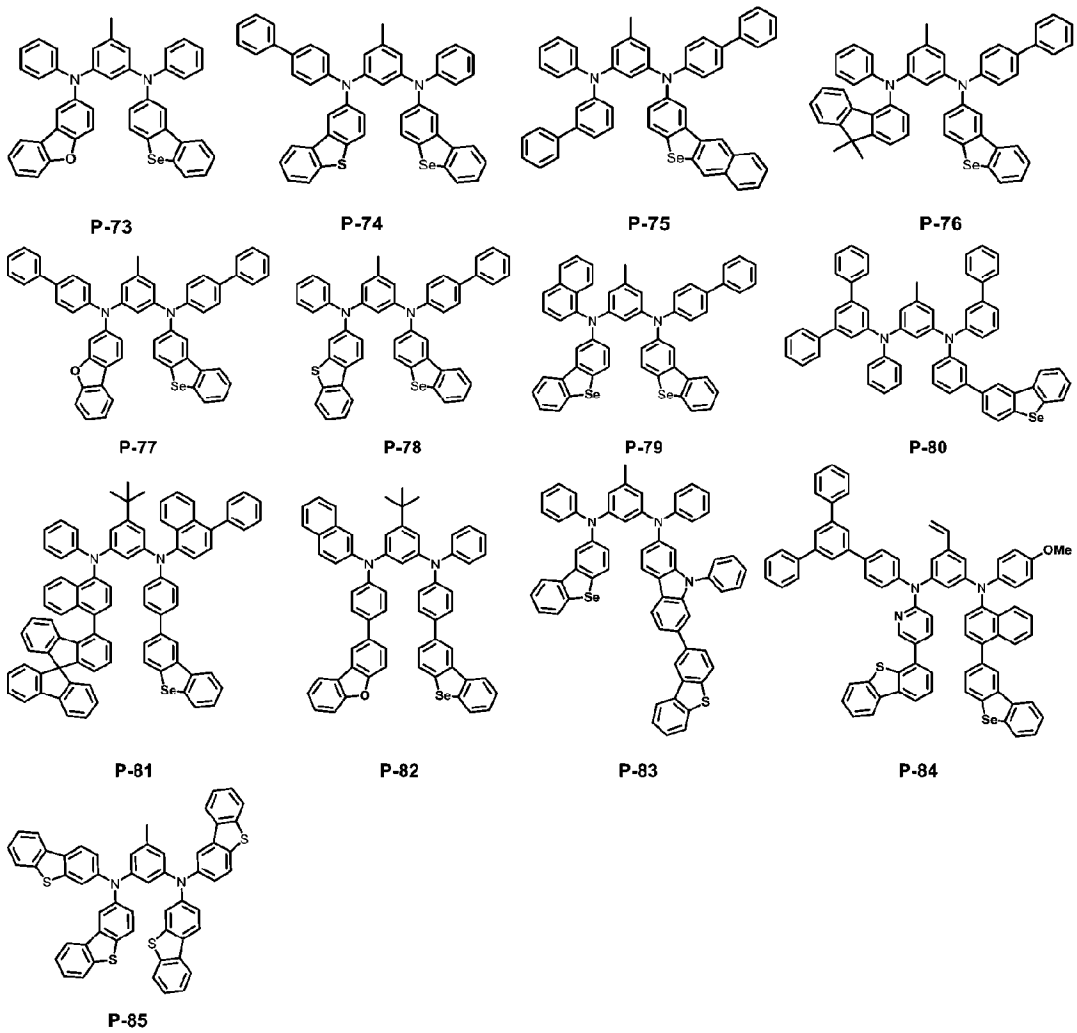
[89]


P-29
P-30
P-31
P-32
P-33
P-34
P-35
P-36
P-37
P-38
P-39
P-40
P-41
P-42
P-43
P-44
P-45
P-46
P-47
P-48
P-49
P-50
P-51
P-52

[90]


P-53
P-54
P-55
P-56
P-57
P-58
P-59
P-60
P-61
P-62
P-63
P-64
P-65
P-66
P-67
P-68
P-69
P-70
P-71
P-72

[91]



[92] 다른 실시예로서, 본 발명은 상기 화학식 1과 화학식 2의 조합으로 표시되는 유기전기소자용 화합물을 제공한다.

[93] 또 다른 실시예에서, 본 발명은 상기 화학식 1과 화학식 2의 조합으로 표시되는 화합물을 함유하는 유기전기소자를 제공한다.

[94] 이때, 유기전기소자는 제 1전극; 제 2전극; 및 상기 제 1전극과 제 2전극 사이에 위치하는 유기물층;을 포함할 수 있으며, 유기물층은 화학식 1과 화학식 2의 조합으로 표시되는 화합물을 포함할 수 있으며, 화학식 1과 화학식 2의 조합으로 표시되는 화합물은 유기물층의 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송보조층, 전자수송층 및 전자주입층 중 적어도 하나의 층에 함유될 수 있을 것이다. 특히 화학식 1과 화학식 2의 조합으로 표시되는 화합물은 정공수송층 또는 발광보조층에 포함될 수 있다.

[95] 즉, 화학식 1과 화학식 2의 조합으로 표시되는 화합물은 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송보조층, 전자수송층 또는 전자주입층의 재료로 사용될 수 있다. 구체적으로, 상기 유기물층에 상기 화학식 1과 화학식 2의 조합으로 표시되는 화합물 중 하나를 포함하는 유기전기소자를 제공하고, 보다 구체적으로, 상기 유기물층에 상기 개별 화학식(P-1 내지

P-85)으로 표시되는 화합물 중 하나를 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

[96] 또 다른 실시예에서, 상기 유기물층의 상기 정공주입층, 상기 정공수송층, 상기 발광보조층, 상기 발광층, 상기 전자수송보조층, 상기 전자수송층 및 상기 전자주입층 중 적어도 하나의 층에, 상기 화합물이 단독으로 함유되거나, 상기 화합물이 서로 다른 2종 이상의 조합으로 함유되거나, 상기 화합물이 다른 화합물과 2종 이상의 조합으로 함유된 것을 특징으로 하는 유기전기소자를 제공한다. 다시 말해서, 각각의 층들에는 화학식 1과 화학식 2의 조합으로 표시되는 화합물에 해당하는 화합물이 단독으로 포함될 수 있고, 2종 이상의 화학식 1과 화학식 2의 조합으로 표시되는 화합물들의 혼합물이 포함될 수 있으며, 청구항 1항 내지 5항의 화합물과, 본 발명에 해당하지 않는 화합물과의 혼합물이 포함될 수 있다. 여기서 본 발명에 해당하지 않는 화합물은 단일의 화합물일 수 있고, 2종 이상의 화합물들일 수도 있다. 이때 상기 화합물이 다른 화합물과 2종 이상의 조합으로 함유될 경우 다른 화합물은 각 유기물층의 이미 알려진 화합물일 수도 있고, 앞으로 개발될 화합물 등일 수 있다. 이때 상기 유기물층에 함유된 화합물은 동종의 화합물로만 이루어질 수도 있지만, 화학식 1과 화학식 2의 조합으로 표시되는 이종의 화합물이 2이상 혼합된 혼합물일 수도 있다.

[97] 본 발명의 또 다른 실시예에서, 상기 제 1전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 또는 상기 제 2전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 중 적어도 하나에 형성되는 광효율 개선층을 더 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

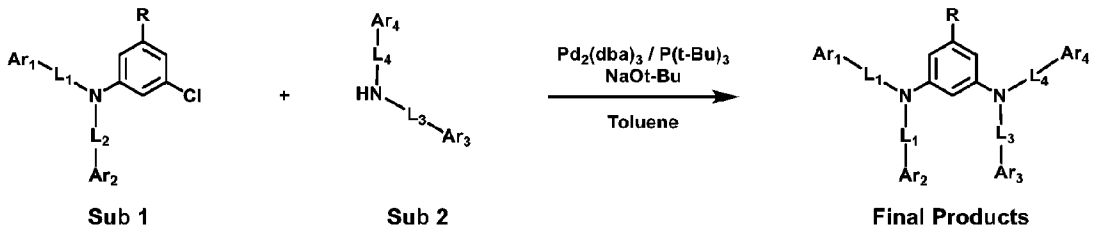
[98] 이하에서, 본 발명에 따른 화학식 1과 화학식 2의 조합으로 표시되는 화합물의 합성예 및 유기전기소자의 제조예에 관하여 실시예를 들어 구체적으로 설명하지만, 본 발명이 하기의 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[99]

[100] **합성예**

[101] 본 발명에 따른 화학식 (1)로 표시되는 화합물(final products)은 하기 반응식 1과 같이 Sub 1과 Sub 2를 반응시켜 합성되며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[102] <반응식 1>



[103] 상기 반응식 1에서,

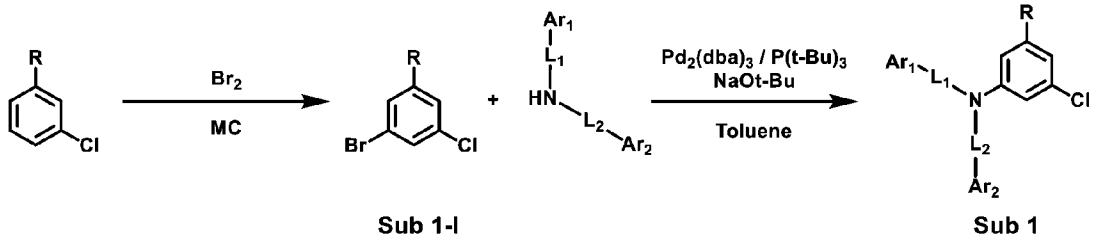
[104] R, Ar^1 내지 Ar^4는 상기 화학식 1에서 정의한 R, Ar^1 내지 Ar^4과 동일하다.

[105]

[106] **I. Sub 1의 합성**

[107] 상기 반응식 1의 Sub 1은 하기 반응식 2의 반응경로에 의해 합성될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[108] <반응식 2>

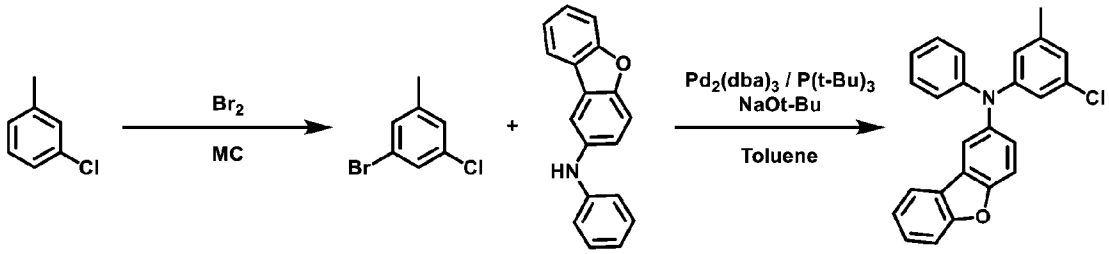


Sub 1-I Sub 1

[109] Sub 1에 속하는 구체적 화합물의 합성예는 다음과 같다.

[110] **1. Sub 1-2** 합성예

[111] <반응식 3>



Sub 1-I-2 Sub1-2

[112] **(1)** Sub1-I-2

[113] Aldrich에서 구매한 출발물질인 1-chloro-3-methylbenzene (CAS No. 108-41-8) (40 g, 316.2 mmol), bromine (50.5 g, 316.2 mmol)을 MC(400 mL)에 첨가하고 실온에서 교반하였다. 반응이 완료되면 NaOH로 중화시킨 후 CH_2Cl_2와 물로 추출하여 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축 한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 Sub 1-I-2 52 g (수율: 80.0%)을 얻었다.

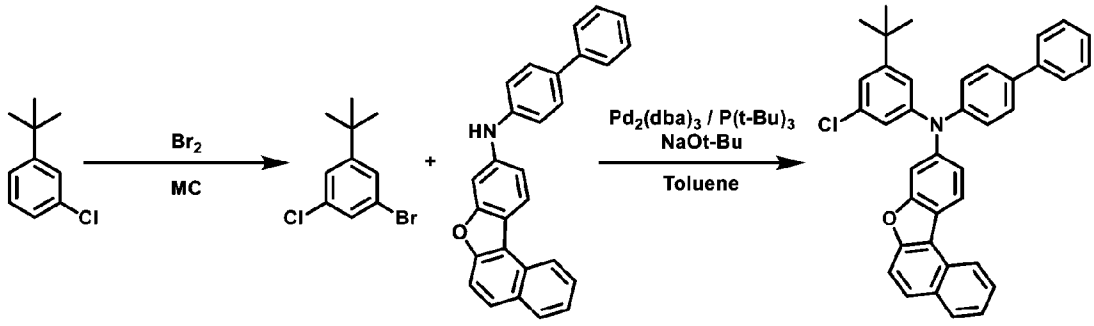
[114] **(2) Sub 1-2**

[115] 출발물질인 N-phenyldibenzo[b,d]furan-2-amine (50 g, 192.8 mmol)을 둥근 바닥플라스크에 toluene (985ml)으로 녹인 후에, Sub1-I-2 (39.6 g, 192.8 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (5.3 g, 5.8 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (4.6 ml, 11.6 mmol), NaO*t*-Bu (55.6 g, 578.4 mmol)을 첨가하고 80°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축 한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 Sub1-2 60 g (수율: 81%)을 얻었다.

[116]

[117] **2. Sub 1-9** 합성예

[118] <반응식 4>



Sub 1-I-9 Sub1-9

[119] **(1) Sub 1-I-9**

[120] Aldrich에서 구매한 출발물질인 1-(tert-butyl)-3-chlorobenzene (CAS No. 3972-55-2) (35 g, 207.5 mmol), bromine (33.2 g, 207.5 mmol)에 MC(400 mL)에 첨가해 실온에서 교반하고, 상기 Sub1-I-2합성법을 통해 생성물 Sub 1-I-13 43 g (수율: 83.7%)을 얻었다.

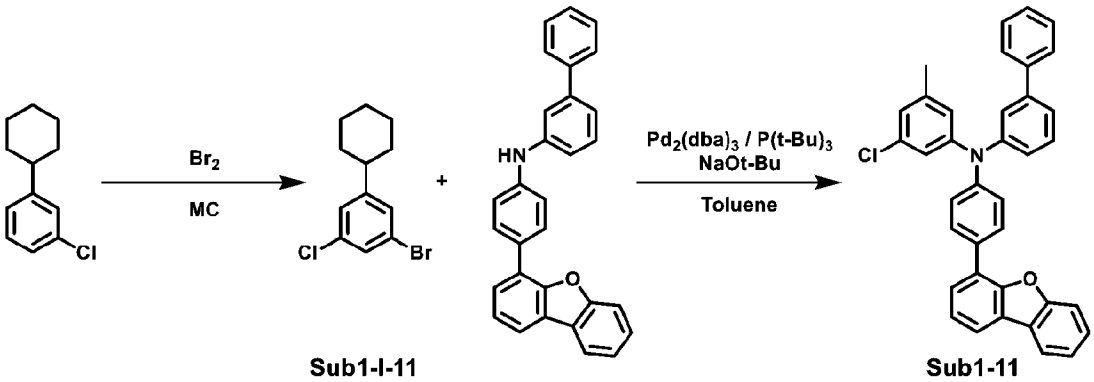
[121] **(2)** Sub1-9합성

[122] N-([1,1'-biphenyl]-4-yl)naphtho[2,1-b]benzofuran-9-amine (19 g, 14.86 mmol), Sub1-I-9 (8.3 g, 49.3 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.3 g, 1.5 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.2 ml, 3.0 mmol), NaO*t*-Bu (14.2 g, 147.9 mmol)을 toluene(250mL)에 첨가해 80 °C에서 교반하고, 상기 Sub1-2합성법을 통해 생성물 Sub 1-9 23 g (수율: 84.5%)을 얻었다.

[123]

[124] **3. Sub 1-11** 합성예

[125] <반응식 5>



Sub1-I-11 Sub1-11

[126] **(1) Sub 1-I-11**

[127] Ark Pham에서 구매한 출발물질인 1-Chloro-3-cyclohexylbenzene (CAS No. 27163-66-2) (45 g, 355.5 mmol), bromine (56.8 g, 355.5 mmol)을 MC(450 mL)에 첨가해 실온에서 교반하고, 상기 Sub1-I-2합성법을 통해 Sub 1-I-11 56 g (수율: 76.6%)을 얻었다.

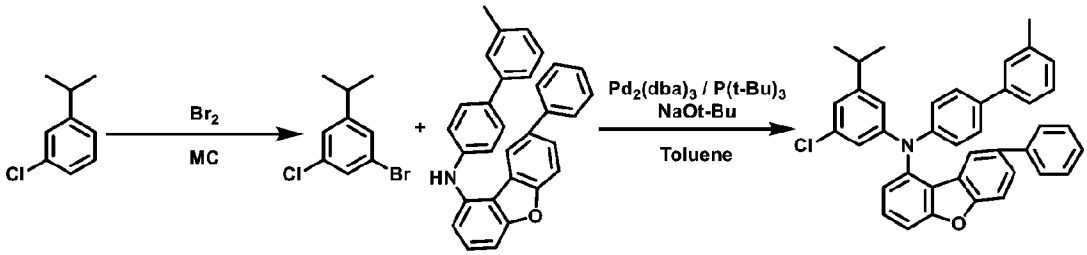
[128] **(2)** Sub1-11합성

[129] N-(4-(dibenzo[b,d]furan-4-yl)phenyl)-[1,1'-biphenyl]-3-amine (30 g, 72.9 mmol), Sub 1-I-11 (15.0 g, 72.9 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (2.0 g, 2.2 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.7 ml, 4.4 mmol), NaO*t*-Bu (21.0 g, 218.7 mmol)을 toluene(150mL)에 첨가해 80°C에서 교반하고, 상기 Sub1-2합성법을 통해 생성물 Sub 1-11 36 g (수율: 92.1%)을 얻었다.

[130]

[131] **4. Sub 1-13** 합성예

[132] <반응식 6>



Sub1-I-13 Sub1-13

[133] **(1) Sub 1-I-13**

[134] Aldrich에서 구매한 출발물질인 1-chloro-3-isopropylbenzene (CAS No. 7073-93-0) (47 g, 303.9 mmol), bromine (48.6 g, 303.9 mmol)을 MC(500 mL)에 첨가해 실온에서 교반하고, 상기 Sub1-I-2합성법을 통해 생성물 Sub 1-I-13 45 g (수율: 72.1%)을 얻었다.

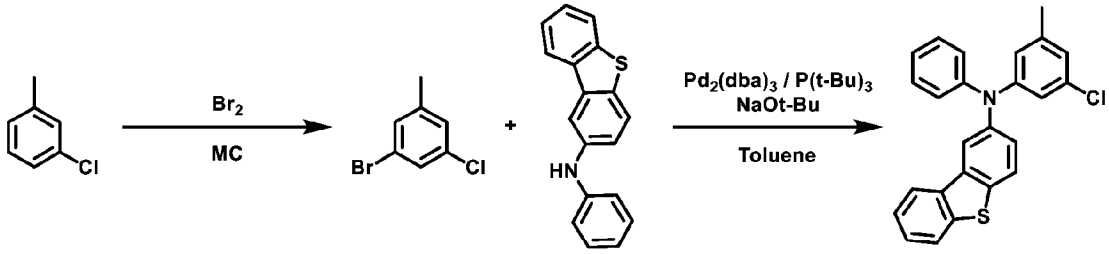
[135] **(2)** Sub1-13합성

[136] N-(3'-methyl-[1,1'-biphenyl]-4-yl)-8-phenyldibenzo[b,d]furan-1-amine (20 g, 47.0 mmol), Sub1-I-13 (11.0 g, 47.0 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.3 g, 1.4 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.1 ml, 2.8 mmol), NaO*t*-Bu (13.6 g, 105.5 mmol)을 toluene(110mL)에 첨가해 80°C에서 교반하고, 상기 Sub1-2합성법을 통해 생성물 Sub 1-13 23 g (수율: 84.6%)을 얻었다.

[137]

[138] **5. Sub 1-16** 합성예

[139] <반응식 7>



Sub 1-I-16 Sub1-16

[140] **(1)** Sub1-I-16

[141] Aldrich에서 구매한 출발물질인 1-chloro-3-methylbenzene (CAS No. 108-41-8) (36 g, 284.4 mmol), bromine (45.5 g, 284.4 mmol)을 MC(320 mL)에 첨가해 실온에서 교반하고, 상기 Sub1-2합성법을 통해 생성물 Sub 1-I-16 49 g (수율: 83.8%)을 얻었다..

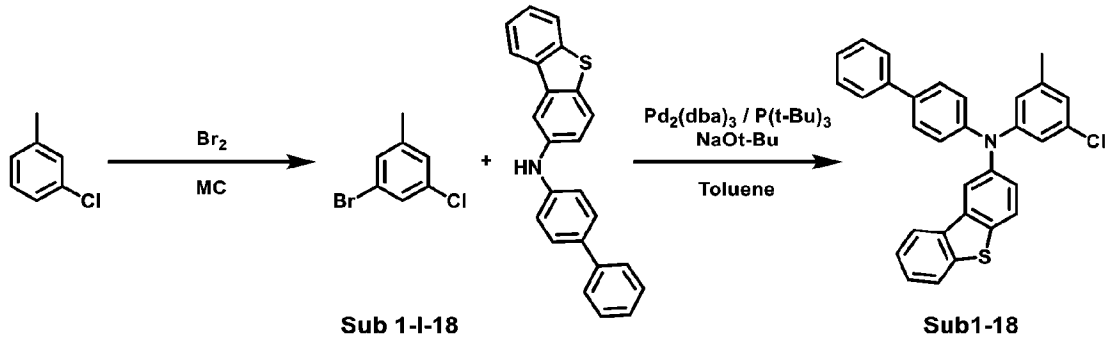
[142] **(2)** Sub1-16합성

[143] N-phenyldibenzo[b,d]thiophen-2-amine (20 g, 72.6 mmol), Sub1-I-16 (14.9 g, 72.6 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (2.0 g, 2.2 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.7 ml, 4.4 mmol), NaO*t*-Bu (20.9 g, 217.9 mmol)을 toluene(270 mL)에 첨가해 80°C에서 교반하고, 상기 Sub1-2 합성법을 통해 생성물 Sub 1-16 26.1 g (수율: 89.9%)을 얻었다.

[144]

[145] **6. Sub 1-18** 합성예

[146] <반응식 8>



[147] **(1)** Sub1-I-18

[148] Aldrich에서 구매한 출발물질인 1-chloro-3-methylbenzene (CAS No. 108-41-8) (41 g, 323.9 mmol), bromine (51.8 g, 323.9 mmol)을 MC(380 mL)에 첨가해 실온에서 교반하고, 상기 Sub1-2합성법을 통해 생성물 Sub 1-I-18 51 g (수율: 76.6%)을 얻었다.

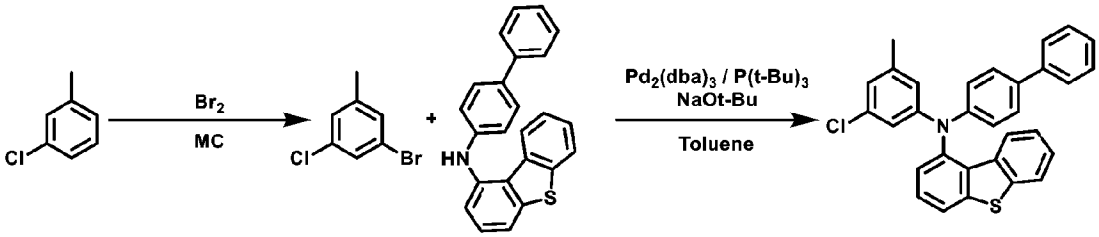
[149] **(1)** Sub1-18합성

[150] N-([1,1'-biphenyl]-4-yl)dibenzo[b,d]thiophen-2-amine (25 g, 71.1 mmol), Sub1-I-18 (14.6 g, 71.1 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (2.0 g, 2.1 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.7 ml, 4.3 mmol), NaO*t*-Bu (20.5 g, 213.4 mmol)을 toluene(240 mL)에 첨가해 80°C에서 교반하고, 상기 Sub1-2합성법을 통해 생성물 Sub 1-18 25 g (수율: 87.9%)을 얻었다.

[151]

[152] **7. Sub 1-20** 합성예

[153] <반응식 9>



Sub1-I-20 Sub1-20

[154] **(1) Sub 1-I-20**

[155] Aldrich에서 구매한 출발물질인 1-chloro-3-methylbenzene (CAS No. 108-41-8) (40 g, 317.8 mmol), bromine (51.0 g, 317.8 mmol)을 MC(410 mL)에 첨가해 실온에서 교반하고, 상기 Sub1-2합성법을 통해 생성물 Sub 1-I-20 48 g (수율: 75.6%)을 얻었다.

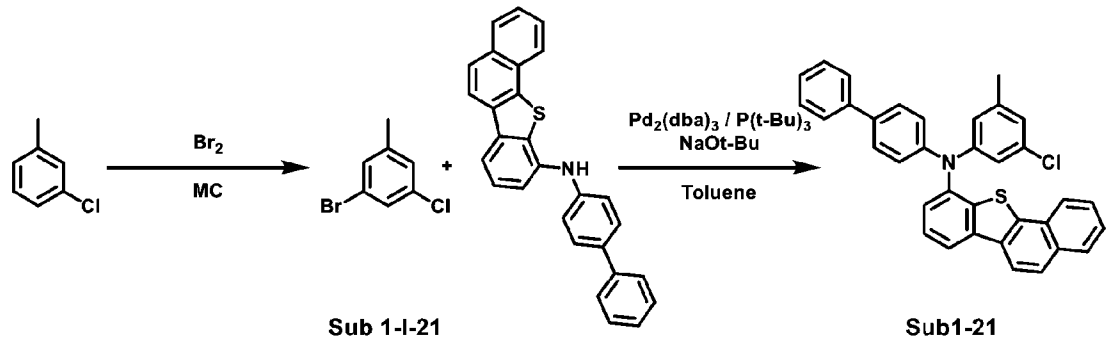
[156] **(2)** Sub1-20합성

[157] N-([1,1'-biphenyl]-4-yl)dibenzo[b,d]thiophen-1-amine (28 g, 136.3 mmol), Sub1-I-20 (47.9 g, 136.3 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (3.7 g, 4.1 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.7 ml, 8.2 mmol), NaO*t*-Bu (39.3 g, 408.8 mmol)을 toluene(300mL)에 첨가해 80°C에서 교반하고, 상기 Sub1-I-1합성법을 통해 생성물 Sub 1-20 50 g (수율: 77.1%)을 얻었다.

[158]

[159] **8. Sub 1-21** 합성예

[160] <반응식 10>



Sub 1-I-21 Sub1-21

[161] **(1) Sub 1-I-21**

[162] Aldrich에서 구매한 출발물질인 1-chloro-3-methylbenzene (CAS No. 108-41-8) (37 g, 292.3 mmol), bromine (46.7 g, 292.3 mmol)을 MC(410 mL)에 첨가해 실온에서 교반하고, 상기 Sub1-2합성법을 통해 생성물 Sub 1-21 49 g (수율: 81.6%)을 얻었다.

[163] **(2)** Sub1-21합성

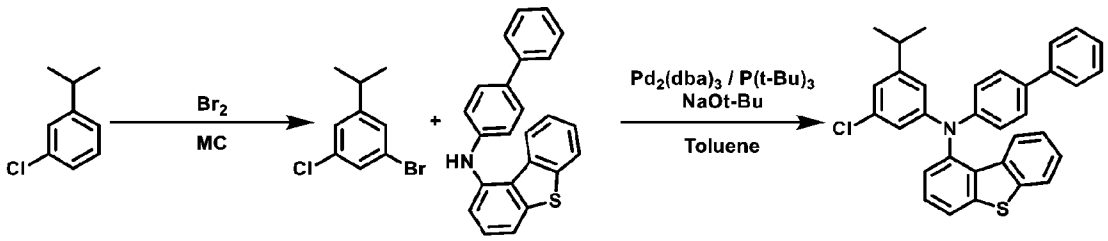
[164] N-([1,1'-biphenyl]-4-yl)benzo[b]naphtho[2,1-d]thiophen-10-amine (27 g, 67.2 mmol), Sub1-I-21 (13.8 g, 67.2 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.8 g, 2.0 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.6

ml, 4.0 mmol), NaO*t*-Bu (19.4 g, 201.7 mmol)을 toluene(200mL)에 첨가해 80°C에서 교반하고, 상기 Sub1-I-1합성법을 통해 생성물 Sub 1-21 26 g (수율: 85%)를 얻었다.

[165]

[166] **9. Sub 1-23** 합성예

[167] <반응식 11>



Sub1-I-23 Sub1-23

[168] **(1) Sub 1-I-23**

[169] Aldrich에서 구매한 출발물질인 1-chloro-3-isopropylbenzene (CAS No. 7073-93-0) (41 g, 256.1 mmol), bromine (42.4 g, 256.1 mmol)을 MC(490 mL)에 첨가해 실온에서 교반하고, 상기 Sub1-I-2합성법을 통해 생성물 Sub 1-I-23 49 g (수율: 79.1%)을 얻었다.

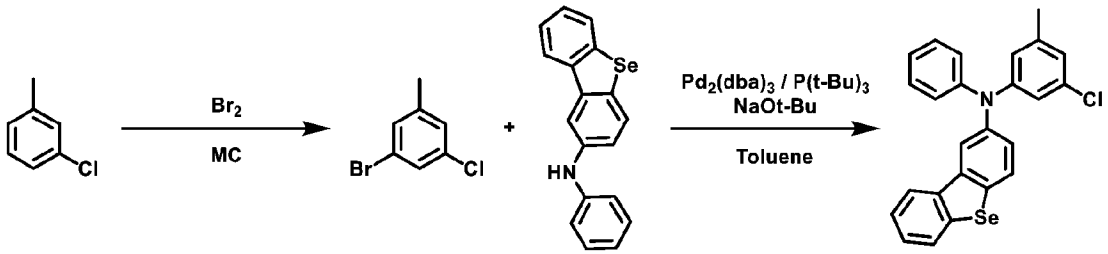
[170] **(2)** Sub1-23합성

[171] N-([1,1'-biphenyl]-4-yl)dibenzo[b,d]thiophen-1-amine (25 g, 71.1 mmol), Sub1-I-23 (16.6 g, 71.1 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (2.0 g, 2.1 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.7 ml, 4.3 mmol), NaO*t*-Bu (20.5 g, 213.4 mmol)을 toluene(230 mL)에 첨가해 80°C에서 교반하고, 상기 Sub1-2합성법을 통해 생성물 Sub 1-23 49 g (수율: 79.1%)을 얻었다.

[172]

[173] **10. Sub 1-25** 합성예

[174] <반응식 12>



Sub 1-I-25 Sub1-25

[175] **(1) Sub 1-I-25**

[176] Aldrich에서 구매한 출발물질인 1-chloro-3-methylbenzene (CAS No. 108-41-8) (56 g, 442.4 mmol), bromine (70.7 g, 442.4 mmol)을 MC(600 mL)에 첨가해 실온에서 교반하고, 상기 Sub1-2합성법을 통해 생성물 Sub 1-I-25 75 g (수율: 72.6%)을 얻었다.

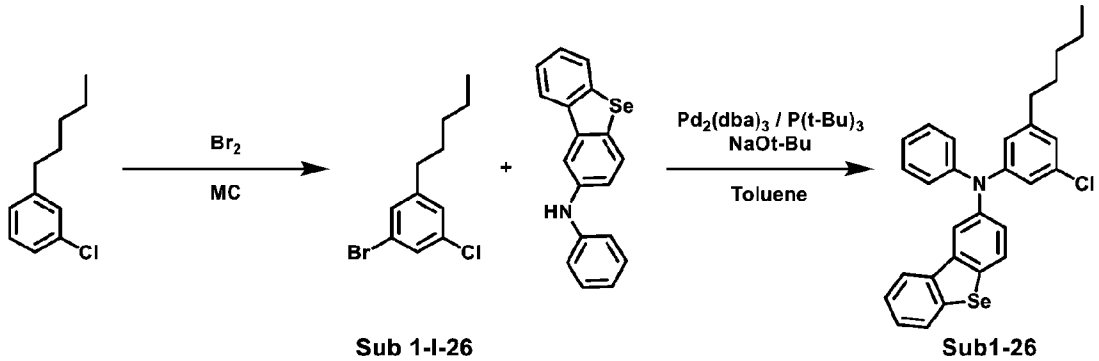
[177] **(2)** Sub1-25합성

[178] N-phenyldibenzo[b,d]selenophen-2-amine (30 g, 93.1 mmol), 1-bromo-3-chloro-5-methylbenzene (19.1 g, 93.1 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (2.6 g, 2.8 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (2.3 ml, 5.6 mmol), NaO*t*-Bu (26.9 g, 279.3 mmol)을 toluene(280 mL)에 첨가해 80°C에서 교반하고, 상기 Sub1-2합성법을 통해 생성물 Sub 1-25 34 g (수율: 81.7%)을 얻었다.

[179]

[180] **11. Sub 1-26** 합성예

[181] <반응식 13>



Sub 1-I-26 Sub1-26

[182] **(1) Sub 1-I-26**

[183] 출발물질인 1-chloro-3-pentylbenzene (CAS No. 156778-42-6) (59 g, 323.0 mmol), bromine (51.6 g, 323.0 mmol)을 MC(580 mL)에 첨가해 실온에서 교반하고, 상기 Sub1-2합성법을 통해 생성물 Sub 1-I-26 61 g (수율: 72.1%)을 얻었다.

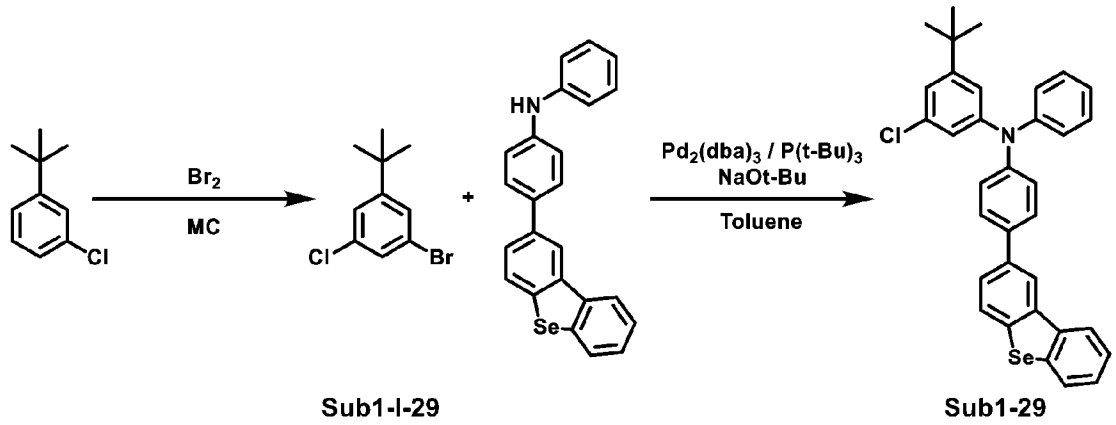
[184] **(2)** Sub1-26합성

[185] N-phenyldibenzo[b,d]selenophen-2-amine (30 g, 93.1 mmol), Sub1-I-26 (19.1 g, 93.1 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (2.6 g, 2.8 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (2.3 ml, 5.6 mmol), NaO*t*-Bu (24.4 g, 279.3 mmol)을 toluene(280 mL)에 첨가해 80°C에서 교반하고, 상기 Sub1-2합성법을 통해 생성물 Sub 1-26 37 g (수율: 79.0 %)을 얻었다.

[186]

[187] **12. Sub 1-29** 합성예

[188] <반응식 14>



Sub1-I-29 Sub1-29

[189] **(1) Sub 1-I-29**

[190] Aldrich에서 구매한 출발물질인 1-(tert-butyl)-3-chlorobenzene (CAS No. 3972-55-2) (42 g, 249.0 mmol), bromine (39.8 g, 249.0 mmol)을 MC(290 mL)에 첨가해실온에서 교반하고, 상기 Sub1-I-2합성법을 통해 생성물 Sub 1-I-29 56 g (수율: 90.8%)을 얻었다.

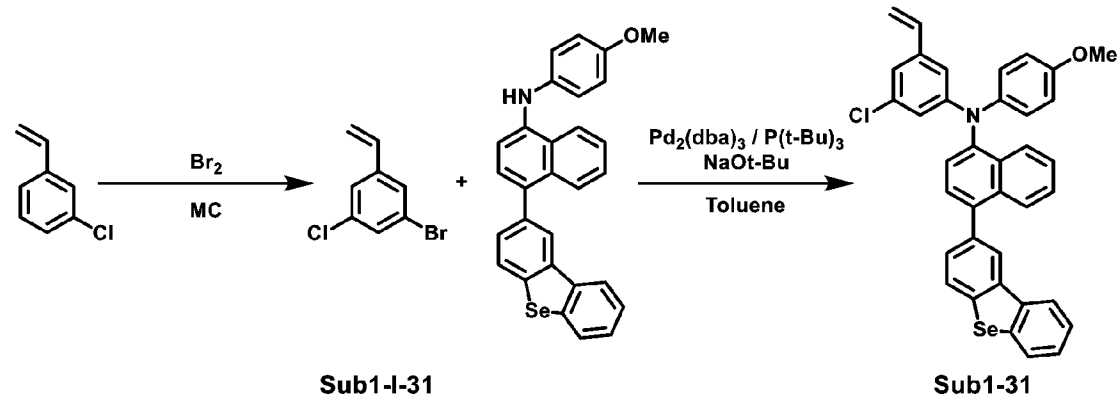
[191] **(2)** Sub1-29합성

[192] 4-(dibenzo[b,d]selenophen-2-yl)-N-phenylaniline (23 g, 57.7 mmol), Sub1-I-29 (14.3 g, 57.7 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.6 g, 1.7 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.4 ml, 3.5 mmol), NaO*t*-Bu (16.7 g, 173.2 mmol)을 toluene(150mL)에 첨가해 80°C에서 교반하고, 상기 Sub1-2합성법을 통해 생성물 Sub1-29 28 g (수율: 86.3%)을 얻었다.

[193]

[194] **13. Sub 1-31** 합성예

[195] <반응식 15>



Sub1-I-31 Sub1-31

[196] **(1) Sub 1-I-31**

[197] Aldrich에서 구매한 출발물질인 3-Chlorostyrene (CAS No. 2039-85-2) (43 g, 310.3 mmol), bromine (49.6 g, 310.3 mmol)을 MC(440 mL)에 첨가해 실온에서 교반하고, 상기 Sub1-I-2합성법을 통해 생성물 Sub 1-I-31 59 g (수율: 87.4%)을 얻었다.

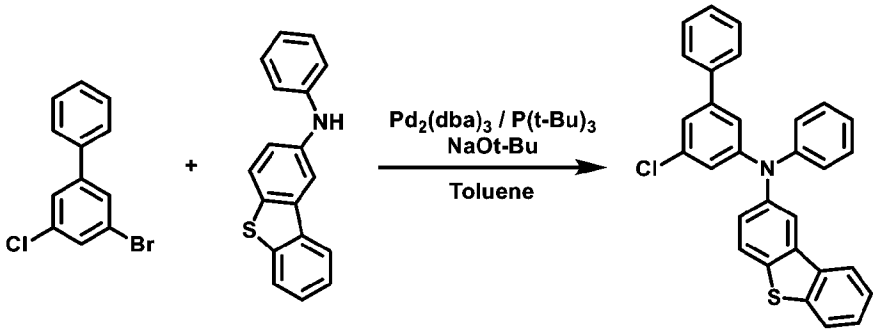
[198] **(2)** Sub1-31합성

[199] 4-(dibenzo[b,d]selenophen-2-yl)-N-(4-methoxyphenyl)naphthalen-1-amine (20 g, 41.8 mmol), Sub1-I-31 (9.1 g, 41.8 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.1 g, 1.3 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.0 ml, 2.5 mmol), NaO*t*-Bu (12.1 g, 125.4 mmol)을 toluene(230 mL)에 첨가해 80°C에서 교반하고, 상기 Sub1-2합성법을 통해 생성물 Sub1-31 21 g (수율: 81.7%)을 얻었다.

[200]

[201] **14. Sub 1-32** 합성예

[202] <반응식 16>



Sub1-32

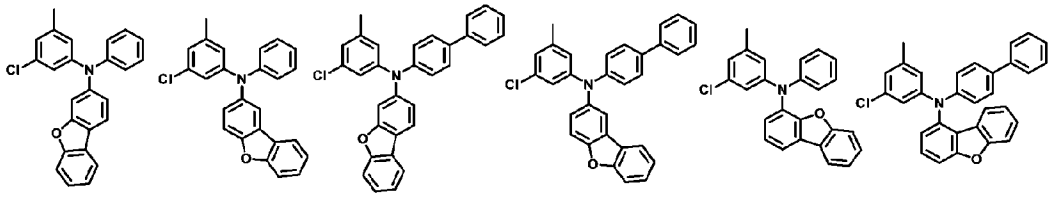
[203] N-phenyldibenzo[b,d]thiophen-2-amine (20.6 g, 74.6 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (2.1 g, 2.2 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (2.1 ml, 4.5 mmol), NaO*t*-Bu (21.6 g, 224.5 mmol)을 toluene(190 mL)에 첨가해 80°C에서 교반하고, 상기 Sub1-2 합성법을 통해 생성물 Sub1-32 31 g (수율: 89.8%)을 얻었다.

[204]

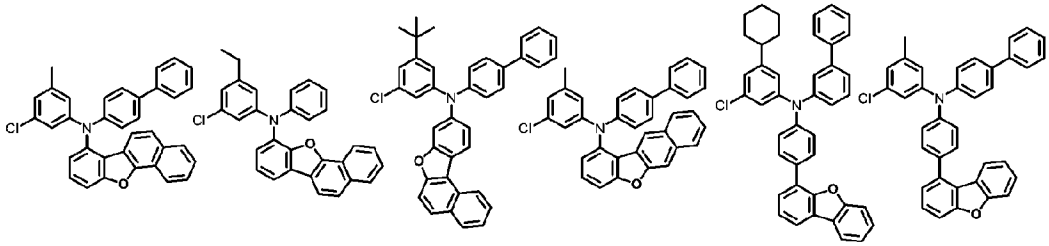
[205] **Sub 1의 예시**

[206] Sub 1의 예시는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 하기의 표 1은 sub 1 예시 화합물의 FD-MS 값을 나타낸 것이다.

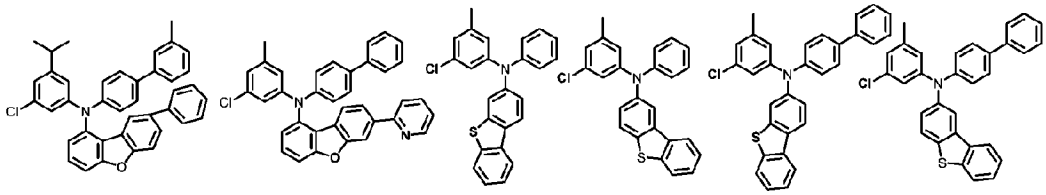
[207]



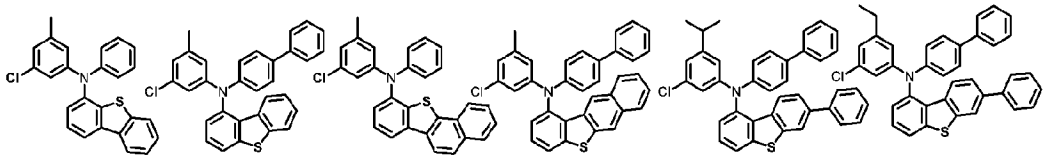
Sub1-1 Sub1-2 Sub1-3 Sub1-4 Sub1-5 Sub1-6



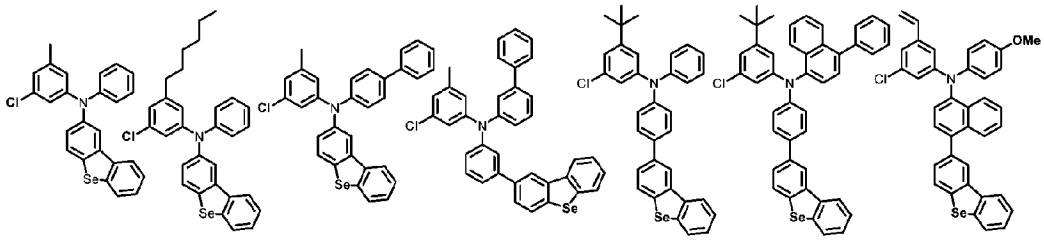
Sub1-7 Sub1-8 Sub1-9 Sub1-10 Sub1-11 Sub1-12



Sub1-13 Sub1-14 Sub1-15 Sub1-16 Sub1-17 Sub1-18



Sub1-19 Sub1-20 Sub1-21 Sub1-22 Sub1-23 Sub1-24



Sub1-25 Sub1-26 Sub1-27 Sub1-28 Sub1-29 Sub1-30 Sub1-31

[208] [표1]

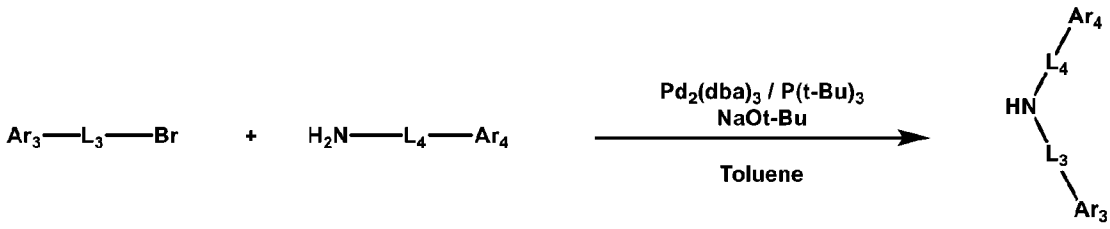
화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 1-1	m/z=383.11 ($C_{25}H_{18}ClNO$=383.88)	Sub 1-2	m/z=383.11 ($C_{25}H_{18}ClNO$=383.88)
Sub 1-3	m/z=459.14 ($C_{31}H_{22}ClNO$=459.97)	Sub 1-4	m/z=459.14 ($C_{31}H_{22}ClNO$=459.97)
Sub 1-5	m/z=383.11 ($C_{25}H_{18}ClNO$=383.88)	Sub 1-6	m/z=459.14 ($C_{31}H_{22}ClNO$=459.97)
Sub 1-7	m/z=509.15 ($C_{35}H_{24}ClNO$=510.03)	Sub 1-8	m/z=447.14 ($C_{30}H_{22}ClNO$=447.96)
Sub 1-9	m/z=551.20 ($C_{38}H_{30}ClNO$=552.11)	Sub 1-10	m/z= 509.15 ($C_{35}H_{24}ClNO$=510.03)
Sub 1-11	m/z=603.23 ($C_{42}H_{34}ClNO$=604.19)	Sub 1-12	m/z=535.17 ($C_{37}H_{26}ClNO$=536.07)
Sub 1-13	m/z=577.22 ($C_{40}H_{32}ClNO$=578.15)	Sub 1-14	m/z=536.17 ($C_{36}H_{25}ClN_2O$=537.06)
Sub 1-15	m/z=399.08 ($C_{25}H_{18}ClNS$=399.94)	Sub 1-16	m/z=399.08 ($C_{25}H_{18}ClNS$= 399.94)
Sub 1-17	m/z=475.12 ($C_{31}H_{22}ClNS$=476.03)	Sub 1-18	m/z=475.12 ($C_{31}H_{22}ClNS$=476.03)
Sub 1-19	m/z=399.08 ($C_{25}H_{18}ClNS$=399.94)	Sub 1-20	m/z=475.12 ($C_{31}H_{22}ClNS$=476.03)
Sub 1-21	m/z=449.10 ($C_{29}H_{20}ClNS$=450.00)	Sub 1-22	m/z=525.13 ($C_{35}H_{24}ClNS$=526.09)
Sub 1-23	m/z=579.18 ($C_{39}H_{30}ClNS$=580.19)	Sub 1-24	m/z=565.16 ($C_{38}H_{28}ClNS$=566.16)
Sub 1-25	m/z=447.03 ($C_{25}H_{18}ClNSe$=446.84)	Sub 1-26	m/z=517.11 ($C_{30}H_{28}ClNSe$=516.97)
Sub 1-27	m/z=523.06 ($C_{31}H_{22}ClNSe$=522.93)	Sub 1-28	m/z=599.09 ($C_{37}H_{26}ClNSe$=599.03)
Sub 1-29	m/z=565.11 ($C_{34}H_{28}ClNSe$=565.02)	Sub 1-30	m/z=599.09 ($C_{37}H_{26}ClNSe$=599.03)
Sub 1-31	m/z=565.11 ($C_{34}H_{28}ClNSe$=565.02)		

[209]

[210] **I. Sub 2의 합성**

[211] 상기 반응식 1의 Sub 2은 하기 반응식 17의 반응경로에 의해 합성될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[212] <반응식 17>



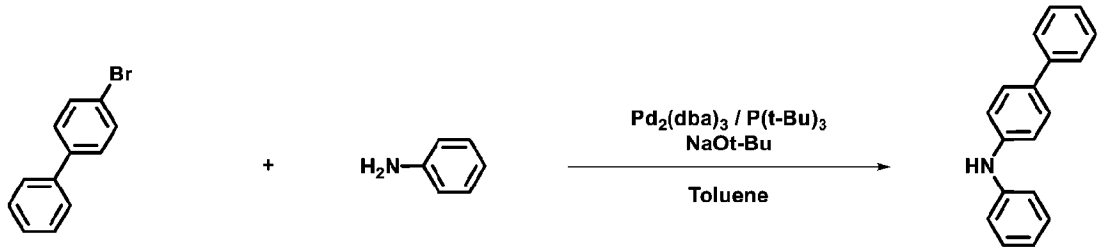
Sub 2

[213] Sub 2에 속하는 구체적 화합물의 합성예는 다음과 같다.

[214]

[215] **1. Sub 2-3** 합성예

[216] <반응식 18>



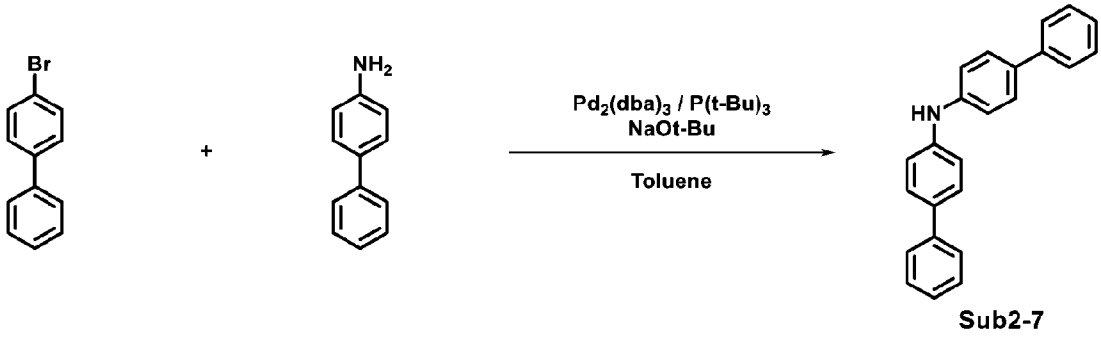
Sub2-3

[217] 출발물질인 3-bromo-1,1'-biphenyl (51 g, 218.8 mmol)에 aniline (30.6 g, 328.2 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (6.0 g, 6.6 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (5.4ml, 13.1 mmol), NaO*t*-Bu (63.1 g, 656.3 mmol), toluene (500ml)을 첨가해 80°C에서 교반하고, 상기 Sub1-2합성법을 통해 생성물Sub2-3 43.0 g (수율: 80.1%)을 얻었다.

[218]

[219] **2. Sub 2-7** 합성예

[220] <반응식 19>



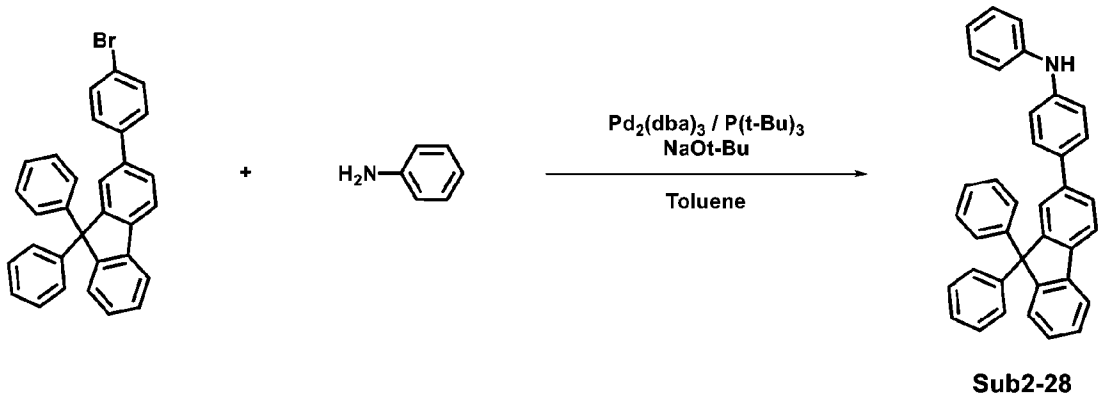
Sub2-7

[221] 출발물질인 4-bromo-1,1'-biphenyl (45 g, 193.0 mmol)에 [1,1'-biphenyl]-4-amine (49.0 g, 289.6 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (5.3 g, 5.8 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (4.7ml, 11.6 mmol), NaO*t*-Bu (55.7 g, 579.6 mmol), toluene (300ml)을 첨가하고 상기 Sub1-2합성법을 통해 생성물 Sub2-7 45 g (수율: 72.5%)을 얻었다.

[222]

[223] **3. Sub 2-28** 합성예

[224] <반응식 20>



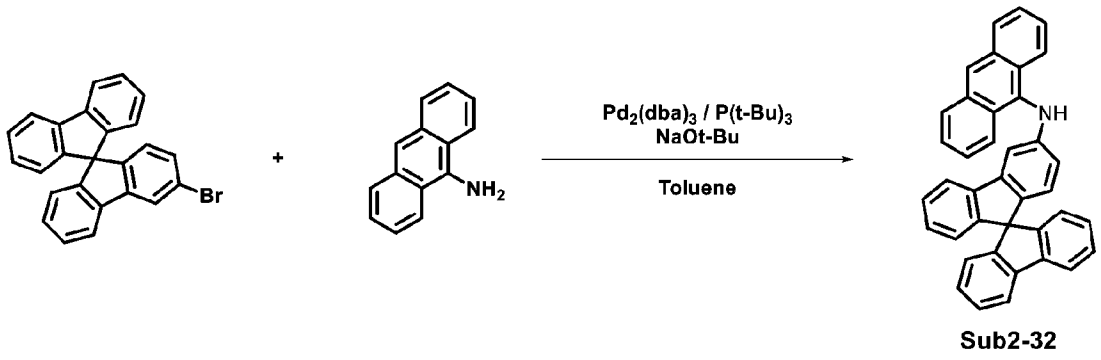
Sub2-28

[225] 출발물질인 2-(4-bromophenyl)-9,9-diphenyl-9H-fluorene (30.0 g, 63.4 mmol)을 둥근바닥플라스크에 toluene (250ml)으로 녹인 후에, aniline (8.9 g, 95.1 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.7 g, 1.9 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.5 ml, 3.8 mmol), NaO*t*-Bu (18.3 g, 190.1 mmol)을 첨가하고 상기 Sub 1-2 합성법을 통해 Sub2-28 23 g (수율: 74.7%)을 얻었다.

[226]

[227] **4. Sub 2-32** 합성예

[228] <반응식 21>



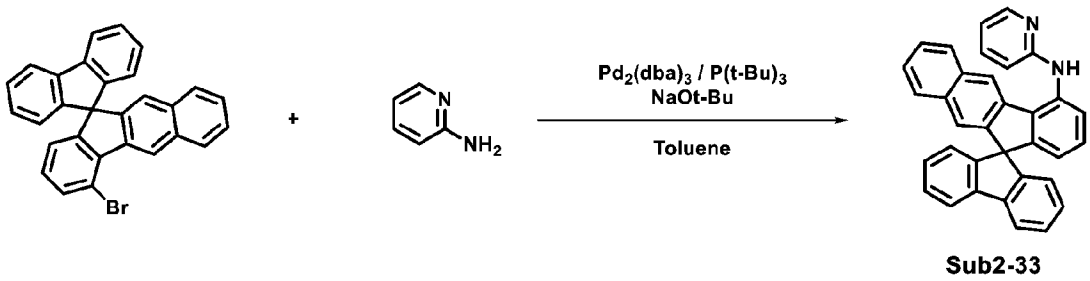
Sub2-32

[229] 출발물질인 3-bromo-9,9'-spirobi[fluorene] (25 g, 63.2 mmol)에 anthracen-9-amine (18.3 g, 94.9 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.7 g, 1.9 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.5ml, 3.8 mmol), NaO*t*-Bu (18.2 g, 189.7 mmol), toluene (240ml)을 첨가하고 상기 Sub1-2 합성법을 통해 생성물 Sub2-32 22 g (수율: 65.8%)을 얻었다.

[230]

[231] **5. Sub 2-33** 합성예

[232] <반응식 22>



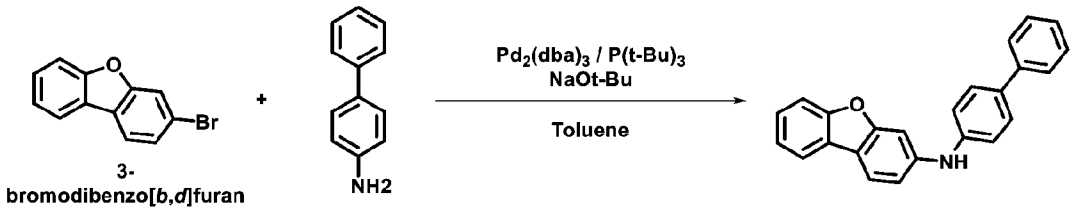
Sub2-33

[233] 출발물질인 4-bromospiro[benzo[b]fluorene-11,9'-fluorene] (21.0 g, 47.2 mmol)에 pyridin-2-amine (6.7 g, 70.7 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.3 g, 1.4 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.1ml, 2.8 mmol), NaO*t*-Bu (13.6 g, 141. 5 mmol), toluene (315ml)을 첨가하고 상기 Sub1-2 합성법을 통해 생성물 Sub2-33 19 g (수율: 79.4%)을 얻었다.

[234]

[235] **6. Sub 2-37** 합성예

[236] <반응식 23>



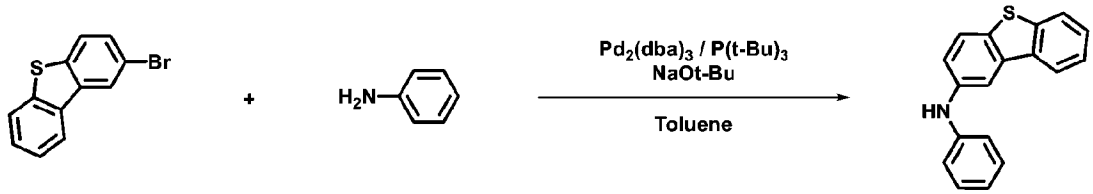
Sub2-37

[237] 출발물질인 3-bromodibenzo[b,d]furan (35.0 g, 141.6 mmol)에 [1,1'-biphenyl]-4-amine (6.7 g, 212.5 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (3.9 g, 4.2 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (3.9ml, 8.5 mmol), NaO*t*-Bu (40.9 g, 424.9 mmol), toluene (515ml)을 첨가하고 상기 Sub1-2 합성법을 통해 생성물 Sub2-37 31 g (수율: 65.2%)을 얻었다.

[238]

[239] **7. Sub 2-51** 합성예

[240] <반응식 24>



Sub2-51

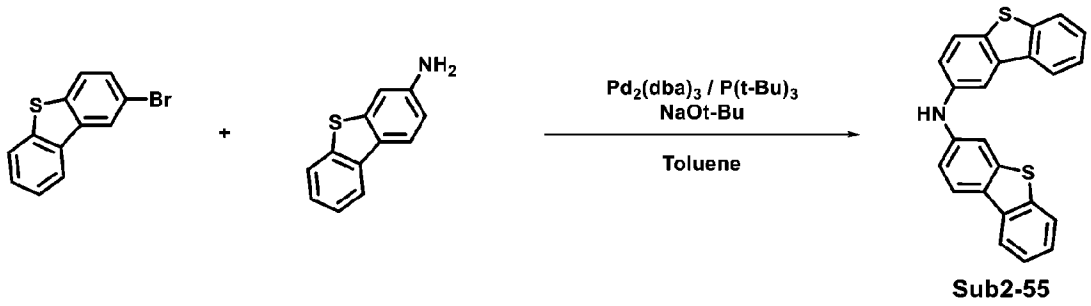
[241] 출발물질인 2-bromodibenzo[b,d]thiophene (30.0 g, 114.0 mmol)에 aniline (15.9 g, 171.0 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (3.1 g, 3.4 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (2.8ml, 6.8 mmol), NaO*t*-Bu (32.9 g, 342.0 mmol), toluene (400ml)을 첨가하고 상기 Sub1-2 합성법을 통해

생성물 Sub2-51 22 g (수율: 70.1%)을 얻었다.

[242]

[243] **8. Sub 2-55** 합성예

[244] <반응식 25>



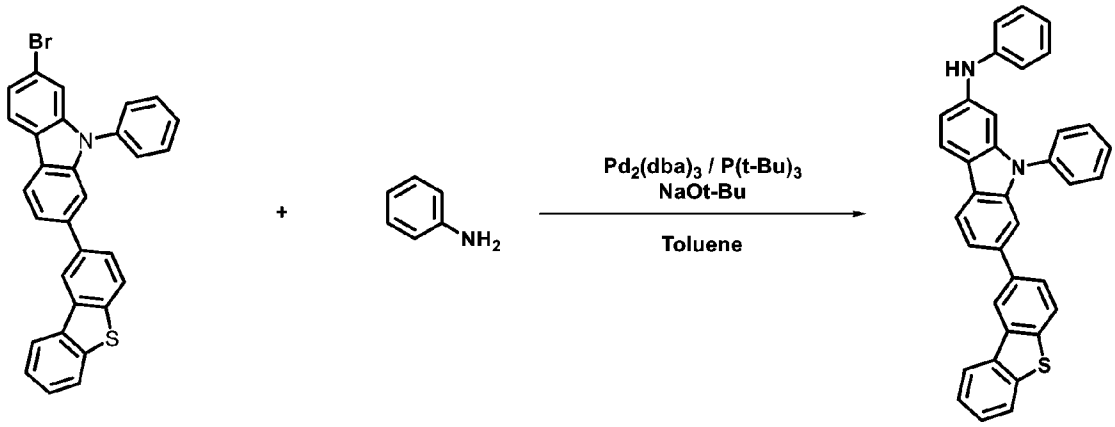
Sub2-55

[245] 출발물질인 2-bromodibenzo[b,d]thiophene (25.0 g, 95.0 mmol)에 pyridin-2-amine (28.4 g, 142.5 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (2.6 g, 2.9 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (2.3ml, 5.7 mmol), NaO*t*-Bu (27.4 g, 285.0 mmol), toluene (315ml)을 첨가하고 상기 Sub1-2 합성법을 통해 생성물 Sub2-55 19 g (수율: 79.4%)를 얻었다.

[246]

[247] **9. Sub 2-62** 합성예

[248] <반응식 26>



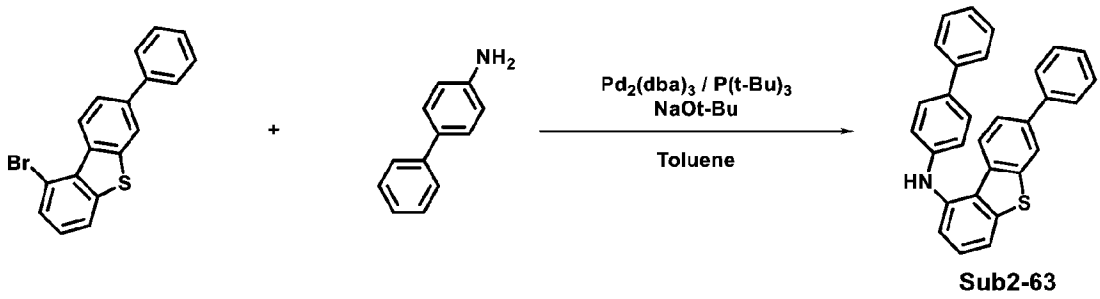
Sub2-62

[249] 출발물질인 2-bromo-7-(dibenzo[b,d]thiophen-2-yl)-9-phenyl-9H-carbazole (27.0 g, 53.5 mmol)에 aniline (7.5 g, 80.3 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.5 g, 1.6 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.3ml, 3.2 mmol), NaO*t*-Bu (15.4 g, 160.6 mmol), toluene (330ml)을 첨가하고 상기 Sub1-2 합성법을 통해 생성물 Sub2-62 22 g (수율: 79.6%)를 얻었다.

[250]

[251] **10. Sub 2-63** 합성예

[252] <반응식 27>



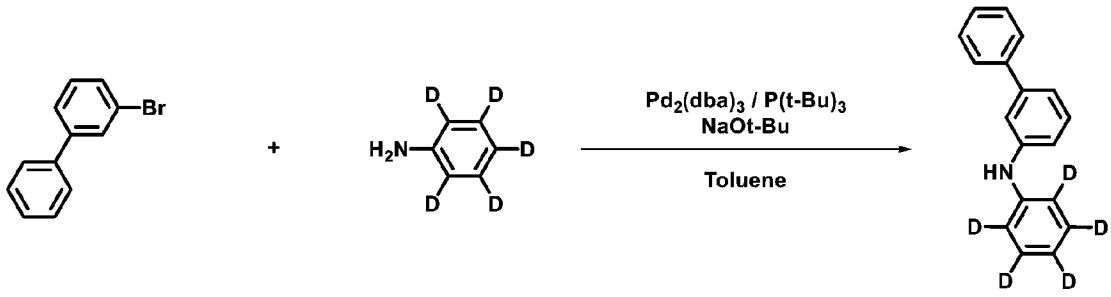
Sub2-63

[253] 출발물질인 1-bromo-7-phenyldibenzo[b,d]thiophene (28.0 g, 82.5 mmol)에 [1,1'-biphenyl]-4-amine (21.0 g, 123.8 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (2.3 g, 2.5 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (2.0ml, 5.0 mmol), NaO*t*-Bu (23.8 g, 247.6 mmol), toluene (420ml)을 첨가하고 상기 Sub1-2 합성법을 통해 생성물 Sub2-63 30 g (수율: 70.4%)을 얻었다.

[254]

[255] **11. Sub 2-74** 합성예

[256] <반응식 28>



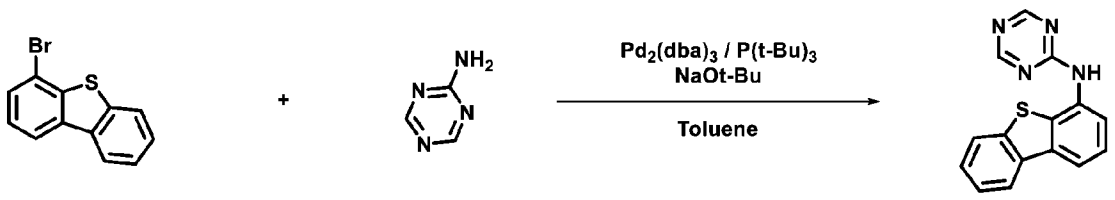
Sub2-74

[257] 출발물질인 3-bromo-1,1'-biphenyl (35.0 g, 150.1 mmol)에 benzen-d5-amine (22.1 g, 225.1 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (4.1 g, 4.5 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (3.6ml, 9.0 mmol), NaO*t*-Bu (43.3 g, 450.4 mmol), toluene (500ml)을 첨가하고 상기 Sub1-2 합성법을 통해 생성물 Sub2-74 25 g (수율: 66.5%)을 얻었다.

[258]

[259] **12. Sub 2-82** 합성예

[260] <반응식 29>



Sub2-82

[261] 출발물질인 4-bromodibenzo[b,d]thiophene (42.0 g, 159.6 mmol)에 1,3,5-triazin-2-amine (28.5 g, 239.4 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (4.4 g, 4.8 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$

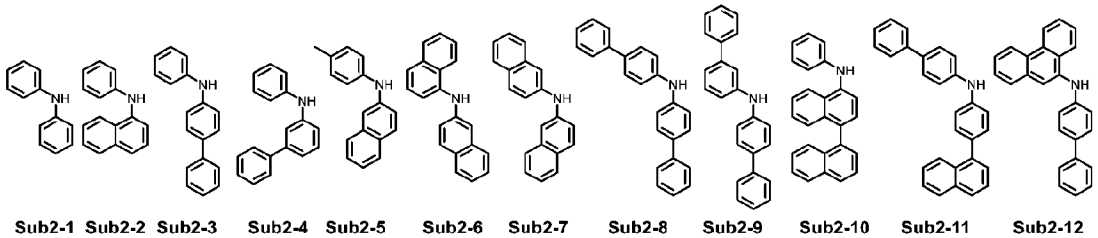
(4.0l, 9.6 mmol), NaO*t*-Bu (46.0 g, 478.8 mmol), toluene (510ml)을 첨가하고 상기 Sub1-2 합성법을 통해 생성물 Sub2-82 40 g (수율: 77.7%)을 얻었다.

[262]

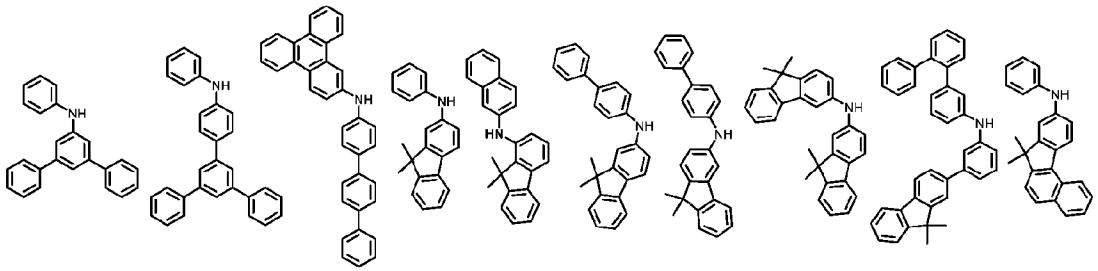
[263] **Sub 2의 예시**

[264] Sub 2의 예시는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 하기의 표 2는 sub 2 예시 화합물의 FD-MS 값을 나타낸 것이다.

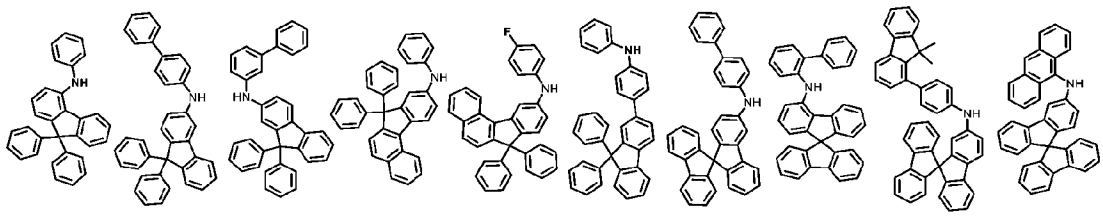
[265]



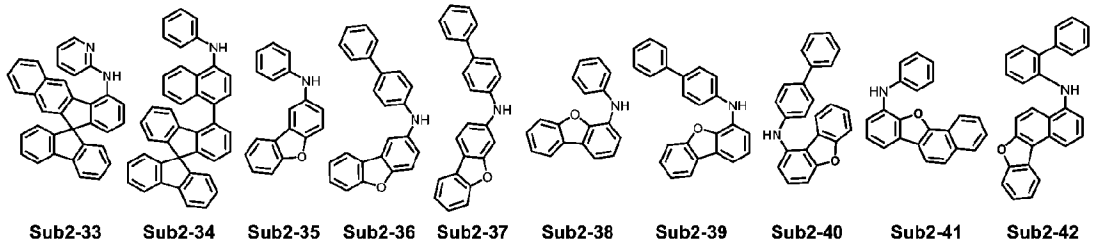
Sub2-1 Sub2-2 Sub2-3 Sub2-4 Sub2-5 Sub2-6 Sub2-7 Sub2-8 Sub2-9 Sub2-10 Sub2-11 Sub2-12



Sub2-13 Sub2-14 Sub2-15 Sub2-16 Sub2-17 Sub2-18 Sub2-19 Sub2-20 Sub2-21 Sub2-22

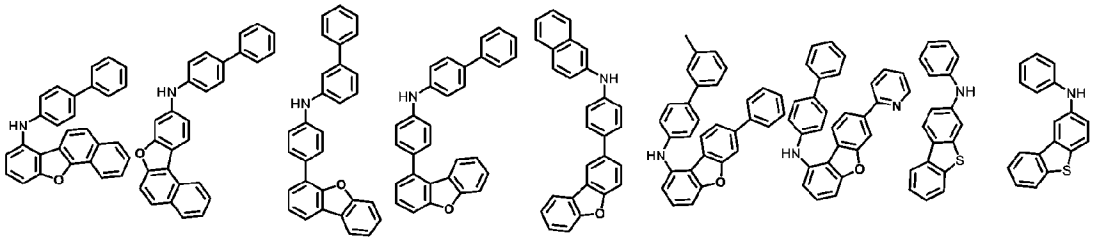


Sub2-22 Sub2-23 Sub2-24 Sub2-25 Sub2-26 Sub2-27 Sub2-28 Sub2-29 Sub2-30 Sub2-31

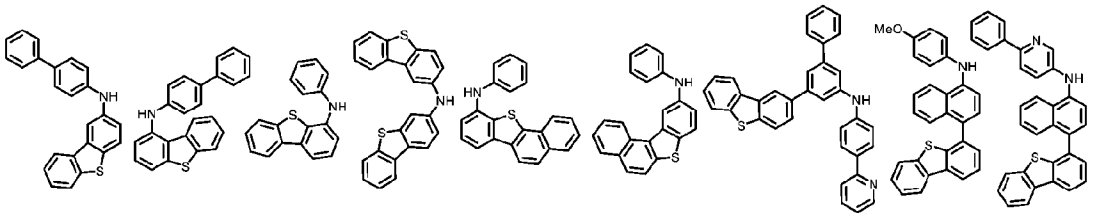


Sub2-33 Sub2-34 Sub2-35 Sub2-36 Sub2-37 Sub2-38 Sub2-39 Sub2-40 Sub2-41 Sub2-42

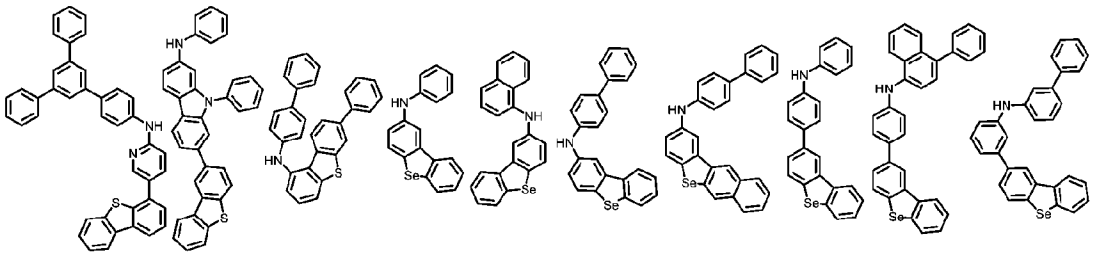
[266]



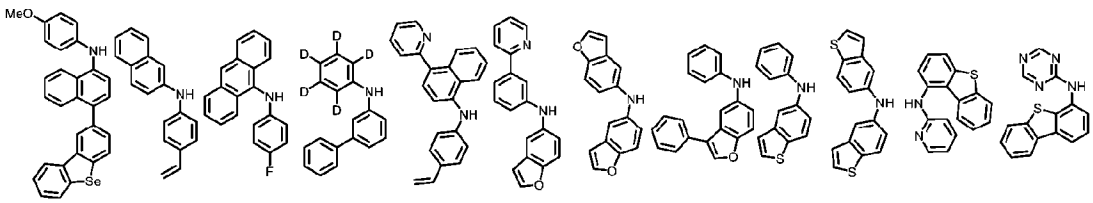
Sub2-43 Sub2-44 Sub2-45 Sub2-46 Sub2-47 Sub2-48 Sub2-49 Sub2-50 Sub2-51



Sub2-52 Sub2-53 Sub2-54 Sub2-55 Sub2-56 Sub2-57 Sub2-58 Sub2-59 Sub2-60



Sub2-61 Sub2-62 Sub2-63 Sub2-64 Sub2-65 Sub2-66 Sub2-67 Sub2-68 Sub2-69 Sub2-70



Sub2-71 Sub2-72 Sub2-73 Sub2-74 Sub2-75 Sub2-76 Sub2-77 Sub2-78 Sub2-79 Sub2-80 Sub2-81 Sub2-82

[267] [표2]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 2-1	m/z=169.09 ($C_{12}H_{11}N$=169.23)	Sub 2-2	m/z=219.29 ($C_{16}H_{13}N$=219.10)
Sub 2-3	m/z=245.12 ($C_{18}H_{15}N$=245.33)	Sub 2-4	m/z=245.12 ($C_{18}H_{15}N$=245.33)
Sub 2-5	m/z=269.12 ($C_{20}H_{15}N$= 269.35)	Sub 2-6	m/z=269.12 ($C_{20}H_{15}N$= 269.35)
Sub 2-7	m/z=269.12 ($C_{20}H_{15}N$= 269.35)	Sub 2-8	m/z=321.15 ($C_{24}H_{19}N$= 321.42)
Sub 2-9	m/z=321.15 ($C_{24}H_{19}N$= 321.42)	Sub 2-10	m/z=345.15 ($C_{26}H_{19}N$=345.45)
Sub 2-11	m/z=321.15 ($C_{24}H_{19}N$= 321.42)	Sub 2-12	m/z=345.15 ($C_{26}H_{19}N$=345.45)
Sub 2-13	m/z=321.15 ($C_{24}H_{19}N$= 321.42)	Sub 2-14	m/z=397.18 ($C_{30}H_{23}N$= 397.52)
Sub 2-15	m/z=471.20 ($C_{36}H_{25}N$= 471.60)	Sub 2-16	m/z=285.15 ($C_{21}H_{19}N$= 285.39)
Sub 2-17	m/z=335.17 ($C_{25}H_{21}N$=335.45)	Sub 2-18	m/z=361.18 ($C_{27}H_{23}N$=361.49)
Sub 2-19	m/z=361.18 ($C_{27}H_{23}N$= 361.49)	Sub 2-20	m/z=401.21 ($C_{30}H_{27}N$= 401.55)
Sub 2-21	m/z=513.25 ($C_{39}H_{31}N$=513.68)	Sub 2-22	m/z=335.17 ($C_{25}H_{21}N$= 335.45)
Sub 2-23	m/z=409.18 ($C_{31}H_{23}N$=409.53)	Sub 2-24	m/z=485.21 ($C_{37}H_{27}N$= 485.63)
Sub 2-25	m/z=485.21 ($C_{37}H_{27}N$=485.63)	Sub 2-26	m/z=459.20 ($C_{35}H_{25}N$= 459.59)
Sub 2-27	m/z=477.19 ($C_{35}H_{24}FN$= 477.58)	Sub 2-28	m/z=485.21 ($C_{37}H_{27}N$= 485.63)
Sub 2-29	m/z=483.20 ($C_{37}H_{25}N$= 483.61)	Sub 2-30	m/z=483.20 ($C_{37}H_{25}N$= 483.61)
Sub 2-31	m/z=599.26 ($C_{46}H_{33}N$= 599.78)	Sub 2-32	m/z=507.20 ($C_{39}H_{25}N$= 507.64)
Sub 2-33	m/z=458.18 ($C_{34}H_{22}N_2$= 458.56)	Sub 2-34	m/z=533.21 ($C_{41}H_{27}N$= 533.67)
Sub 2-35	m/z=259.10 ($C_{18}H_{13}NO$= 259.31	Sub 2-36	m/z=335.13 ($C_{24}H_{17}NO$= 335.41)
Sub 2-37	m/z=335.13 ($C_{24}H_{17}NO$= 335.41)	Sub 2-38	m/z=259.10 ($C_{18}H_{13}NO$= 259.31)
Sub 2-39	m/z=335.13 ($C_{24}H_{17}NO$= 335.41)	Sub 2-40	m/z=335.13 ($C_{24}H_{17}NO$= 335.41)
Sub 2-41	m/z=309.12 ($C_{22}H_{15}NO$= 309.37)	Sub 2-42	m/z=385.15 ($C_{28}H_{19}NO$= 385.47)
Sub 2-43	m/z=385.15 ($C_{28}H_{19}NO$= 385.47)	Sub 2-44	m/z=385.15 ($C_{28}H_{19}NO$= 385.47)
Sub 2-45	m/z=411.16 ($C_{30}H_{21}NO$= 411.50)	Sub 2-46	m/z=411.16 ($C_{30}H_{21}NO$= 411.50)
Sub 2-47	m/z=385.15 ($C_{28}H_{19}NO$= 385.47)	Sub 2-48	m/z=425.18 ($C_{31}H_{23}NO$= 425.53)
Sub 2-49	m/z=412.16 ($C_{29}H_{20}N_2O$= 412.49)	Sub 2-50	m/z=275.08 ($C_{18}H_{13}NS$= 275.37)
Sub 2-51	m/z=275.08 ($C_{18}H_{13}NS$= 275.37)	Sub 2-52	m/z=351.11 ($C_{24}H_{17}NS$= 351.47)
Sub 2-53	m/z=351.11 ($C_{24}H_{17}NS$= 351.47)	Sub 2-54	m/z=275.08 ($C_{18}H_{13}NS$= 275.37)
Sub 2-55	m/z=381.06 ($C_{24}H_{15}NS_2$= 381.51)	Sub 2-56	m/z=325.09 ($C_{22}H_{15}NS$= 325.43)
Sub 2-57	m/z=325.09 ($C_{22}H_{15}NS$= 325.43)	Sub 2-58	m/z=504.17 ($C_{35}H_{24}N_2S$= 504.65)

[268]

Sub 2-59	m/z=431.13 ($C_{29}H_{21}NOS$= 431.55)	Sub 2-60	m/z=478.15 ($C_{33}H_{22}N_2S$= 478.61)
Sub 2-61	m/z=580.20 ($C_{41}H_{28}N_2S$= 580.75)	Sub 2-62	m/z=516.17 ($C_{36}H_{24}N_2S$= 516.66)
Sub 2-63	m/z=427.14 ($C_{30}H_{21}NS$= 427.57)	Sub 2-64	m/z=323.02 ($C_{18}H_{13}NSe$= 322.27)
Sub 2-65	m/z=373.04 ($C_{22}H_{15}NSe$= 372.33)	Sub 2-66	m/z=399.05 ($C_{24}H_{17}NSe$= 398.37)
Sub 2-67	m/z=449.07 ($C_{28}H_{19}NSe$= 448.43)	Sub 2-68	m/z=399.05 ($C_{24}H_{17}NSe$= 398.37)
Sub 2-69	m/z=525.10 ($C_{34}H_{23}NSe$= 524.53)	Sub 2-70	m/z=475.08 ($C_{30}H_{21}NSe$= 474.47)
Sub 2-71	m/z=479.08 ($C_{29}H_{21}NOSe$= 478.45)	Sub 2-72	m/z=245.12 ($C_{18}H_{15}N$= 245.33)
Sub 2-73	m/z=287.11 ($C_{20}H_{14}FN$= 287.34)	Sub 2-74	m/z=250.15 ($C_{18}H_{10}D_5N$= 250.36)
Sub 2-75	m/z=322.15 ($C_{23}H_{18}N_2$= 322.41)	Sub 2-76	m/z=286.11 ($C_{19}H_{14}N_2O$= 286.33)
Sub 2-77	m/z=249.08 ($C_{16}H_{11}NO_2$= 249.27)	Sub 2-78	m/z=285.12 ($C_{20}H_{15}NO$= 285.35)
Sub 2-79	m/z=225.06 ($C_{14}H_{11}NS$= 225.31)	Sub 2-80	m/z=281.03 ($C_{16}H_{11}NS_2$= 281.39)
Sub 2-81	m/z=278.06 ($C_{15}H_{10}N_4S$= 278.33)	Sub 2-82	m/z=278.06 ($C_{15}H_{10}N_4S$= 278.33)

[269]

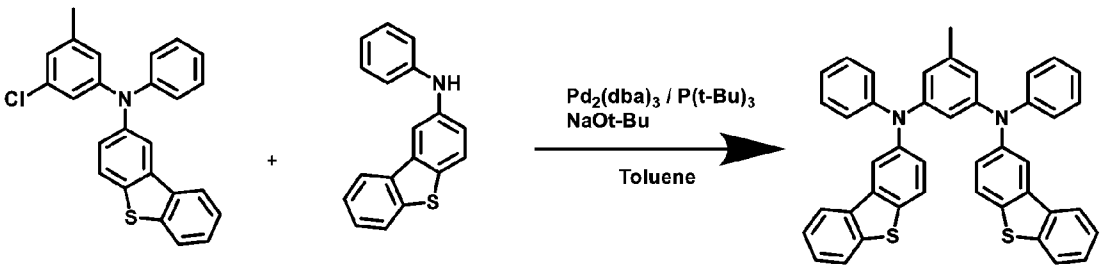
[270] **II. Final Product 합성**

[271] 둥근 바닥플라스크에 Sub 1 화합물(1당량), Sub 2 (1당량), $Pd_2(dba)_3$ (0.03당량), (t-Bu)3P (0.06당량), NaOt-Bu (3당량)을 Toluene에 넣어 녹인 후, 135°C에서 3시간 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축 한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 최종 생성물(final product)를 얻었다.

[272]

[273] **1. P-9** 합성예

[274] <반응식 30>



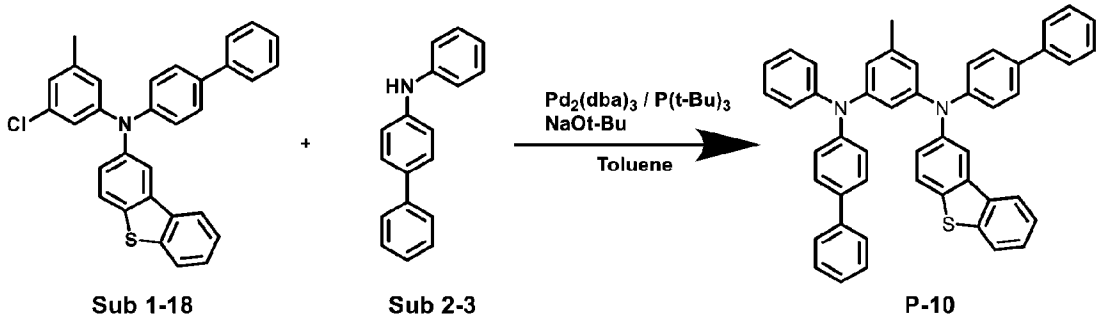
Sub 1-16 **Sub 2-51** **P-9**

[275] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-16 (20 g, 50.1 mmol)을 둥근바닥플라스크에 toluene (150ml)으로 녹인 후에, Sub 2-51 (13.8 g, 50.1 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.4 g, 1.5 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.2ml, 3.0 mmol), NaO*t*-Bu (14.4 g, 150.0 mmol)을 첨가하고 130°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 toluene과 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축 한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 P-9 28 g (수율: 87.6%)을 얻었다.

[276]

[277] **2. P-10** 합성예

[278] <반응식 31>

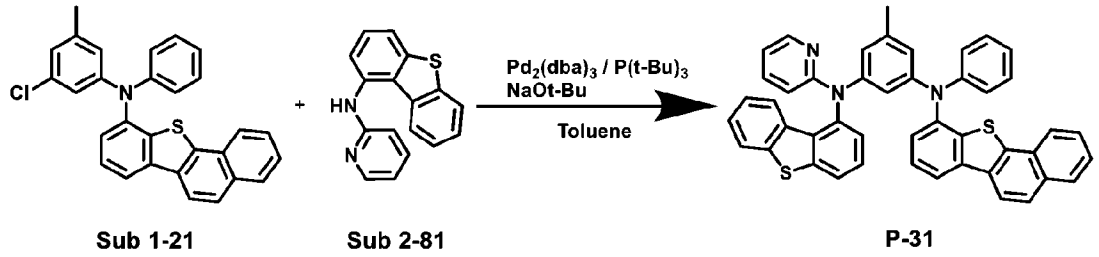


[279] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-18 (35 g, 63.1 mmol), Sub 2-3 (15.5 g, 63.1 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.7 g, 1.9 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.5ml, 3.8 mmol), NaO*t*-Bu (18.2 g, 189.4 mmol)을 toluene (170ml)에 첨가해 135°C에서 교반하고, 상기 P-9합성법을 통해 생성물 P-10 37 g (수율: 85.5%)을 얻었다.

[280]

[281] **3. P-31** 합성예

[282] <반응식 32>

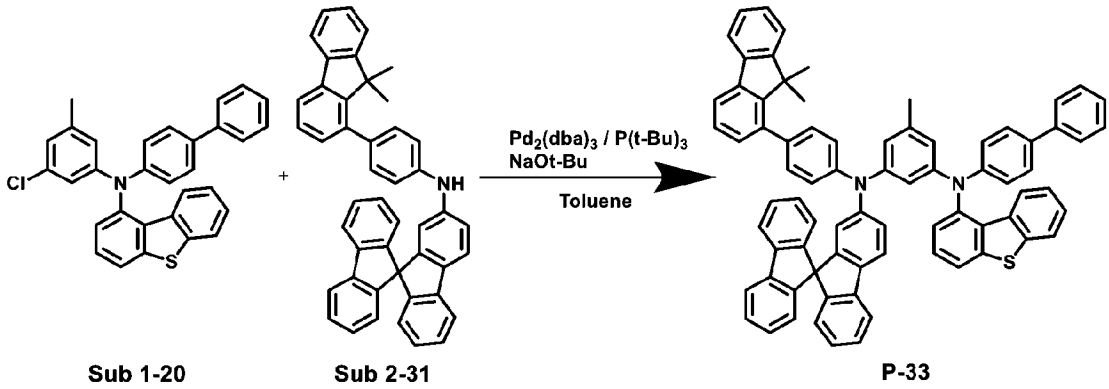


[283] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-21 (23 g, 51.1 mmol), Sub 2-81 (14.1 g, 51.1 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.5 g, 1.4 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.2 ml, 3.1 mmol), NaO*t*-Bu (14.7 g, 153.3 mmol)을 toluene (195ml)에 첨가해 130°C에서 교반하고, 상기 P-9합성법을 통해 생성물 P-31 31 g (수율: 87.9%)을 얻었다.

[284]

[285] **4. P-33** 합성예

[286] <반응식 33>

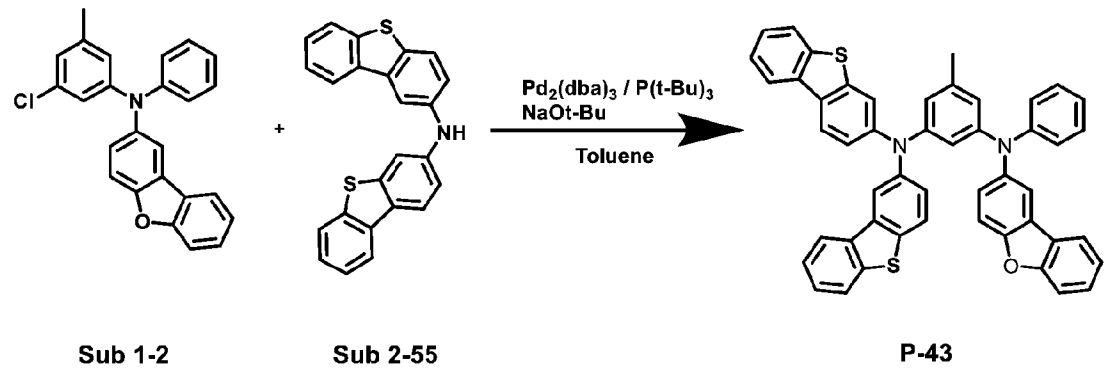


[287] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-20 (10 g, 21 mmol), Sub 2-31 (12.6 g, 21 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.6 g, 0.6 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.5ml, 1.3 mmol), NaO*t*-Bu (6.1 g, 63.0 mmol)을 toluene (120ml)에 첨가해 130°C에서 교반하고, 상기 P-9합성방법을 통해 생성물 P-33 18 g (수율: 82.4%)을 얻었다.

[288]

[289] **5. P-43** 합성예

[290] <반응식 34>

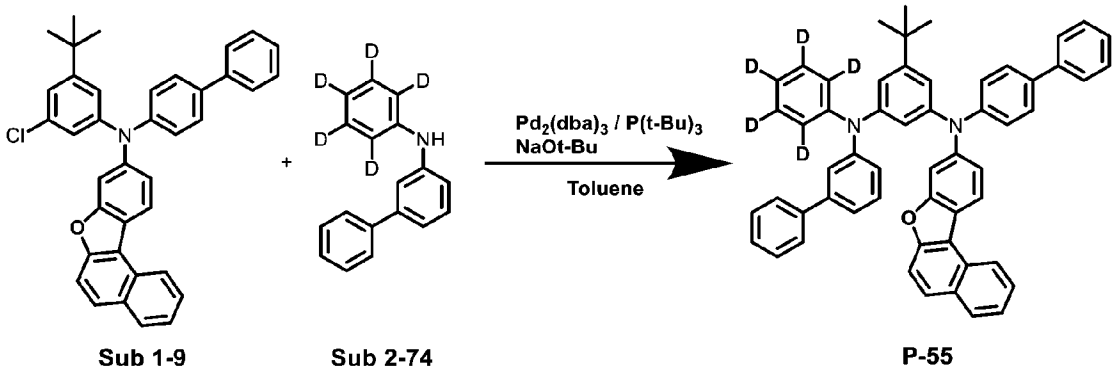


[291] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-2 (15 g, 39.0 mmol), Sub 2-55 (14.9 g, 39.0 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.1 g, 1.2 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.9ml, 2.3 mmol), NaO*t*-Bu (11.3 g, 117.2 mmol)을 toluene (150ml)에 첨가해 130°C에서 교반하고, 상기 P-9합성법을 통해 생성물 P-43 23 g (수율: 80.8%)을 얻었다.

[292]

[293] **6. P-55** 합성예

[294] <반응식 35>



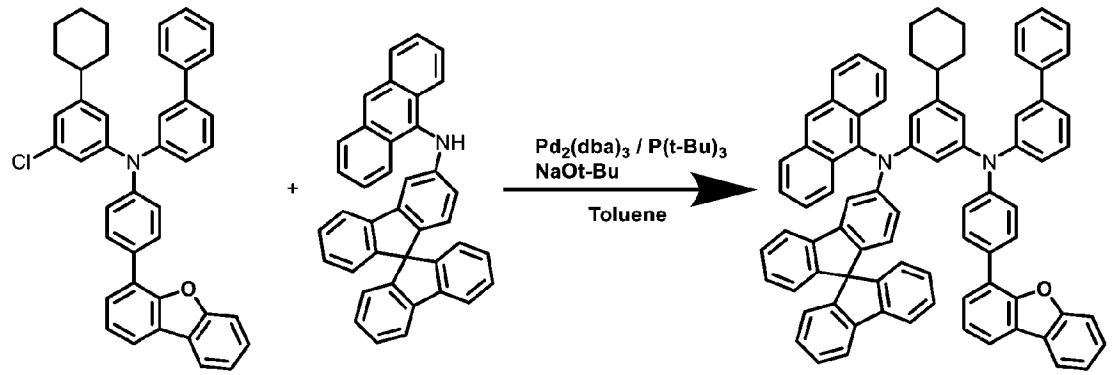
Sub 1-9 Sub 2-74 P-55

[295] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-9 (20 g, 36.2 mmol), Sub 2-74 (9.1 g, 36.2 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.0 g, 1.1 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.9ml, 2.1 mmol), NaO*t*-Bu (10.4 g, 108.7 mmol)을 toluene (210ml)에 첨가해 135°C에서 교반하고, 상기 P-9합성법을 통해 생성물 P-55 25 g (수율: 90.1%)을 얻었다.

[296]

[297] **7. P-60** 합성예

[298] <반응식 36>



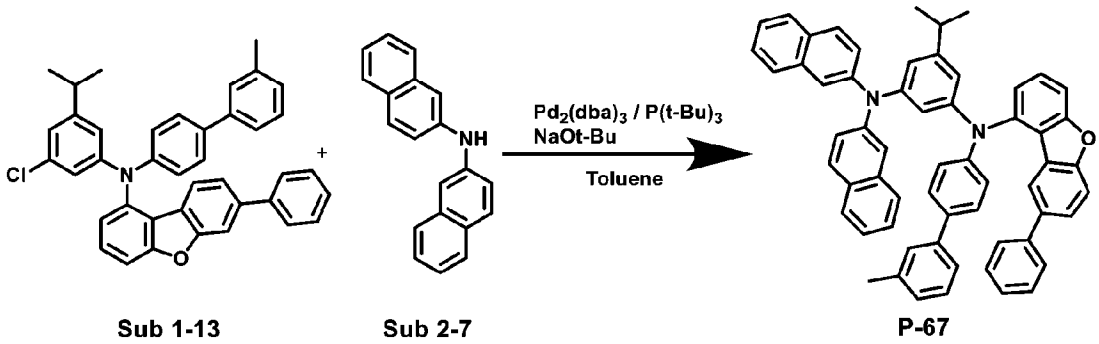
Sub 1-11 Sub 2-32 P-60

[299] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-11 (22 g, 36.4 mmol), Sub 2-32 (18.5 g, 36.4 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.0 g, 1.1 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.9ml, 2.2 mmol), NaO*t*-Bu (10.5 g, 109.2 mmol)을 toluene (200ml)에 첨가해 135°C에서 교반하고, 상기 P-9합성법을 통해 생성물 P-60 32 g (수율: 81.7%)을 얻었다.

[300]

[301] **8. P-67** 합성예

[302] <반응식 37>



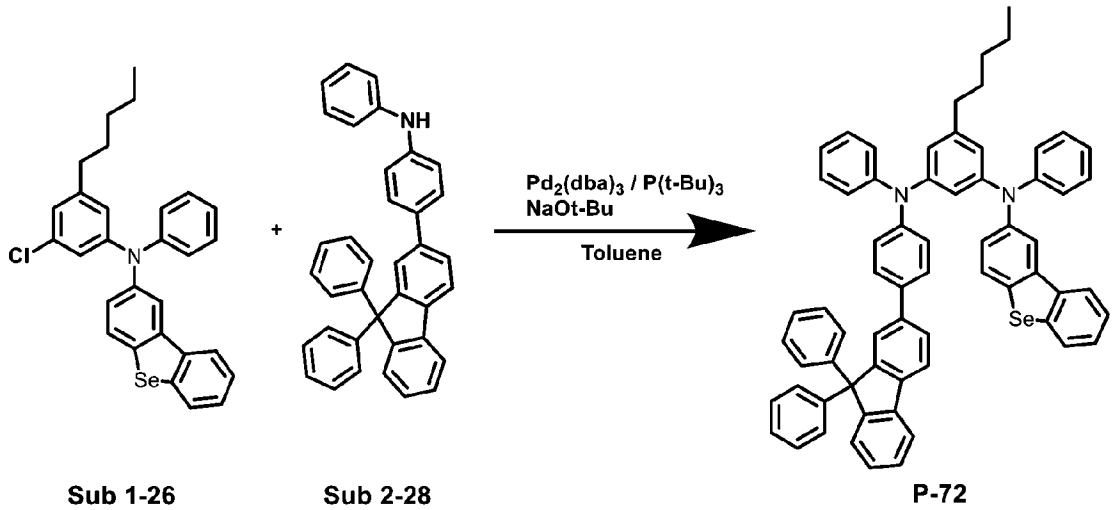
Sub 1-13 Sub 2-7 P-67

[303] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-13 (23 g, 39.8 mmol), Sub 2-7 (10.7 g, 39.8 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.1 g, 1.2 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.9ml, 2.4 mmol), NaO*t*-Bu (11.5 g, 119.3 mmol)을 toluene (180ml)에 첨가해 130°C에서 교반하고 상기 P-9합성법을 통해 생성물 P-67 28 g (수율: 86.8%)을 얻었다.

[304]

[305] **9. P-72** 합성예

[306] <반응식 38>



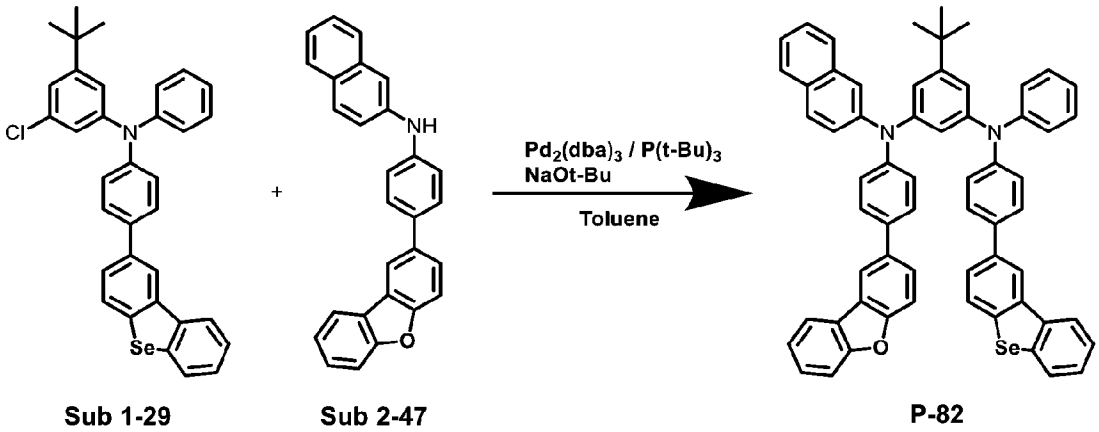
Sub 1-26 Sub 2-28 P-72

[307] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-26 (27 g, 53.7 mmol), Sub 2-28 (26.1 g, 53.7 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.5 g, 1.6 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.3 ml, 3.2 mmol), NaO*t*-Bu (15.5 g, 161.1 mmol)을 toluene (205ml)에 첨가해 130°C에서 교반하고, 상기 P-9합성법을 통해 생성물 P-72 40 g (수율: 78.3%)을 얻었다.

[308]

[309] **10. P-82** 합성예

[310] <반응식 39>



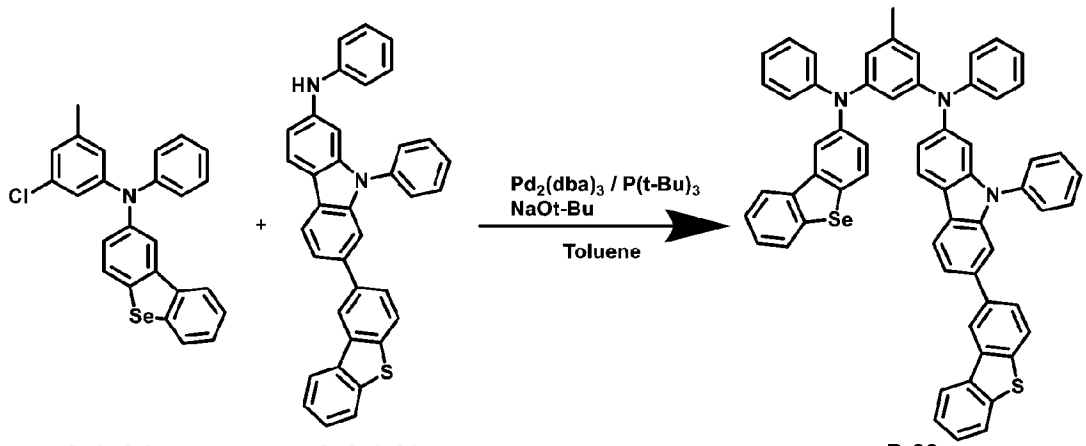
Sub 1-29 Sub 2-47 P-82

[311] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-29 (32 g, 56.6 mmol), Sub 2-47 (21.8 g, 56.6 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.6 g, 1.7 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.3 ml, 3.4 mmol), NaO*t*-Bu (16.3 g, 169.9 mmol)을 toluene (245ml)에 첨가해 130°C에서 교반하고, 상기 P-9합성법을 통해 생성물 P-82 46 g (수율: 88.9%)을 얻었다.

[312]

[313] **11. P-83** 합성예

[314] <반응식 40>



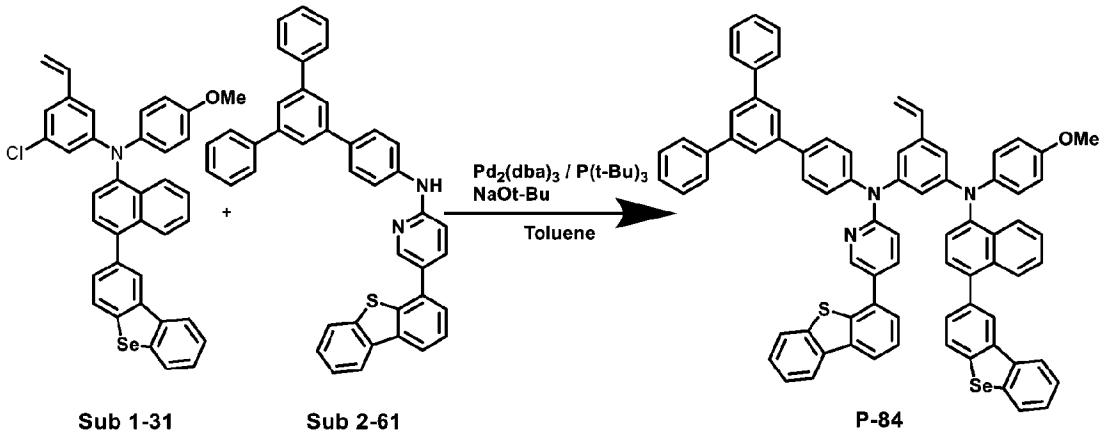
Sub 1-25 Sub 2-62 P-83

[315] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-25 (33 g, 73.9 mmol), Sub 2-62 (38.2 g, 73.9 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (2.0 g, 2.2 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.7ml, 4.4 mmol), NaO*t*-Bu (21.3 g, 221.6 mmol)을 toluene (300ml)에 첨가해 130°C에서 교반하고, 상기 P-9합성법을 통해 생성물 P-83 55 g (수율: 80.3%)을 얻었다.

[316]

[317] **12. P-84** 합성예

[318] <반응식 41>



Sub 1-31 Sub 2-61 P-84

[319] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-31 (27 g, 43.9 mmol), Sub 2-61 (25.5 g, 43.9 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.2 g, 1.3 mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.1 ml, 2.6 mmol), NaO*t*-Bu (12.7 g, 131.7 mmol)을 toluene (260ml)에 첨가해 130°C에서 교반하고,. 상기 P-9합성법을 통해 생성물 P-84 45 g (수율: 88.4%)을 얻었다.

[320]

[321] 하기의 표 3은 개별화합물 P-1 내지 P-85의 FD-MS 값을 나타낸 것이다.

[322] [표3]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
P-1	m/z=532.20 ($C_{37}H_{28}N_2S$=532.71)	P-2	m/z=684.26 ($C_{49}H_{36}N_2S$=684.90)
P-3	m/z=684.26 ($C_{49}H_{36}N_2S$= 684.90)	P-4	m/z=648.26 ($C_{46}H_{36}N_2S$= 648.87)
P-5	m/z=724.29 ($C_{52}H_{40}N_2S$= 724.97)	P-6	m/z=848.32 ($C_{62}H_{44}N_2S$= 849.11)
P-7	m/z=770.28 ($C_{56}H_{38}N_2S$=770.99)	P-8	m/z=622.21 ($C_{43}H_{30}N_2OS$=622.79)
P-9	m/z=638.19 ($C_{43}H_{30}N_2S_2$=638.85)	P-10	m/z=684.26 ($C_{49}H_{36}N_2S$= 684.90)
P-11	m/z=658.24 ($C_{47}H_{34}N_2S$= 658.86)	P-12	m/z=800.32 ($C_{58}H_{44}N_2S$=801.06)
P-13	m/z=924.35 ($C_{68}H_{48}N_2S$=925.21)	P-14	m/z=714.22 ($C_{49}H_{34}N_2S_2$=714.95)
P-15	m/z=774.27($C_{55}H_{38}N_2OS$=774.98)	P-16	m/z=608.23($C_{43}H_{32}N_2S$= 608.80)
P-17	m/z= 724.29 ($C_{52}H_{40}N_2S$= 724.97)	P-18	m/z=772.29($C_{56}H_{40}N_2S$=773.01)
P-19	m/z= 846.31 ($C_{62}H_{42}N_2S$= 847.09)	P-20	m/z=698.24($C_{49}H_{34}N_2OS$= 698.88)
P-21	m/z= 638.19($C_{43}H_{30}N_2S_2$=638.85)	P-22	m/z=688.20($C_{47}H_{32}N_2S_2$=688.91)
P-23	m/z= 760.29 ($C_{55}H_{40}N_2S$=761.00)	P-24	m/z=774.31 ($C_{56}H_{42}N_2S$=775.03)
P-25	m/z=774.27($C_{55}H_{38}N_2OS$=774.98)	P-26	m/z=820.20 ($C_{55}H_{36}N_2S_3$=821.09)
P-27	m/z=760.29 ($C_{55}H_{40}N_2S$=761.00)	P-28	m/z=632.23 ($C_{45}H_{32}N_2S$=632.83)
P-29	m/z=698.28 ($C_{50}H_{38}N_2S$= 698.93)	P-30	m/z=824.29 ($C_{59}H_{40}N_2OS$=825.04)
P-31	m/z=689.20 ($C_{46}H_{31}N_3S_2$=689.90)	P-32	m/z=784.29 ($C_{57}H_{40}N_2S$=785.02)
P-33	m/z=1038.40 ($C_{77}H_{54}N_2S$=1039.35)	P-34	m/z=920.29 ($C_{64}H_{44}N_2OS_2$=921.19)
P-35	m/z=851.33 (C61H45N3S=852.11)	P-36	m/z=768.26 ($C_{53}H_{40}N_2S_2$=769.04)
P-37	m/z=516.22 (C37H28N2O=942.21)	P-38	m/z=592.25 ($C_{43}H_{32}N_2O$=592.74)
P-39	m/z=708.31 (C52H40N2O=708.91)	P-40	m/z=756.31 ($C_{56}H_{40}N_2O$=756.95)
P-41	m/z=830.33 (C62H42N2O=831.03)	P-42	m/z=606.23 ($C_{43}H_{30}N_2O_2$=606.73)
P-43	m/z=728.20 ($C_{49}H_{32}N_2OS_2$=728.93)	P-44	m/z=744.31 ($C_{55}H_{40}N_2O$=744.94)
P-45	m/z=824.38($C_{61}H_{48}N_2O$=825.07)	P-46	m/z=758.29($C_{55}H_{38}N_2O_2$=758.92)
P-47	m/z=748.25($C_{53}H_{36}N_2OS$=748.94)	P-48	m/z=692.28 ($C_{51}H_{36}N_2O$=692.86)
P-49	m/z=806.33 ($C_{60}H_{42}N_2O$=807.01)	P-50	m/z=732.28 ($C_{53}H_{36}N_2O_2$=732.88)
P-51	m/z=628.16 ($C_{41}H_{28}N_2OS_2$=628.81)	P-52	m/z=710.27($C_{51}H_{35}FN_2O$=710.85)
P-53	m/z=881.34($C_{65}H_{43}N_3O$=882.08)	P-54	m/z=701.22($C_{46}H_{31}N_5OS$=701.85)
P-55	m/z=765.38 ($C_{56}H_{39}D_5N_2O$=766.01)	P-56	m/z=580.25($C_{42}H_{32}N_2O$=580.73)
P-57	m/z=860.38($C_{64}H_{48}N_2O$=861.10)	P-58	m/z=851.30 ($C_{60}H_{41}N_3OS$=852.07)

[323]

P-59	m/z=656.28($C_{48}H_{36}N_2O$=656.83)	P-60	m/z=1074.45 ($C_{81}H_{58}N_2O$=1075.37)
P-61	m/z=794.33 ($C_{59}H_{42}N_2O$=795.00)	P-62	m/z=900.35 ($C_{66}H_{45}FN_2O$=901.10)
P-63	m/z=709.27 ($C_{50}H_{35}N_3O_2$=709.85)	P-64	m/z=944.38 ($C_{71}H_{48}N_2O$=945.18)
P-65	m/z=951.33 ($C_{68}H_{45}N_3OS$=952.19)	P-66	m/z=784.31 ($C_{57}H_{40}N_2O_2$=784.96)
P-67	m/z=810.36 ($C_{60}H_{46}N_2O$=811.04)	P-68	m/z=749.27 ($C_{52}H_{35}N_3O_3$=749.87)
P-69	m/z=580.14 ($C_{37}H_{28}N_2Se$=579.61)	P-70	m/z=656.17 ($C_{43}H_{32}N_2Se$=655.70)
P-71	m/z=772.24 ($C_{52}H_{40}N_2Se$=771.87)	P-72	m/z=952.33 ($C_{66}H_{52}N_2Se$=952.12)
P 73	m/z=670.15 ($C_{43}H_{30}N_2OSe$=669.69)	P 74	m/z=762.16 ($C_{49}H_{34}N_2SSe$=761.85)
P-75	m/z=782.22 ($C_{53}H_{38}N_2Se$=781.86)	P-76	m/z=772.24 ($C_{52}H_{40}N_2Se$=771.87)
P-77	m/z=822.21 ($C_{55}H_{38}N_2OSe$=821.88)	P-78	m/z=762.16 ($C_{49}H_{34}N_2SSe$=761.85)
P-79	m/z=860.12 ($C_{53}H_{36}N_2Se_2$=858.81)	P-80	m/z=884.27 ($C_{61}H_{44}N_2Se$=884.00)
P-81	m/z=1188.39 ($C_{85}H_{60}$N2Se=1188.39)	P-82	m/z=914.28 ($C_{62}H_{46}N_2OSe$=914.02)
P-83	m/z=927.22 ($C_{61}H_{41}N_3SSe$=927.04)	P-84	m/z=1159.31 ($C_{78}H_{53}N_3OSSe$=1159.32)
P-85	m/z=760.96 ($C_{54}H_{36}N_2OS$=760.25)		

[324] 한편, 상기에서는 화학식 1로 표시되는 본 발명의 예시적 합성예를 설명하였지만, 이들은 모두 Buchwald-Hartwig cross coupling 반응, Suzuki cross-coupling 반응, Intramolecular acid-induced cyclization 반응 (*J. mater.* Chem. 1999, 9, 2095.), Pd(II)-catalyzed oxidative cyclization 반응 (*Org*. Lett. 2011, 13, 5504), Grignard 반응, Cyclic Dehydration 반응 및 PPh_3-mediated reductive cyclization 반응 (*J.* Org. Chem. 2005, 70, 5014.)등에 기초한 것으로 구체적 합성예에 명시된 치환기 이외에 화학식 1에 정의된 다른 치환기가 결합되더라도 상기 반응이 진행된다는 것을 당업자라면 쉽게 이해할 수 있을 것이다.

[325]

[326] <u>유기전기소자의 제조평가</u>

[327] **[실시예 1] 적색유기전기발광소자 (발광보조층)**

[328] 본 발명의 화합물을 발광보조층 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전계 발광소자를 제작하였다. 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 상에 N[1]-(naphthalen-2-yl)-N[4],N[4]-bis(4-(naphthalen-2-yl(phenyl)amino)phenyl)-N[1]-phenylbenzene-1,4-diamine (이하, 2-TNATA)를 60 nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공주입층 위에 정공수송 화합물로서 4,4-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 (이하, -NPD로 약기함)을 60 nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상에 본 발명의 화합물 P-2를 20nm 두께로 진공증착하여 발광보조층을 형성한 후, 상기 발광보조층 상에 CBP를 호스트 물질로, bis-(1-phenylisoquinolyl)iridium(III)acetylacetonate (이하, (piq)2Ir(acac))을 도판트 물질로 사용하고 95:5 중량비로 도핑하여 30 nm 두께로 진공증착하여 발광층을

형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 BAlq을 5 nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 Bis(10-hydroxybenzo[h]quinolinato)beryllium (이하, BeBq2)을 40 nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성vuy하였다. 이후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[329]

[330] **[실시예 2] 내지 [실시예 17] 적색유기전기발광소자**

[331] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 P-2 대신 하기 표 4에 기재된 본 발명의 화합물을 사용한 점을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.

[332]

[333] **[비교예 1]**

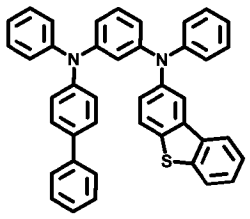
[334] 발광보조층을 형성하지 않은 점을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

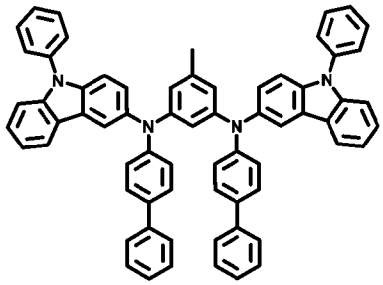
[335]

[336] [비교예 2] 및 [비교예 3]

[337] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 P-2 대신 하기 비교화합물 1 및 비교화합물2를 각각 사용한 점을 제외하고는 상기 실시예1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[338] <비교화합물 1> <비교화합물 2>





[339] 이와 같이 제조된 실시예 1 내지 실시예 20 및 비교예 1 내지 비교예 4의 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 그 측정 결과 2500cd/m^2 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였다. 하기 표4는 소자제작 및 평가한 결과를 나타낸다.

[340] [표4]

	화합물	구동전압	전류 (mA/cm2)	휘도 (cd/m2)	효율 (cd/A)	T(95)	CIE	
							X	Y
비교예(1)	-	5.3	33.3	2500	7.5	62.7	0.66	0.32
비교예(2)	비교화합물 1	5.6	17.1	2500	14.6	91.9	0.66	0.32
비교예(3)	비교화합물 2	5.4	15.1	2500	16.6	94.9	0.66	0.32
실시예(1)	화합물 P-2	4.7	10.1	2500	24.7	114.4	0.66	0.33
실시예(2)	화합물 P-8	4.5	9.6	2500	26.1	117.2	0.66	0.33
실시예(3)	화합물 P-9	4.4	9.5	2500	26.4	118.6	0.66	0.33
실시예(4)	화합물 P-10	4.7	10.0	2500	25.0	114.6	0.66	0.33
실시예(5)	화합물 P-14	4.5	9.6	2500	25.9	116.8	0.66	0.33
실시예(6)	화합물 P-22	4.6	9.8	2500	25.6	115.1	0.66	0.32
실시예(7)	화합물 P-31	4.9	10.7	2500	23.4	114.3	0.66	0.33
실시예(8)	화합물 P-42	4.8	10.4	2500	24.1	113.5	0.66	0.32
실시예(9)	화합물 P-43	4.7	10.8	2500	23.1	114.4	0.66	0.32
실시예(10)	화합물 P-46	4.8	10.7	2500	23.4	114.0	0.66	0.33
실시예(11)	화합물 P-47	4.5	9.8	2500	25.6	115.3	0.66	0.33
실시예(12)	화합물 P-55	5.3	12.2	2500	20.5	112.6	0.66	0.33
실시예(13)	화합물 P-57	5.2	12.0	2500	20.9	111.1	0.66	0.32
실시예(14)	화합물 P-64	5.4	11.7	2500	21.4	110.4	0.66	0.32
실시예(15)	화합물 P-67	5.1	11.8	2500	21.2	111.6	0.66	0.32
실시예(16)	화합물 P-68	5.2	11.4	2500	22.0	112.2	0.66	0.33
실시예(17)	화합물 P-85	5.1	11.5	2500	21.8	110.4	0.66	0.32

[341] 상기 표 4의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 화합물을 발광보조층 재료로 사용한 유기전기발광소자는 비교예 1 내지 비교예 3의 유기전기발광소자에 비해 발광효율이 향상되고 수명이 현저히 개선되었다.

[342] 우선, 아미노기가 치환된 페닐에 알킬기와 같은 치환기가 연결된 비교화합물2의 경우에는 알킬기가 치환되지 않은 비교화합물1 보다 구동전압이 낮아져 효율이 향상된 것을 확인할 수 있다.

[343] 이는 비교화합물1과 본 발명 실시예 화합물 결과 비교를 통해서도 알 수 있는데, 비교화합물1과 본 발명 실시예 화합물은 벤젠에 대칭적으로 아미노기가 치환되는 것은 동일하나, 아미노기가 치환 위치의 meta 위치에 알킬기와 같은 치환기가 치환된 발명 화합물의 결과가 현저히 더 우수한 것을 확인할 수 있다. 이는, 본 발명 실시예 화합물과 같이 알킬기가 치환기로 도입될 경우, 비교화합물1 보다 전자 도네이팅 특성이 강해 HTL로부터 홀 주입이 용이한 HOMO level로 상승하게 되어 구동전압이 낮아져 소자의 효율 및 수명특성이 향상되는 것으로 판단된다.

[344] 한편, 비교예 3과 본 발명의 실시예 2를 비교해보면, 아미노기의 치환기로 카바졸을 갖는 비교예 3 보다, 아미노기의 치환기로 다이벤조퓨란 또는

다이벤조싸이오펜과 같은 특정 치환기를 갖는 본 발명 화합물의 소자 결과가 더 우수한 것을 확인할 수 있다. 이는 본 발명 실시예 2의 화합물의 T1이 비교예 3의 화합물에 비해 상대적으로 높은 값을 가지고 있기 때문에 과잉의 전자가 정공수송층으로 넘어가는 것을 저지(Blocking)시켜 발광층 내 차지 발란스(Charge balance) 증가로 발광효율이 향상된 것으로 판단된다.

[345] 상기와 같은 효과는 실시예 1과 실시예 6의 화합물 비교로부터도 설명될 수 있다. 즉, 아미노기의 치환기로 다이벤조퓨란 또는 다이벤조싸이오펜이 두 개 이상 도입된 경우가, 한 개 도입된 경우보다, Tg 및 T1 값이 향상되기 때문에, 실시예 1의 발광 효율 및 수명이 실시예 6보다 개선된 것을 확인할 수 있다.

[346] 요약하면, 본 발명의 화합물을 발광보조층으로 사용함으로써, 본 발명의 화합물의 HOMO 또는 LUMO 에너지 레벨(energy level)이 정공수송층과 발광층 사이의 적절한 값을 가져 이로 인해 정공과 전자가 전하 균형(charge balance)를 이루고 정공수송층 계면이 아닌 발광층 내부에서 발광이 이루어져 더 높은 효율 및 수명을 극대화시킨 것을 확인할 수 있다.

[347] 그리고, 실시예 1과 실시예 4의 화합물을 비교해보면, 화학식 1의 A와 B가 동일할 경우, 즉, 대칭을 이룰 경우가 A와 B가 상이하여 비대칭을 이룬 화합물보다 효율 및 수명이 향상된 결과를 지니고 있음을 확인할 수 있다.

[348]

[349] **[실시예 18] 녹색유기전계발광소자 (정공수송층)**

[350] 본 발명의 화합물을 정공수송층 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기발광소자를 제작하였다. 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 상에 N^1-(naphthalen-2-yl)-N^4,N^4-bis(4-(naphthalen-2-yl(phenyl)amino)phenyl)-N^1-phenylbenzene-1,4-diamine (이하, 2-TNATA)을 60 nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공주입층 상에 본 발명의 화합물 P-4를 60 nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상에 4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl (이하, CBP)을 호스트 물질로, tris(2-phenylpyridine)-iridium (이하, Ir(ppy)3)을 도판트 물질로 사용하고 90:10 중량비로 도핑하여 30nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 BAlq을 5 nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 Bis(10-hydroxybenzo[h]quinolinato)beryllium (이하, BeBq2)을 40 nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 이후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[351]

[352] **[실시예 19] 내지 [실시예 22] 녹색유기전계발광소자 (정공수송층)**

[353] 정공수송층 물질로 본 발명의 화합물 P-4 대신 하기 표 5에 기재된 본 발명의 화합물 P-9 내지 P-87을 각각 사용한 점을 제외하고는 실시예 20과 동일한

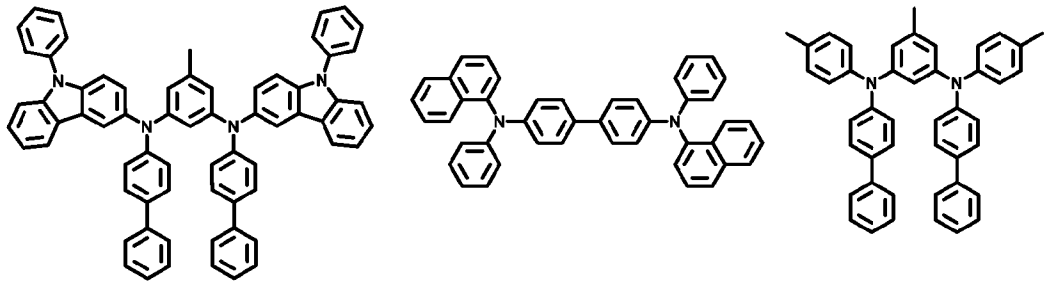
방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

[354]

[355] **[비교예 4] 내지 [비교예 6]**

[356] 정공수송층 물질로 본 발명의 화합물 P-4 대신 하기 표 5에 기재된 하기 비교화합물 2 내지 비교화합물 4를 각각 사용한 점을 제외하고는 상기 실시예 20과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

[357] <비교화합물 2> <비교화합물 3> <비교화합물 4>



[358] [표5]

	화합물	구동전압	전류 (mA/cm2)	휘도 (cd/m2)	효율 (cd/A)	T(95)	CIE	
							X	Y
비교예(4)	비교화합물 2	5.8	18.0	5000	27.7	86.6	0.33	0.61
비교예(5)	비교화합물 3	6.0	32.9	5000	7.6	61.8	0.33	0.61
비교예(6)	비교화합물 4	5.9	18.9	5000	26.4	80.8	0.33	0.62
실시예(18)	화합물 P-4	5.7	15.2	5000	32.8	125.6	0.33	0.62
실시예(19)	화합물 P-9	5.6	11.9	5000	41.9	133.8	0.33	0.62
실시예(20)	화합물 P-10	5.5	12.2	5000	41.1	143.6	0.33	0.61
실시예(21)	화합물 P-18	5.6	14.1	5000	35.5	126.4	0.33	0.61
실시예(22)	화합물 P-67	5.6	12.9	5000	38.7	116.0	0.33	0.62

[359] 상기 표 5의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 화합물을 정공수송층의 재료로 사용한 유기전자소자가 비교예 4 내지 비교예 6의 화합물을 정공수송층의 재료로 사용한 유기전자소자보다 비교적 낮은 구동전압과 높은 효율 그리고 장수명을 나타내는 것을 확인하였다.

[360] 다시 말해, NPB를 정공수송층으로 사용한 비교예 5보다는 아미노기가 연결된 페닐에 알킬기가 치환되어 있는 비교예 6이 더 우수한 소자결과를 나타내었고, 비교예 6보다는 아미노기의 치환기로 카바졸과 같은 헤테로고리를 갖는 비교예 4가 구동전압, 효율, 수명면 소자 결과가 더 우수한 것을 확인할 수 있다.

[361] 이는 아미노기의 치환기로 일반 아릴기가 아닌 헤테로원자를 갖는 카바졸이 도입된 경우가 높은 Tg 값을 가지게 되며, 이로 인해 열적 안정성이 향상되어 소자의 효율 및 수명이 증가되는 것을 확인할 수 있다. 또한, 카바졸 치환기가 도입됨에 따라 일반 아릴기 치환기를 갖는 경우보다 빠른 정공 이동도(hole mobility)를 가져 좀 더 낮은 구동 전압을 나타내는 특징을 가져 소자의

효율특성이 상승되는 것으로 판단된다.

[362] 또한, 표 5의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명 화합물을 정공수송층의 재료로 사용한 유기전계발광소자는 비교예 4 내지 비교예 6의 유기전기발광소자에 비해 발광효율이 향상되고 수명이 현저히 개선되었다. 이는 본 발명의 화합물과 같이 페닐에 아미노기가 치환된 meta 위치에 알킬기와 같은 치환기가 치환되고, 아미노기의 치환기 중 적어도 하나가 아릴기가 아닌 다이벤조싸이오펜, 다이벤조퓨란이 도입된 경우는 일반아릴기나 카바졸이 결합되어 있는 경우(비교화합물 2 내지 비교화합물4)보다 높은 Tg 값과 높은 굴절률을 가지게 되며, 이로 인해 발광 효율이 상승하고 열적 안정성이 향상되어 수명이 증가되는 것을 확인할 수 있다.

[363] 정공수송층의 경우에는 발광층(호스트)과의 상호관계를 파악해야 하는바, 유사한 코어를 사용하더라도 본 발명의 화합물이 사용된 정공수송층에서 나타내는 특징을 유추하는 것은 통상의 기술자라 하더라도 매우 어려울 것이다.

[364]

[365] 아울러, 전술한 소자 제작의 평가 결과에서는 본 발명의 화합물을 정공수송층 및 발광보조층 중 한 층에만 적용한 소자 특성을 설명하였으나, 본 발명의 화합물을 정공수송층과 발광보조층 모두 적용하여 사용될 수 있다.

[366] 이상의 설명은 본 발명을 예시적으로 설명한 것에 불과한 것으로, 본 발명에 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가지는 자라면 본 발명의 본질적인 특성에서 벗어나지 않는 범위에서 다양한 변형이 가능할 것이다. 따라서, 본 명세서에 개시된 실시예들은 본 발명을 한정하기 위한 것이 아니라 설명하기 위한 것이고, 이러한 실시예에 의하여 본 발명의 사상과 범위가 한정되는 것은 아니다. 본 발명의 보호범위는 아래의 청구범위에 의하여 해석되어야 하며, 그와 동등한 범위 내에 모든 기술은 본 발명의 권리범위에 포함하는 것으로 해석되어야 할 것이다.

[367]

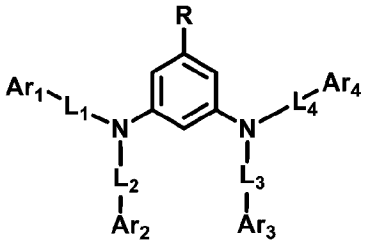
[368] CROSS-REFERENCE TO RELATED APPLICATION

[369] 본 특허출원은 2017년 06월 08일 한국에 출원한 특허출원번호 제 10-2017-0071573 호에 대해 미국 특허법 119(a)조 (35 U.S.C § 119(a))에 따라 우선권을 주장하며, 그 모든 내용은 참고문헌으로 본 특허출원에 병합된다. 아울러, 본 특허출원은 미국 이외에 국가에 대해서도 위와 동일한 이유로 우선권을 주장하면 그 모든 내용은 참고문헌으로 본 특허출원에 병합된다.

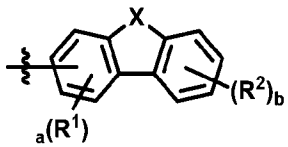
청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 유기전기 소자용 화합물.

화학식 1



화학식 2



상기 화학식 1에서,

1) R은 C_1-C_{50}의 알킬기; C_2-C_{20}의 알케닐기; C_3-C_{30}의 사이클로 알킬기 중 어느 하나로 선택되고,

2) Ar^1 내지 Ar^4는 각각 서로 독립적으로 동일하거나 상이하며, C_6-C_{60}의 아릴기; 상기 화학식 2; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60}의 헤테로고리기; C_6-C_{60}의 방향족 고리와 C_3-C_{60}의 지방족 고리의 융합고리기; C_1-C_{50}의 알킬기; C_2-C_{20}의 알켄일기; C_2-C_{20}의 알킨일기; C_1-C_{30}의 알콕실기; 및 C_6-C_{30}의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 각각 어느 하나로 선택되며,
단 Ar^1 내지 Ar^4 중 적어도 하나는 상기 화학식 2의 구조이고,

3) L^1 내지 L^4는 각각 서로 독립적으로 동일하거나 상이하며, 단일결합; C_6-C_{60}의 아릴렌기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60}의 헤테로고리기; 플루오렌일렌기; C_3-C_{60}의 지방족고리와 C_6-C_{60}의 방향족고리의 2가 융합고리기; 및 C_1-C_{60}의 지방족 탄화수소기로 이루어진 군에서 각각 어느 하나로 선택되며,

4) X는 O, S 및 Se 중 어느 하나로 선택되고,

5) R_1 및 R_2는 각각 서로 독립적으로 동일하거나 상이하며, 수소; 중수소; 삼중수소; 할로겐; 시아노기; 나이트로기; C_6-C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60}의 헤테로고리기; C_3-C_{60}의 지방족고리와 C_6-C_{60}의 방향족고리의 융합고리기; C_1-C_{50}의 알킬기; C_2-C_{20}의 알켄일기; C_2-C_{20}의 알킨일기; C_1-C_{30}의 알콕실기; 및 C_6-C_{30}의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택되고, 복수의 R^1끼리 혹은 복수의 R^2끼리 서로 결합하여 방향족 고리 또는 헤테로방향족 고리를 형성할 수 있으며,

6) a 및 b는 0 내지 4의 정수 중 어느 하나로 선택된다.

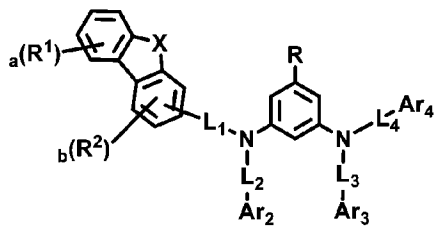
여기서, 상기 아릴기, 아릴렌기, 플루오렌일렌기, 플루오렌일기, 헤테로고리기, 알킬기, 융합고리기, 알켄일기, 알콕시기, 아릴옥시기 각각은 중수소; 할로겐; C_1-C_{20}의 알킬기 또는 C_6-C_{20}의 아릴기로 치환 또는 비치환된 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; C_1

-C_{20}의 알킬싸이오기; C_1-C_{20}의 알콕실기; C_1-C_{20}의 알킬기; C_2-C_{20}의 알켄일기; C_2-C_{20}의 알킨일기; C_6-C_{20}의 아릴기; 중수소로 치환된 C_6-C_{20}의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{20}의 헤테로고리기; C_3-C_{20}의 시클로알킬기; C_7-C_{20}의 아릴알킬기; 및 C_8-C_{20}의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더욱 치환될 수 있으며, 이들 각 치환기가 인접한 경우 이들은 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

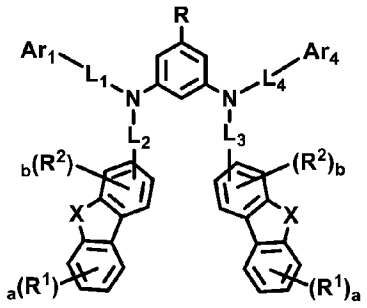
여기서 '고리'란 탄소수 3 내지 60의 지방족고리 또는 탄소수 6 내지 60의 방향족고리 또는 탄소수 2 내지 60의 헤테로고리 또는 이들의 조합으로 이루어진 융합 고리를 말하며, 포화 또는 불포화 고리를 포함한다.

[청구항 2] 제 1항에 있어서,

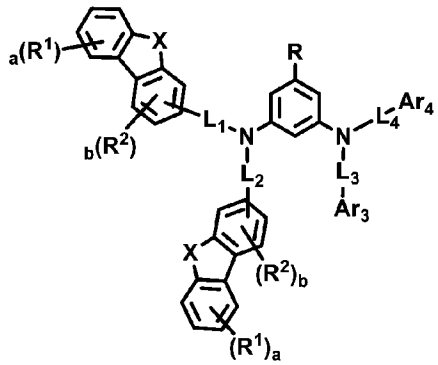
상기 화합물은 하기 화학식 1-1 내지 화학식 1-5중 어느 하나로 표시되는 유기전기 소자용 화합물.



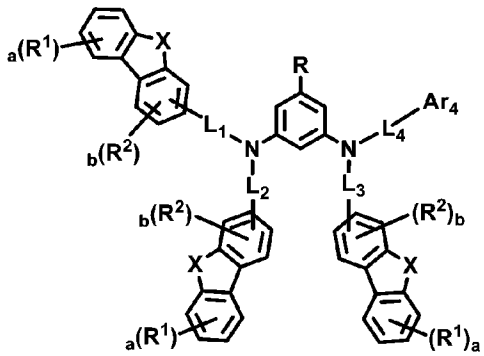
(화학식 1-1)



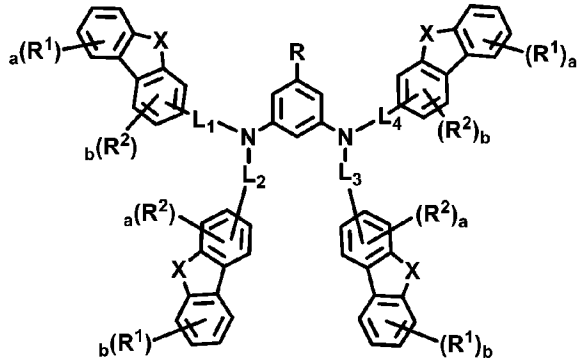
(화학식 1-2)



(화학식 1-3)



(화학식 1-4)



(화학식 1-5)

상기 화학식 1-1 내지 화학식 1-5에서,

R, Ar^1 내지 Ar^4, L^1 내지 L^4, X, a 및 b는 상기 화학식 1에서 정의된 R, Ar^1 내지 Ar^4, L^1 내지 L^4, X, a 및 b와 동일하다.

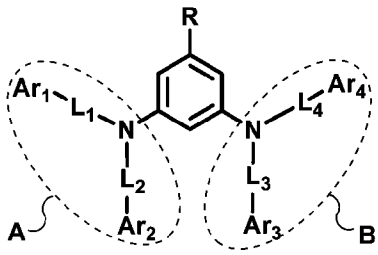
[청구항 3] 제 1항에 있어서,

상기 Ar^1 내지 Ar^4 중 적어도 2개는 상기 화학식 2의 구조를 갖는 것을 특징으로 하는 유기전기 소자용 화합물.

[청구항 4] 제 1항에 있어서,

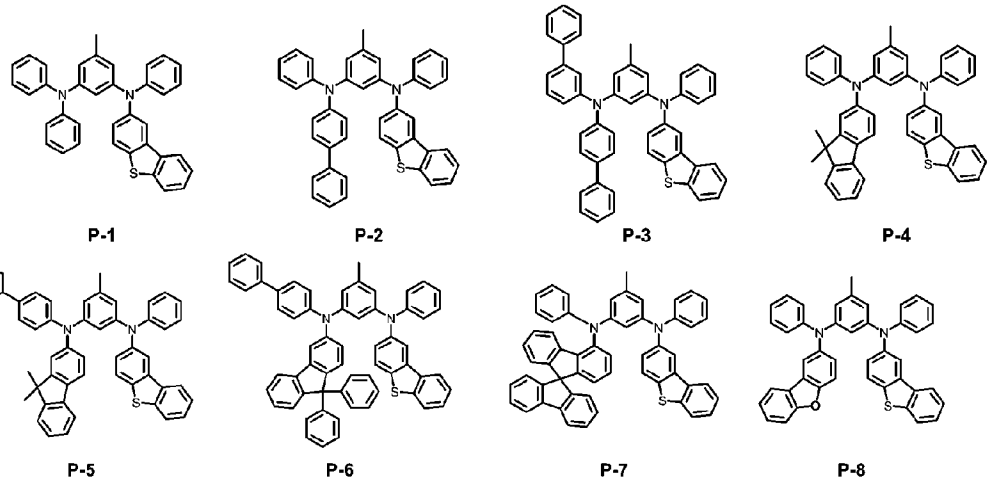
상기 화학식 1에서 하기 A로 표시되는 부분과 B로 표시되는 부분은 서로 상이한 것을 특징으로 하는 유기전기 소자용 화합물.

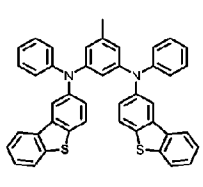
화학식 1



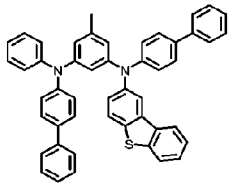
[청구항 5] 제 1항에 있어서,

상기 화학식 1과 상기 화학식 2의 조합으로 표시되는 화합물은 하기 화학식들 중 하나인 유기전기 소자용 화합물.

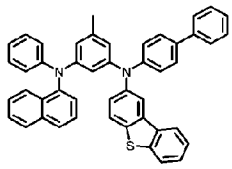




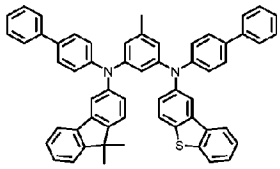
P-9



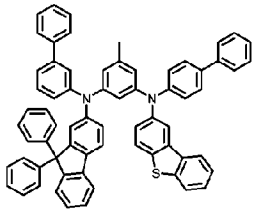
P-10



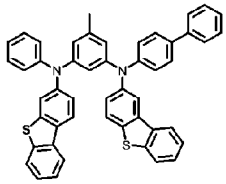
P-11



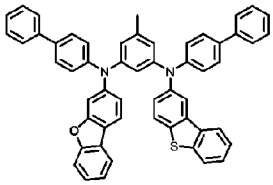
P-12



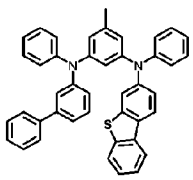
P-13



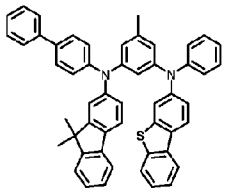
P-14



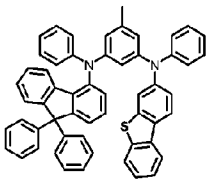
P-15



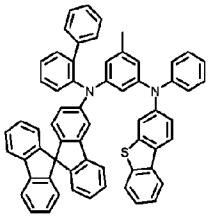
P-16



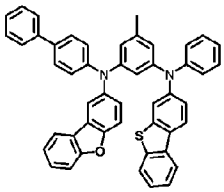
P-17



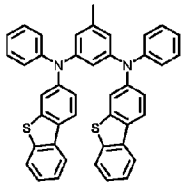
P-18



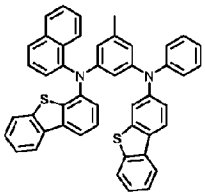
P-19



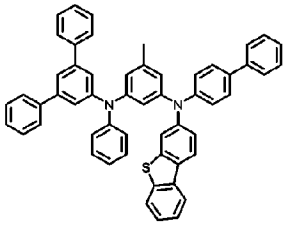
P-20



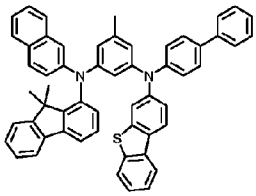
P-21



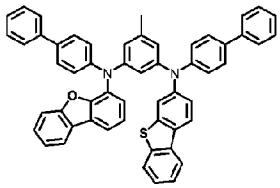
P-22



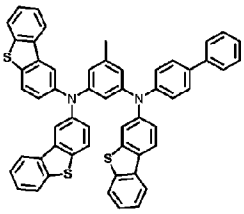
P-23



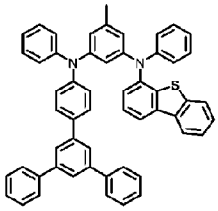
P-24



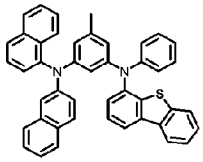
P-25



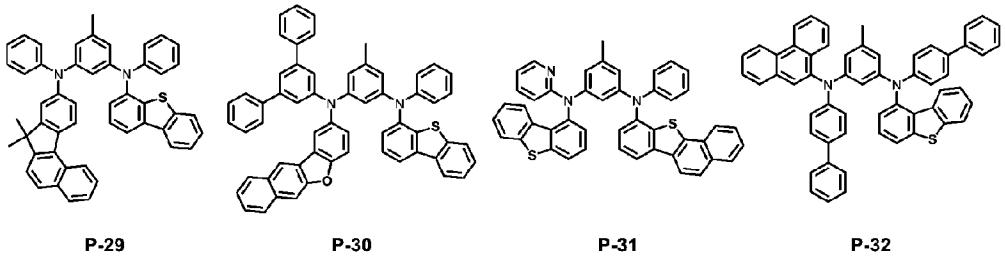
P-26



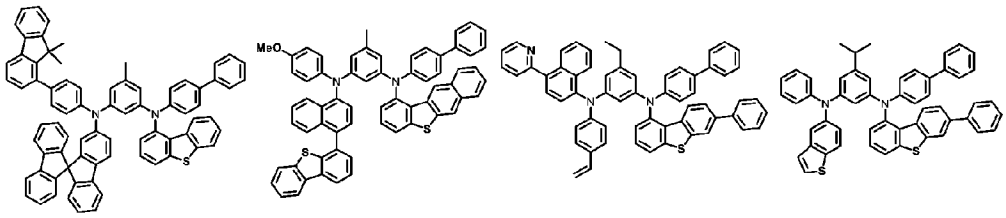
P-27



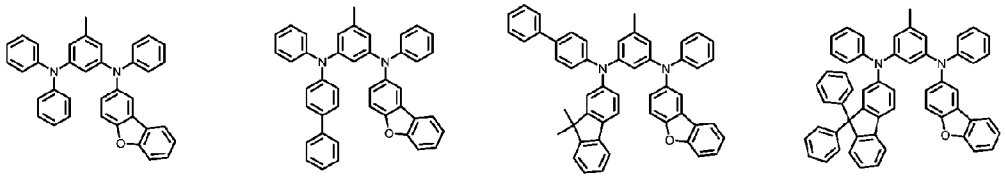
P-28



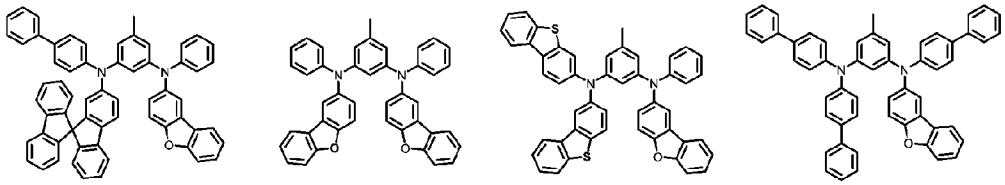
P-29 P-30 P-31 P-32



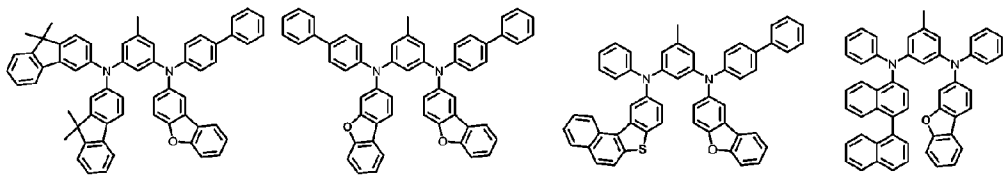
P-33 P-34 P-35 P-36



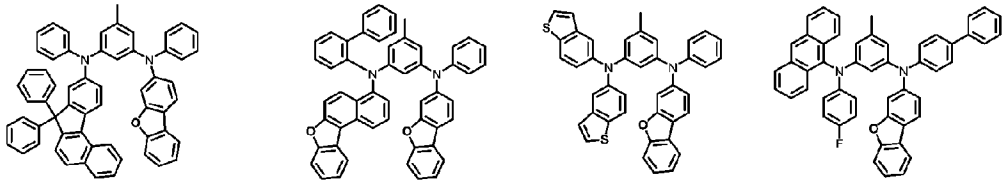
P-37 P-38 P-39 P-40



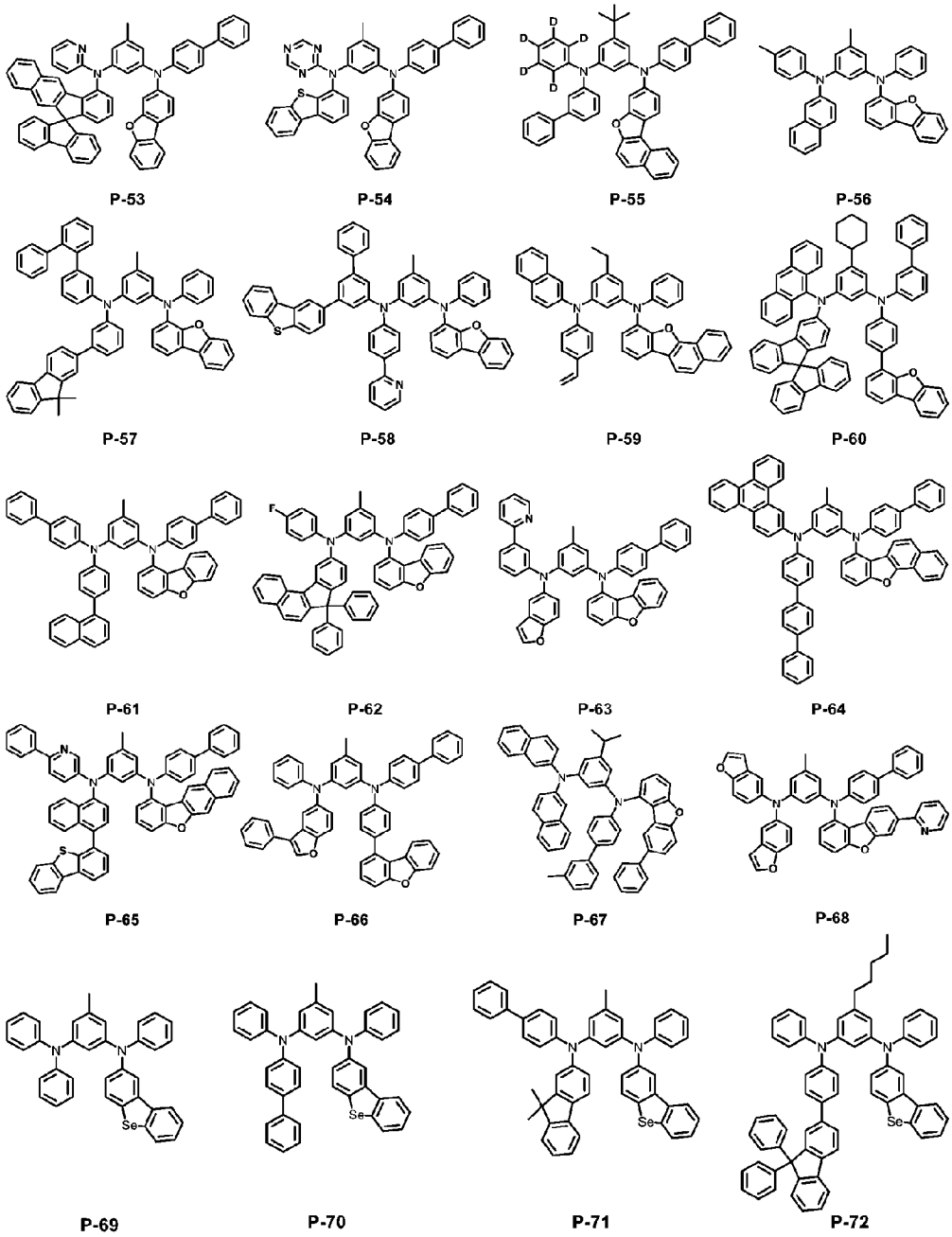
P-41 P-42 P-43 P-44

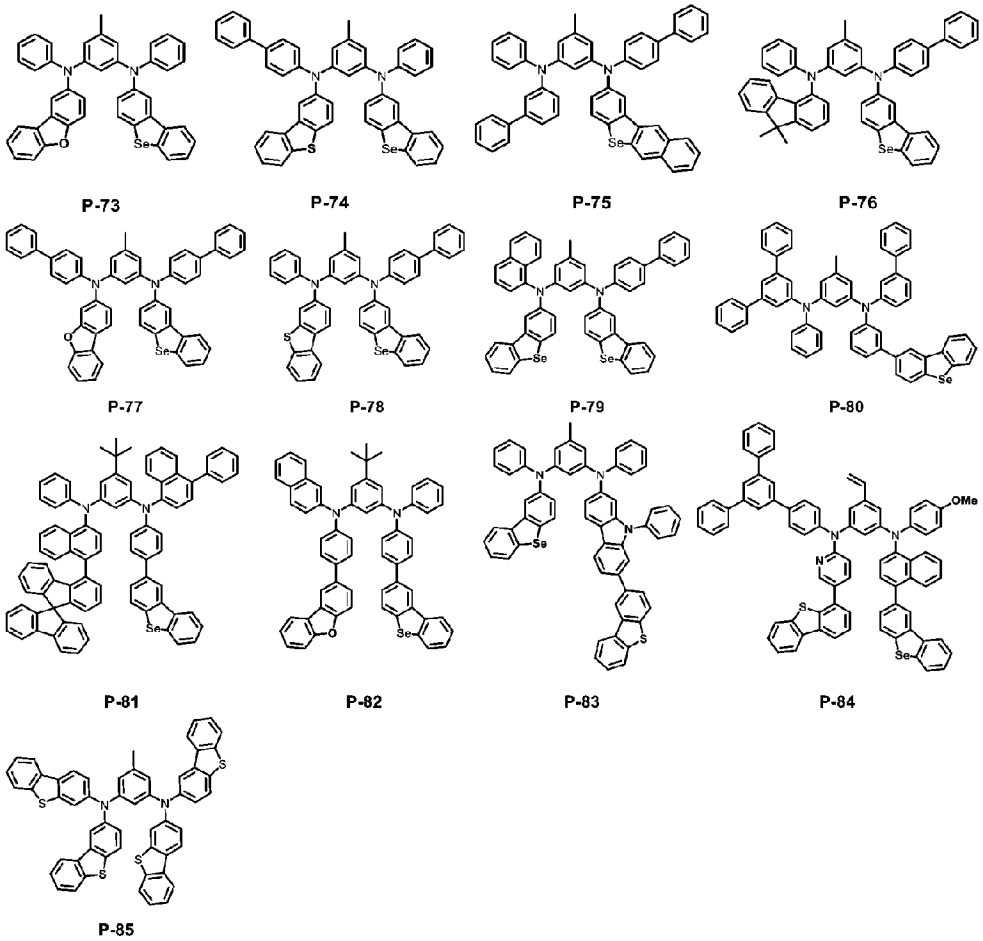


P-45 P-46 P-47 P-48



P-49 P-50 P-51 P-52


P-53
P-54
P-55
P-56
P-57
P-58
P-59
P-60
P-61
P-62
P-63
P-64
P-65
P-66
P-67
P-68
P-69
P-70
P-71
P-72



[청구항 6] 제 1전극;
제 2전극; 및
상기 제 1전극과 제 2전극 사이에 위치하는 유기물층;을 포함하는 유기전기소자에 있어서, 상기 유기물층은 제 1항 내지 제 5항 중 어느 한 항의 화합물을 함유하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

[청구항 7] 제 6항에 있어서,
상기 유기물층의 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송보조층, 전자수송층 및 전자주입층 중 적어도 하나의 층에 상기 화합물이 함유되며, 상기 화합물은 1종 단독 화합물 또는 2종 이상의 화합물을 혼합물의 성분으로서 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

[청구항 8] 제 6항에 있어서,
상기 화합물은 상기 정공수송층 또는 상기 발광보조층으로 사용되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

[청구항 9] 제 6항에 있어서,
상기 제 1전극과 상기 제 2전극의 일면 중 상기 유기물층과 반대되는 적어도 일면에 형성되는 광효율 개선층을 더 포함하는 유기전기소자.

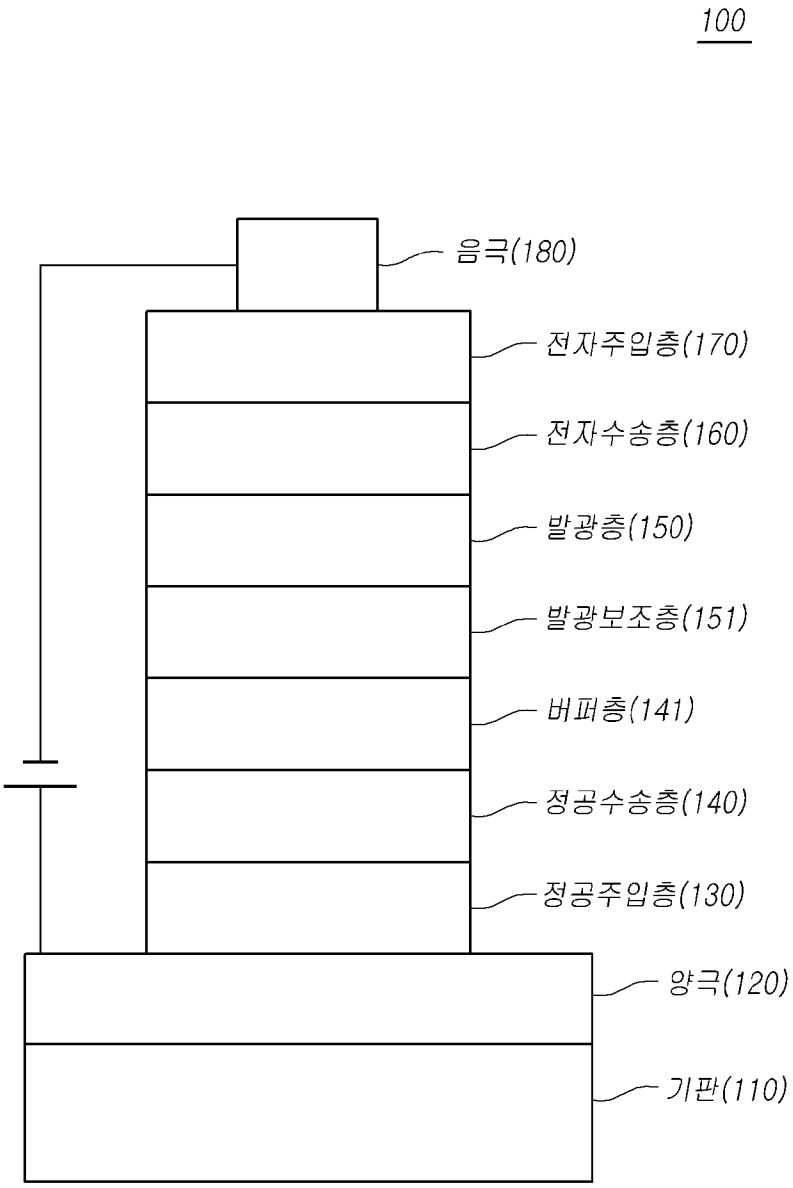
[청구항 10] 제 6항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및

상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부를 포함하는 전자장치.

[청구항 11] 제 10항에 있어서,
상기 유기전기소자는 유기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체,
유기트랜지스터, 및 단색 또는 백색 조명용 소자 중 하나인 것을 특징으로 하는 전자장치.

WO 2018/225992 PCT/KR2018/006291

[도1]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/KR2018/006291

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

H01L 51/00; H01L 51/54; C07D 209/82; C09K 11/06; C07D 307/91; C07D 209/86; C07C 211/54; H01L 51/50

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched
Korean Utility models and applications for Utility models: IPC as above
Japanese Utility models and applications for Utility models: IPC as above

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

eKOMPASS (KIPO internal), STN Express (Registry, Caplus), Google & Keywords: organic electric element, dibenzofuran, dibenzothiophene, dibenzoselenophene

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-2015-0072768 A (SK CHEMICALS CO., LTD.) 30 June 2015 See abstract; claims 1-3, 5-9; paragraph [0002].	1-11
X	CN 106478566 A (SHANGHAI TAOE CHEMICAL TECH. CO., LTD.) 08 March 2017 See abstract; claims 1-10.	1-11
A	KR 10-2016-0054870 A (PNH TECH) 17 May 2016 See claims 1-10.	1-11
A	KR 10-2014-0001568 A (SK CHEMICALS CO., LTD.) 07 January 2014 See claims 1-10.	1-11
PX	KR 10-2017-0142256 A (DUK SAN NEOLUX CO., LTD.) 28 December 2017 See abstract; claims 1, 2, 4-8.	1-11

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☒ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
07 SEPTEMBER 2018 (07.09.2018)	**07 SEPTEMBER 2018 (07.09.2018)**

Name and mailing address of the ISA/KR	Authorized officer
Korean Intellectual Property Office Government Complex Daejeon Building 4, 189, Cheongsa-ro, Seo-gu, Daejeon, 35208, Republic of Korea Facsimile No. +82-42-481-8578	Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/KR2018/006291

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2015-0072768 A	30/06/2015	NONE	
CN 106478566 A	08/03/2017	NONE	
KR 10-2016-0054870 A	17/05/2016	NONE	
KR 10-2014-0001568 A	07/01/2014	NONE	
KR 10-2017-0142256 A	28/12/2017	WO 2017-217654 A1	21/12/2017

국 제 조 사 보 고 서

국제출원번호
PCT/KR2018/006291

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

H01L 51/00; H01L 51/54; C07D 209/82; C09K 11/06; C07D 307/91; C07D 209/86; C07C 211/54; H01L 51/50

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌

한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC
일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))

eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템), STN Express(Registry, Caplus), Google & 키워드: 유기전기소자, 디벤조퓨란, 디벤조티오펜, 디벤조셀레노펜

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2015-0072768 A (에스케이케미칼주식회사) 2015.06.30 요약; 청구항 1-3, 5-9; 단락 [0002] 참조.	1-11
X	CN 106478566 A (SHANGHAI TAOE CHEMICAL TECH. CO., LTD.) 2017.03.08 요약; 청구항 1-10 참조.	1-11
A	KR 10-2016-0054870 A ((주)피엔에이치테크) 2016.05.17 청구항 1-10 참조.	1-11
A	KR 10-2014-0001568 A (에스케이케미칼주식회사) 2014.01.07 청구항 1-10 참조.	1-11
PX	KR 10-2017-0142256 A (덕산네오룩스 주식회사) 2017.12.28 요약; 청구항 1, 2, 4-8 참조.	1-11

☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.

☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

"A" 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌

"E" 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌

"L" 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌

"O" 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌

"P" 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

"T" 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌

"X" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.

"Y" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.

"&" 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

국제조사의 실제 완료일	국제조사보고서 발송일
2018년 09월 07일 (07.09.2018)	2018년 09월 07일 (07.09.2018)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소
대한민국 특허청
(35208) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)
팩스 번호 +82-42-481-8578

심사관
이동욱
전화번호 +82-42-481-8163

국제조사보고서
대응특허에 관한 정보

국제출원번호
PCT/KR2018/006291

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2015-0072768 A	2015/06/30	없음	
CN 106478566 A	2017/03/08	없음	
KR 10-2016-0054870 A	2016/05/17	없음	
KR 10-2014-0001568 A	2014/01/07	없음	
KR 10-2017-0142256 A	2017/12/28	WO 2017-217654 A1	2017/12/21