(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2017 년 1 월 5 일 (05.01.2017)

WIPO | PCT

(10) 국제공개번호
WO 2017/003188 A1

(51) 국제특허분류:
C07D 245/04 (2006.01) *C07D 405/04* (2006.01)
C07D 209/82 (2006.01) *C07D 321/00* (2006.01)
C07D 307/91 (2006.01) *C09K 11/06* (2006.01)
C07D 333/76 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
C07D 403/04 (2006.01)

(21) 국제출원번호: PCT/KR2016/006980

(22) 국제출원일: 2016 년 6 월 29 일 (29.06.2016)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:
10-2015-0093068 2015 년 6 월 30 일 (30.06.2015) KR

(71) 출원인: **주식회사 두산 (DOOSAN CORPORATION)** [KR/KR]; 04563 서울시 중구 장충단로 275, Seoul (KR).

(72) 발명자: **손효석 (SON, Hyo Suk)**; 13638 경기도 성남시 분당구 구미로 16, 407 호, Gyeonggi-do (KR). **김영배 (KIM, Young Bae)**; 16316 경기도 수원시 장안구 정자천로 188 번길 64, 101 동 106 호, Gyeonggi-do (KR). **김회문 (KIM, Hoe Moon)**; 16438 경기도 수원시 팔달구 화양로 50 번길 30, 119 동 1402 호, Gyeonggi-do (KR). **조현종 (JO, Hyun Jong)**; 18401 경기도 화성시 병점로 17-8, 302 호, Gyeonggi-do (KR).

(74) 대리인: **특허법인 정안 (HONESTY & JR PARTNERS INTELLECTUAL PROPERTY LAW GROUP)**; 06103 서울시 강남구 선릉로 615, 5 층, 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, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, 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, 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 제 21 조(3))

— 청구범위 보정 기한 만료 전의 공개이며, 보정서를 접수하는 경우 그에 관하여 별도 공개함 (규칙 48.2(h))

WO 2017/003188 A1

(54) **Title**: ORGANIC LUMINESCENT COMPOUND AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT USING SAME

(54) **발명의 명칭** : 유기 발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자

(57) **Abstract**: The present invention relates to: a novel compound which has an outstanding luminescent ability; and an organic electroluminescent element having improved properties including high luminous efficiency, low drive voltage and long lifespan due to the inclusion of said compound in one or more organic layer.

(57) **요약서**: 본 발명은 발광능이 우수한 신규의 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써 높은 발광 효율, 낮은 구동 전압, 장수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

명세서

발명의 명칭: 유기 발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자

기술분야

[1] 본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 전자 또는 정공 주입 및 수송능, 발광능 등이 우수한 신규한 디아조신계 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써 발광 효율, 구동 전압, 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

[2] 1950년대 베르나소스(Bernanose)의 유기 박막 발광 관측을 시점으로 1965년 안트라센 단결정을 이용한 청색 전기발광으로 이어진 유기 전계 발광 (electroluminescent, EL) 소자(유기 EL 소자)에 대한 연구는 1987년 탕(Tang)에 의하여 정공층과 발광층의 기능층으로 나눈 적층구조의 유기 전계 발광 소자가 제시되었다. 이후 고효율, 고수명의 유기 전계 발광 소자를 만들기 위하여, 소자 내 각각의 특징적인 유기물 층을 도입하는 형태로 발전하여 왔으며, 이에 사용되는 특화된 물질의 개발로 이어졌다.

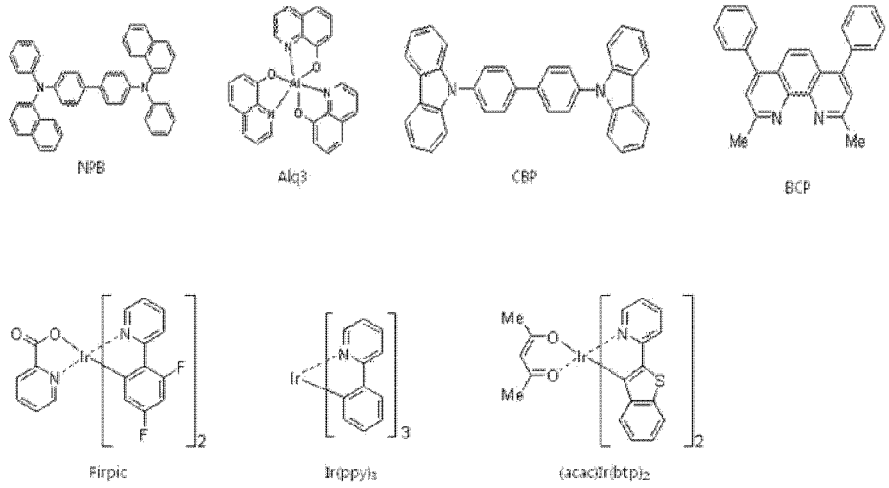
[3] 유기 전계 발광 소자는 두 전극 사이에 전압을 걸어 주면 양극에서는 정공이 주입되고, 음극에서는 전자가 유기물층으로 주입된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 이때 유기물층으로 사용되는 물질은 그 기능에 따라, 발광 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다.

[4] 유기 전계 발광 소자의 발광층 형성 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료로 구분될 수 있다. 그 밖에, 보다 나은 천연색을 구현하기 위한 발광 재료로 노란색 및 주황색 발광 재료도 사용된다. 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 재료로서 호스트/도펀트 계를 사용할 수 있다. 도펀트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도펀트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도펀트로 나눌 수 있다. 이러한 인광 재료의 개발은 이론적으로 형광에 비해 4배까지의 발광 효율을 향상시킬 수 있어 인광 도펀트뿐만 아니라 인광 호스트 재료들에 대해 관심이 집중되고 있다.

[5] 현재까지 정공 주입층, 정공 수송층. 정공 차단층, 전자 수송층으로는, 하기 화학식으로 표현된 NPB, BCP, Alq_3 등이 널리 알려져 있고, 발광 재료는 안트라센 유도체들이 형광 도펀트/호스트 재료로서 보고되고 있다. 특히 발광 재료 중 효율 향상 측면에서 큰 장점을 가지고 있는 인광 재료로서는 Firpic, $Ir(ppy)_3$, $(acac)Ir(btp)_2$ 등과 같은 Ir을 포함하는 금속 착체 화합물이 청색, 녹색, 적색 도판트 재료로 사용되고 있다. 현재까지는 CBP가 인광 호스트 재료로

우수한 특성을 나타내고 있다.

[6]



[7] 그러나 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 유리전이온도가 낮고 열적 안정성이 매우 좋지 않아 유기 전계 발광 소자에서의 수명 측면에서 만족할 만한 수준이 되지 못하고 있다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

[8] 본 발명은 유기 전계 발광 소자에 적용할 수 있으며, 전자 또는 정공 주입 및 수송능, 발광능 등이 모두 우수한 신규 유기 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.

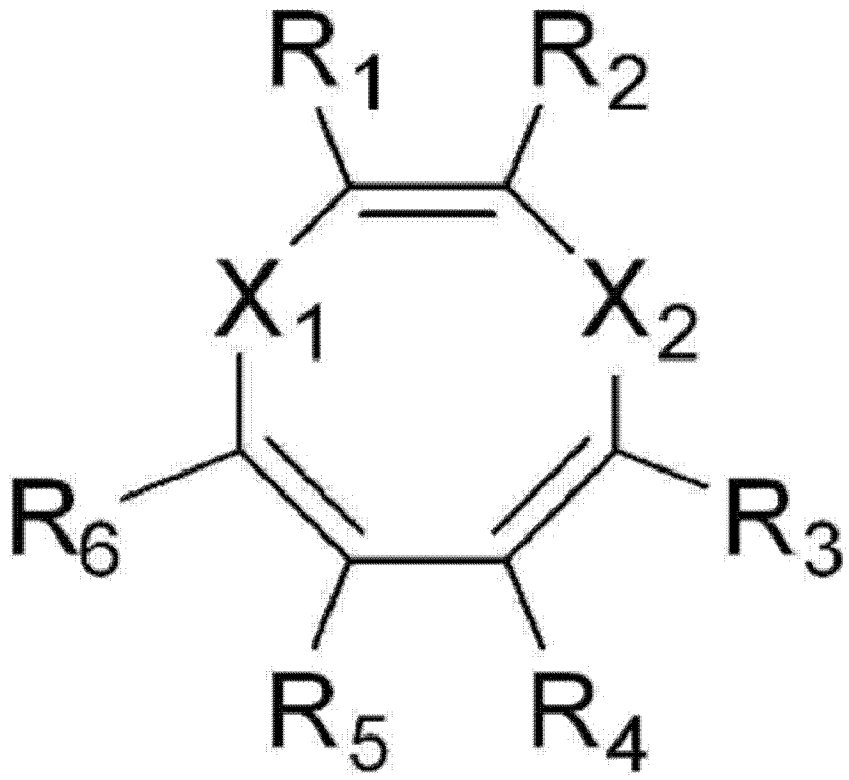
[9] 또한 본 발명은 상기 신규 유기 화합물을 포함하여 낮은 구동 전압과 높은 발광 효율을 나타내며 장수명의 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 또 다른 목적으로 한다.

과제 해결 수단

[10] 상기 목적을 달성하기 위하여, 본 발명의 일 구현 예에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다:

[11] [화학식 1]

[12]

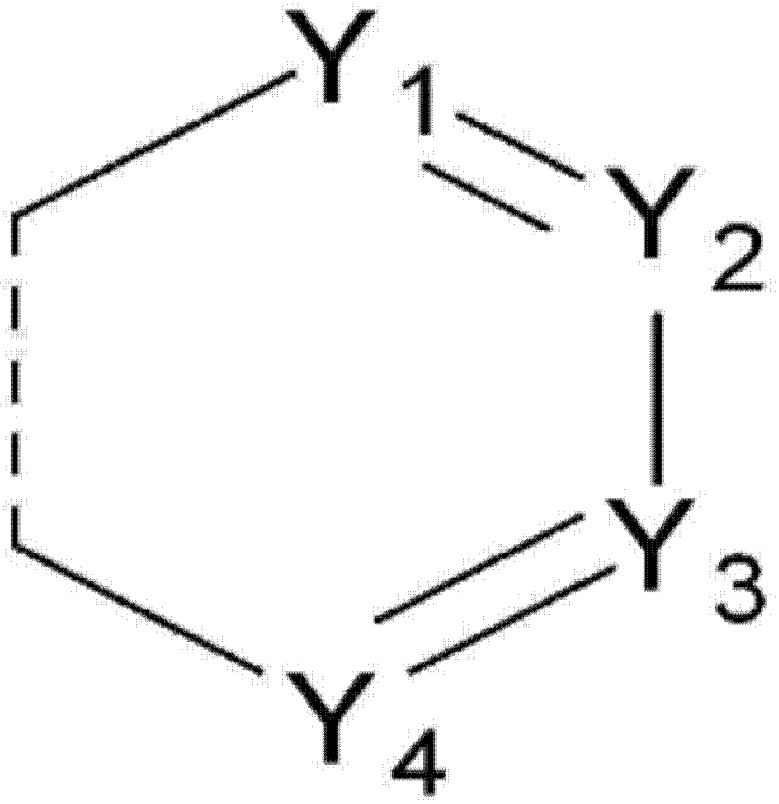


[13] 상기 화학식 1에서,

[14] R_1과 R_2, R_3과 R_4 및 R_5과 R_6중 적어도 하나는 하기 화학식 2 내지 화학식 8 중 어느 하나로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하고;

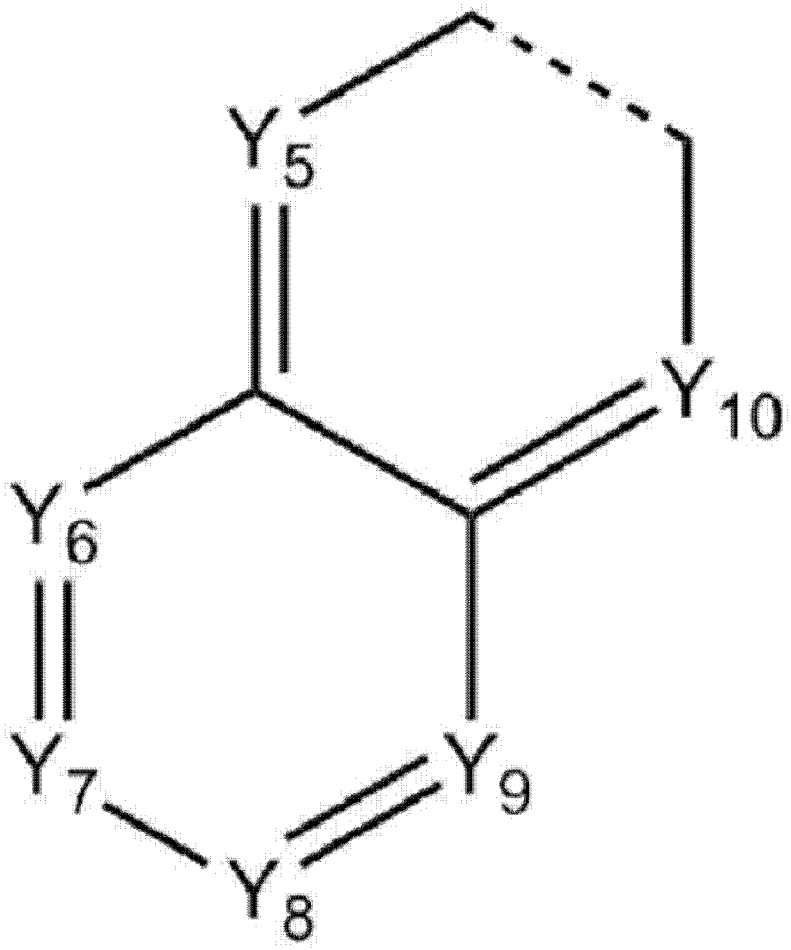
[15] [화학식 2]

[16]



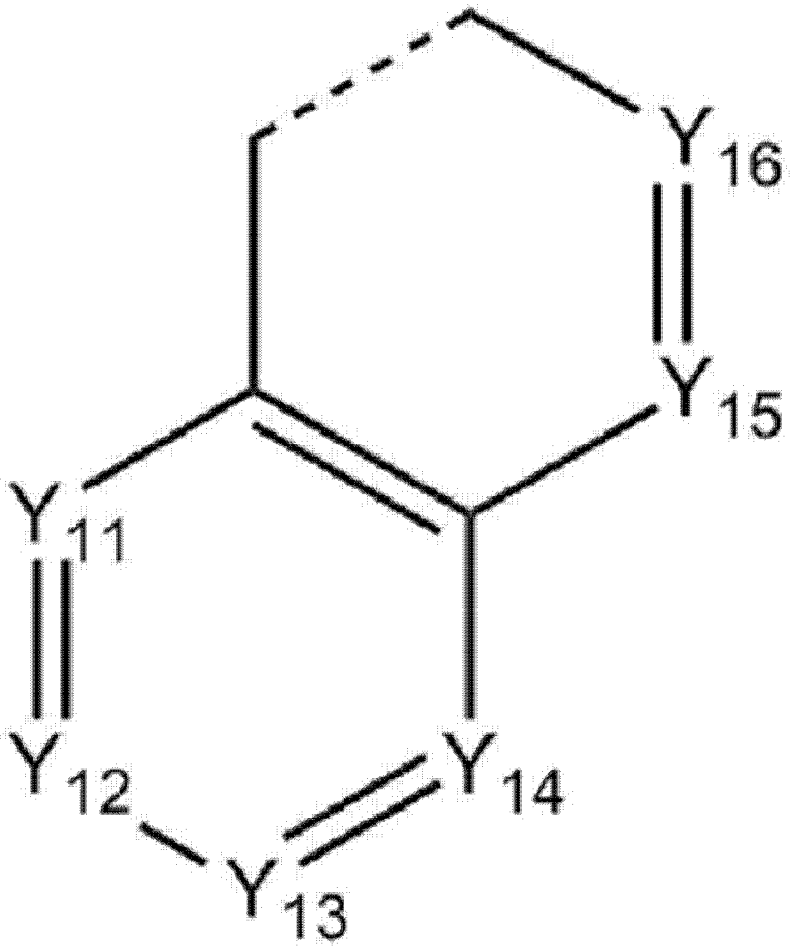
[17] [화학식 3]

[18]



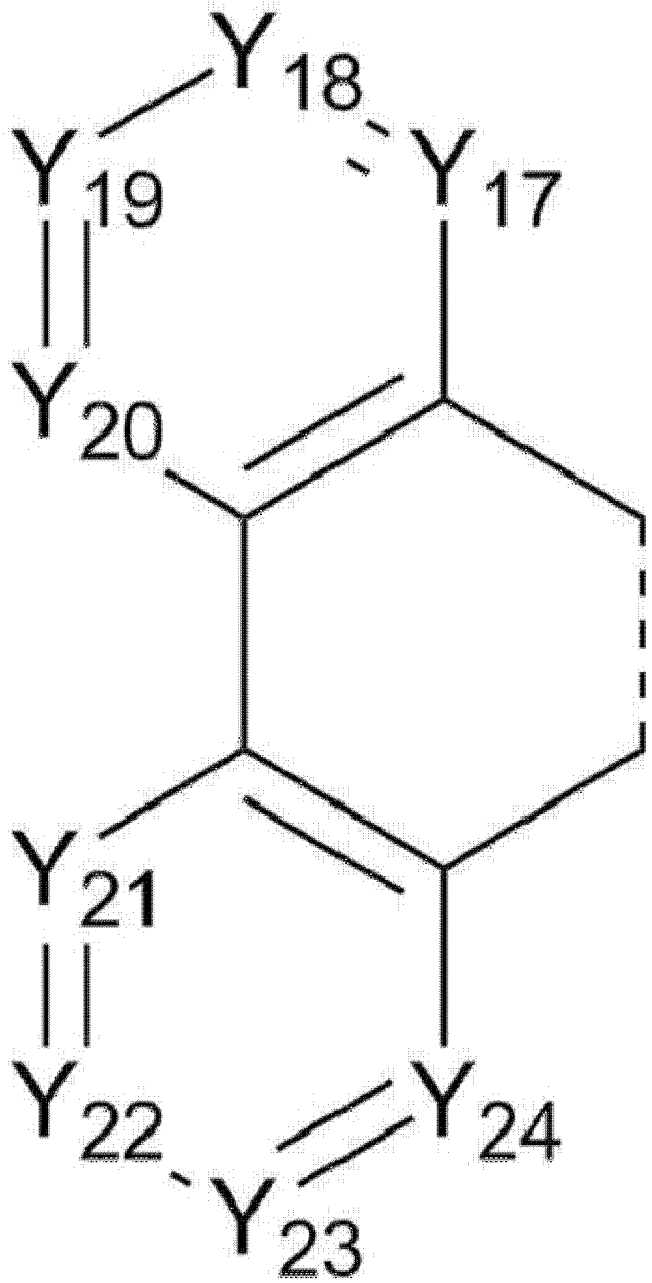
[19] [화학식 4]

[20]



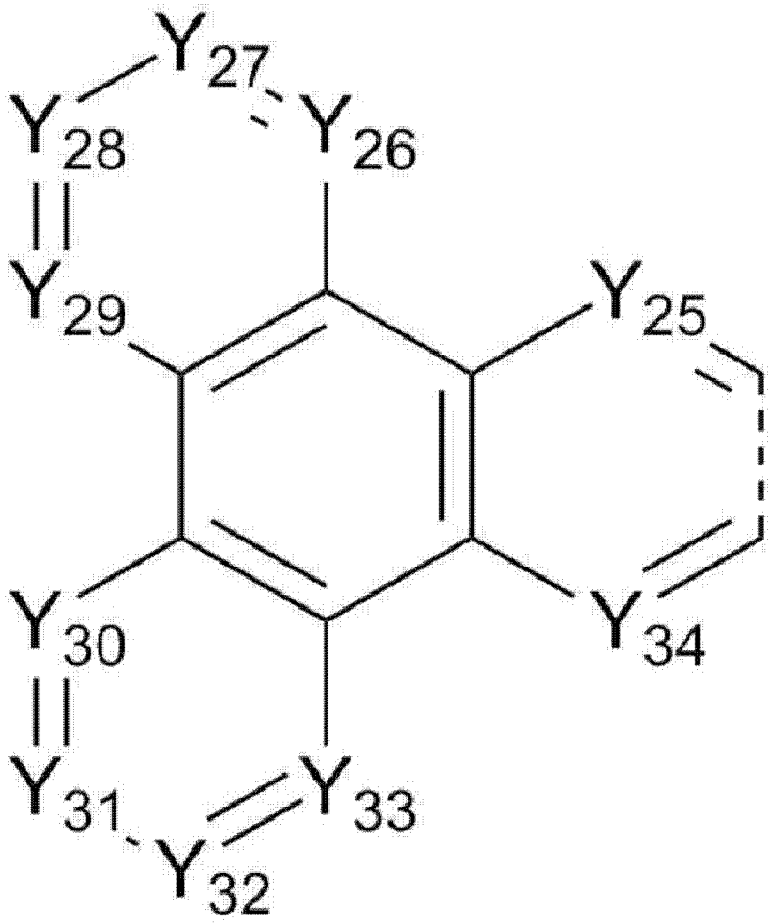
[21] [화학식 5]

[22]



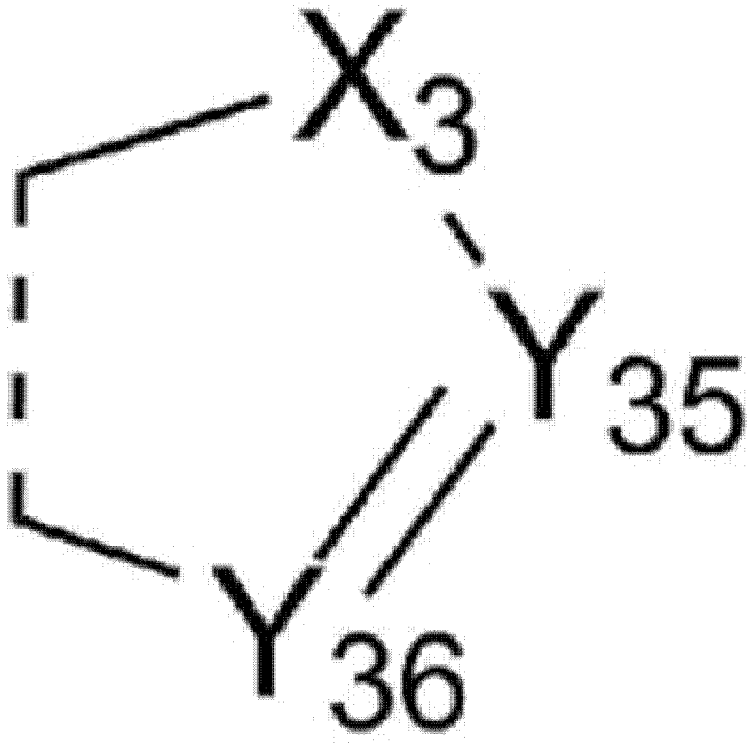
[23] [화학식 6]

[24]



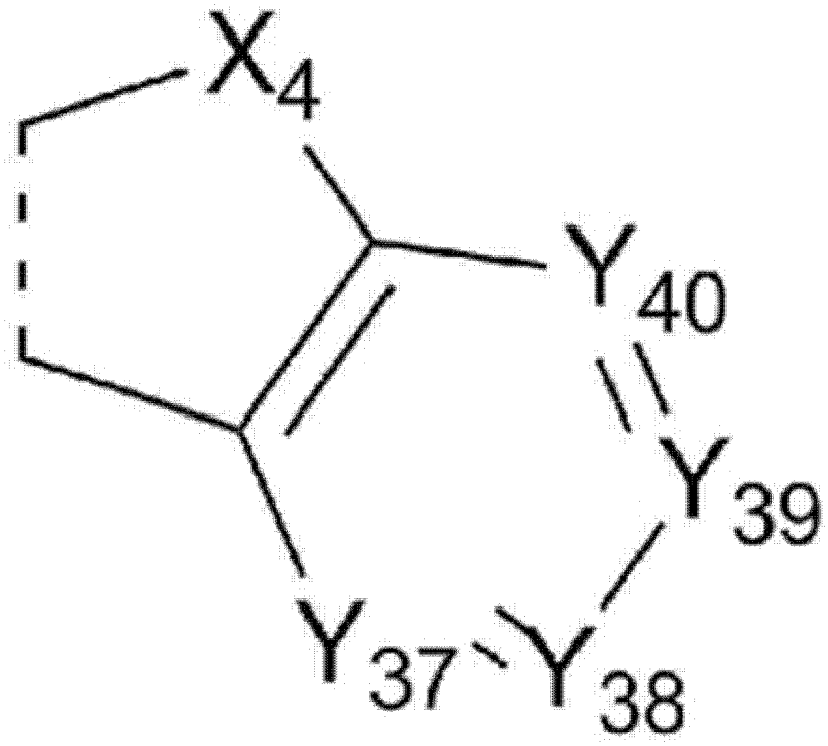
[25] [화학식 7]

[26]



[27] [화학식 8]

[28]



[29] 상기 화학식 1 내지 화학식 8에서,

[30] 점선은 축합이 이루어지는 부분이며;

[31] X_1 내지 X_4는 각각 독립적으로 O, S, Se, P, $N(Ar_1)$, $C(Ar_2)(Ar_3)$ 및 $Si(Ar_4)(Ar_5)$으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 X_3 내지 X_4가 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[32] Y_1 내지 Y_{40}은 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_7)$이고, 상기 Y_1 내지 Y_{40}이 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[33] 상기 화학식 2 내지 화학식 8로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하지 않는 R_1 내지 R_6는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며;

[34] R_7은 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의

아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접한 각각의 R_7가 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R_7이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

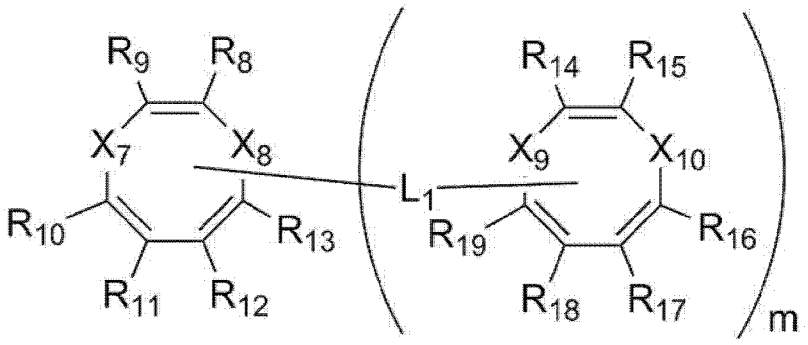
[35] Ar_1 내지 Ar_5는 각각 독립적으로 C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 상기 Ar_1 내지 Ar_5가 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[36] 상기 R_1 내지 R_7 및 Ar_1 내지 Ar_5의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[37] 본 발명의 다른 구현 예에 따르면, 하기 화학식 9로 표시되는 화합물을 제공한다:

[38] [화학식 9]

[39]



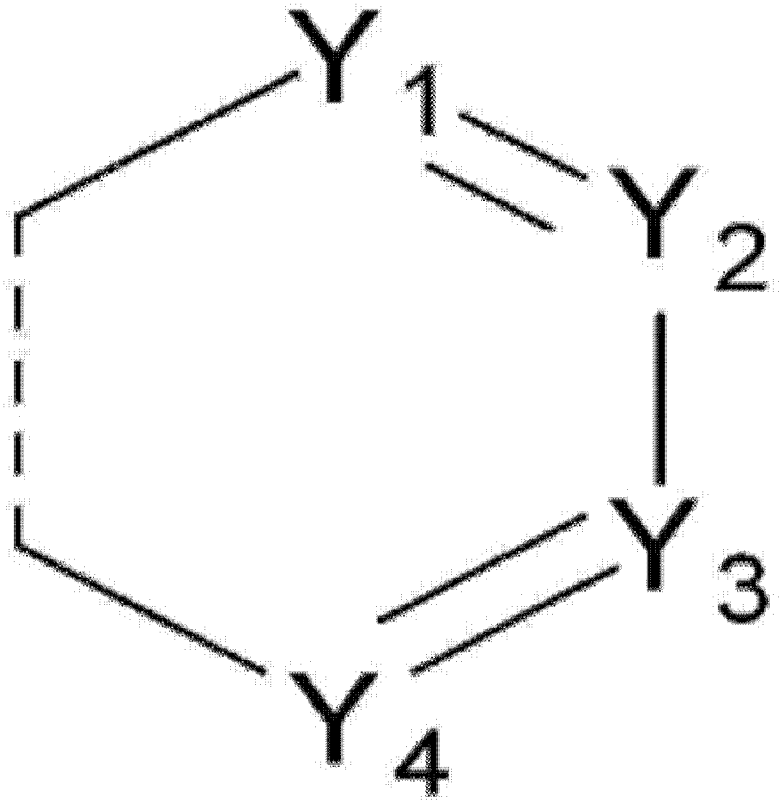
[40] 상기 화학식 9에서,

[41] R_8과 R_9, R_{10}과 R_{11}, R_{12}와 R_{13}, R_{14}와 R_{15}, R_{16}과 R_{17} 및 R_{18}과 R_{19} 중 적어도 하나, 바람직하게는 R_8과 R_9, R_{10}과 R_{11} 및 R_{12}와 R_{13} 중 적어도 하나와 R_{14}와 R_{15}, R_{16}과 R_{17} 및 R_{18}과 R_{19}중 적어도 하나는 하기 화학식 2 내지 화학식 8 중 어느 하나로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하고, 상기 R_{14} 내지 R_{19}가 복수 개인

경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

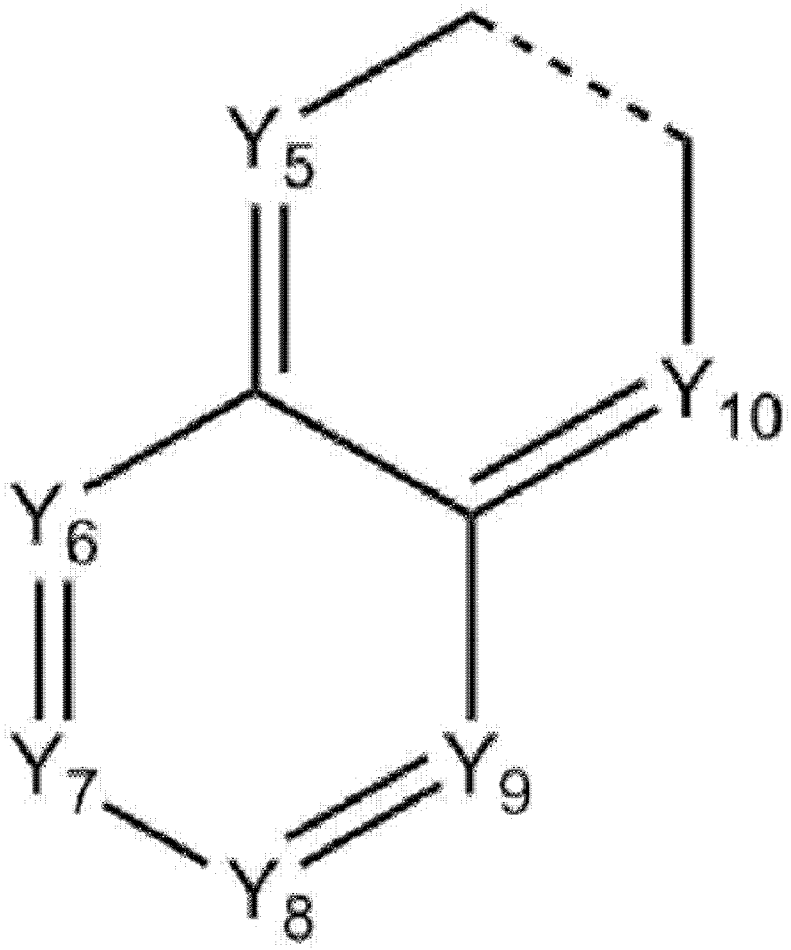
[42] [화학식 2]

[43]



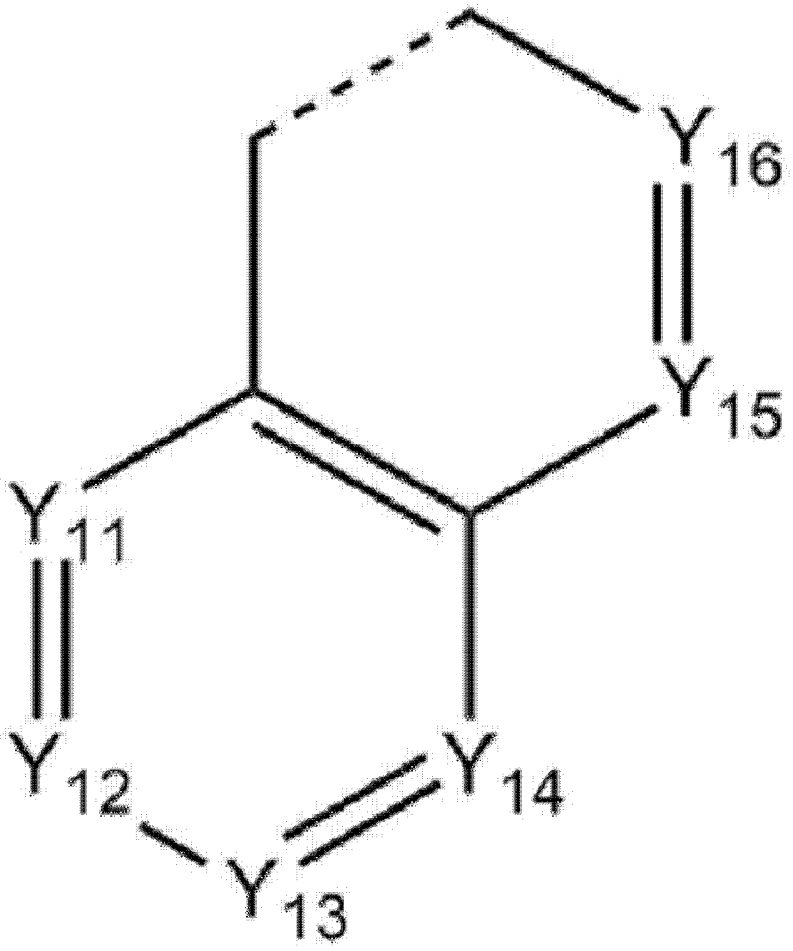
[44] [화학식 3]

[45]



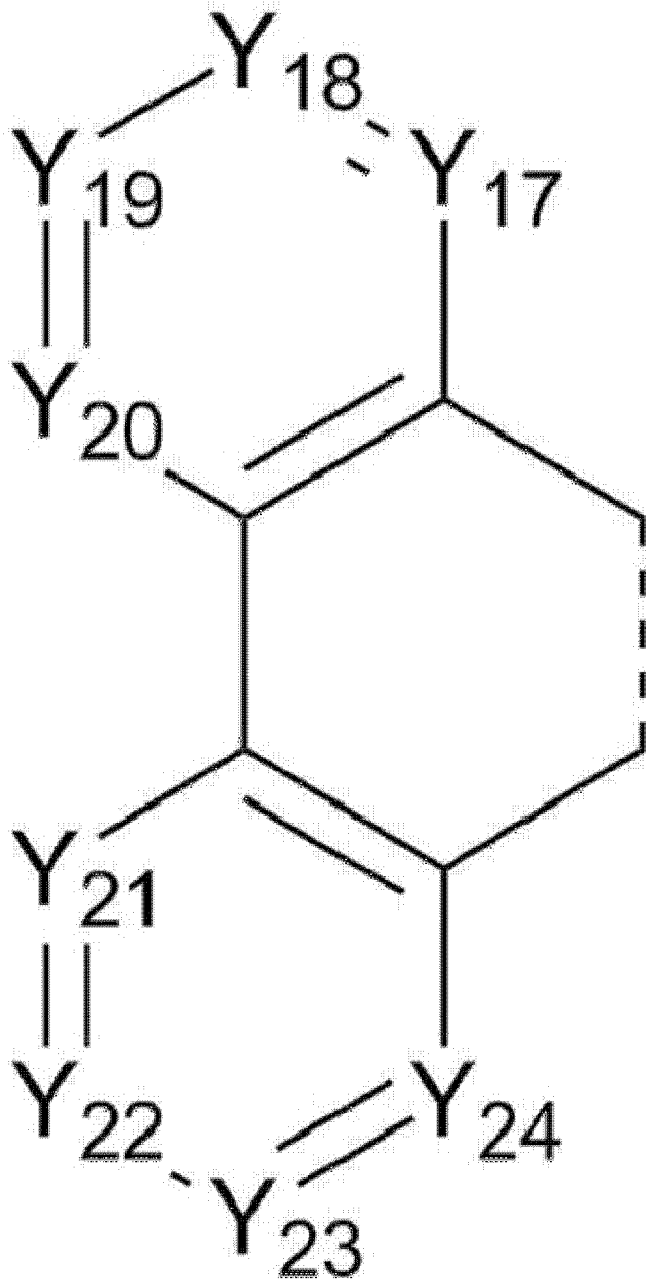
[46] [화학식 4]

[47]



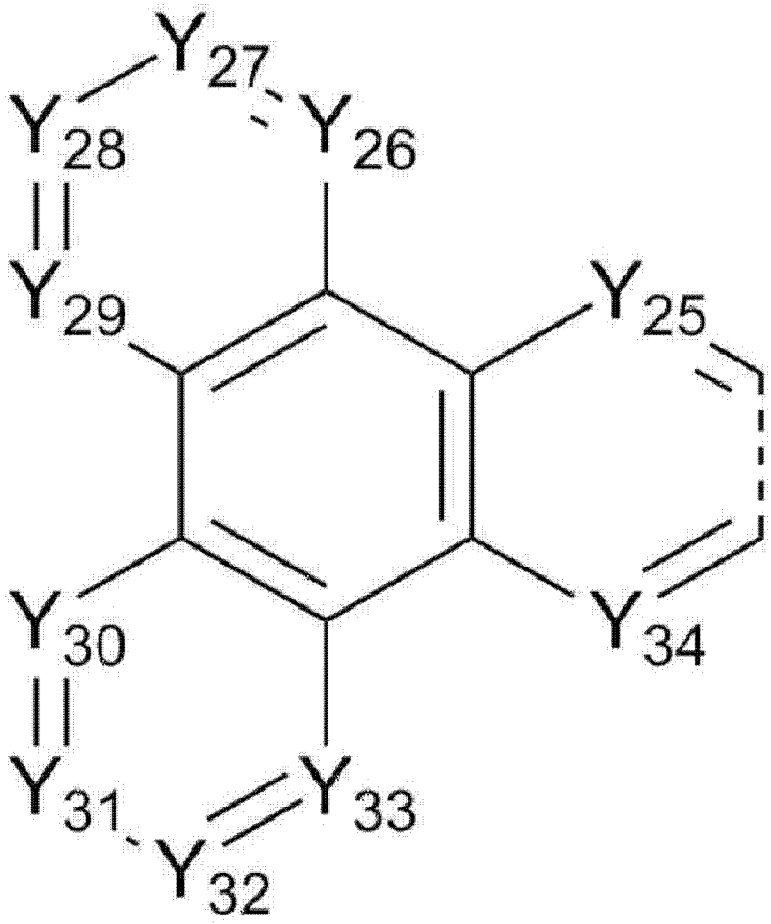
[48] [화학식 5]

[49]



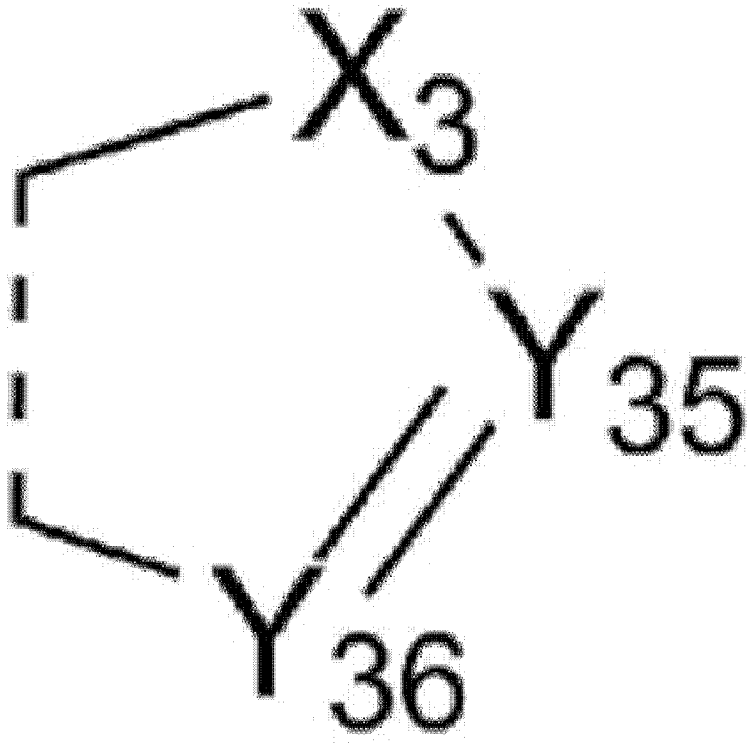
[50] [화학식 6]

[51]



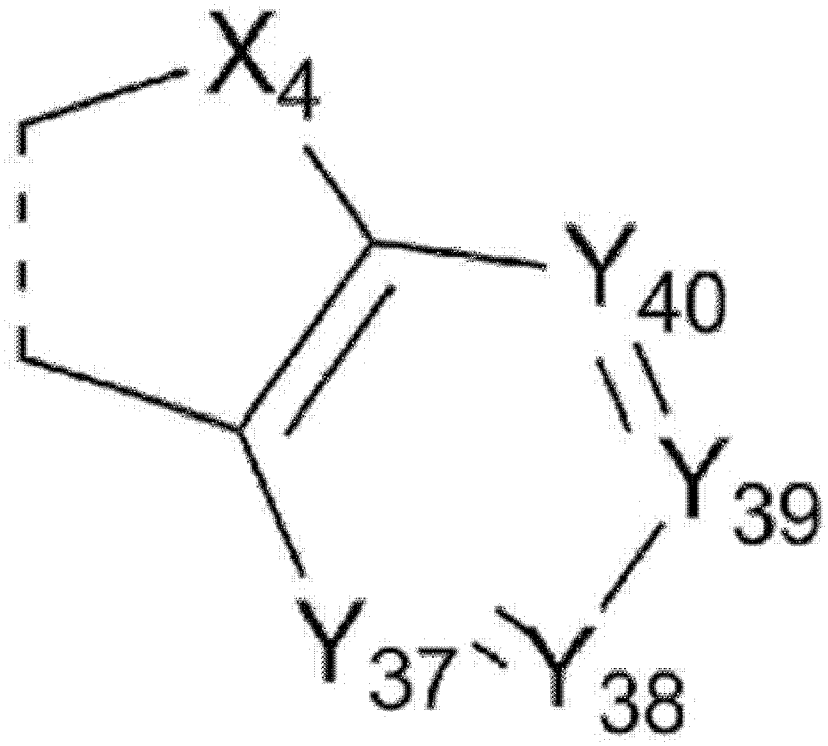
[52] [화학식 7]

[53]



[54] [화학식 8]

[55]



[56] 상기 화학식 2 내지 화학식 9에서,

[57] 점선은 축합이 이루어지는 부분이며;

[58] m은 1 또는 2의 정수이며;

[59] X_3 내지 X_4 및 X_7 내지 X_{10}은 각각 독립적으로 O, S, Se, P, $N(Ar_1)$, $C(Ar_2)(Ar_3)$ 및 $Si(Ar_4)(Ar_5)$으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 X_3 내지 X_4과 X_9 내지 X_{10}이 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[60] L_1은 단일결합, C_6~C_{18}의 아릴렌기 또는 핵원자수 5 내지 18개의 헤테로아릴렌기이고, 바람직하게는 페닐렌기, 비페닐렌기, 카바졸릴기 또는 트리아지닐기일 수 있고, 상기 L_1이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[61] Y_1 내지 Y_{40}은 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_7)$이고, 상기 Y_1 내지 Y_{40}이 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[62] R_7은 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접한 각각의 R_7가 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R_7이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나

상이하며;

[63] 상기 화학식 2 내지 화학식 8로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하지 않는 R_8 내지 R_{19}은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며;

[64] Ar_1 내지 Ar_5는 각각 독립적으로 C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 상기 Ar_1 내지 Ar_5가 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[65] 상기 R_7 내지 R_{19} 및 Ar_1 내지 Ar_5의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[66] 또한, 본 발명은 (i) 양극, (ii) 음극, 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[67]

[68] 본 발명에서 "알킬"은 탄소수 1 내지 40개의 직쇄 또는 측쇄의 포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[69] 본 발명에서 "알케닐(alkenyl)"은 탄소-탄소 이중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40개의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를

의미한다. 이의 예로는 비닐(vinyl), 알릴(allyl), 이소프로펜일(isopropenyl), 2-부텐일(2-butenyl) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[70] 본 발명에서 "알키닐(alkynyl)"은 탄소-탄소 삼중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40개의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 에티닐(ethynyl), 2-프로파닐(2-propynyl) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[71] 본 발명에서 "아릴"은 단독 고리 또는 2이상의 고리가 조합된 탄소수 6 내지 60개의 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소만을 포함(예를 들어, 탄소수는 8 내지 60개일 수 있음)하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromacity)를 갖는 1가 치환기도 포함될 수 있다. 이러한 아릴의 예로는 페닐, 나프틸, 페난트릴, 안트릴, 플루오레닐 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[72] 본 발명에서 "헤테로아릴"은 핵원자수 5 내지 60개의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이때, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, P, S 및 Se 중에서 선택된 헤테로원자로 치환된다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합 되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소 외에 N, O, P, S 및 Se 중에서 선택된 헤테로 원자를 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromacity)를 갖는 1가 그룹도 포함하는 것으로 해석된다. 이러한 헤테로아릴의 예로는 피리딜, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 트리아지닐과 같은 6-원 모노사이클릭 고리, 페녹사티에닐(phenoxathienyl), 인돌리지닐(indolizinyl), 인돌릴(indolyl), 퓨리닐(purinyl), 퀴놀릴(quinolyl), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazolyl)과 같은 폴리사이클릭 고리 및 2-퓨라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[73] 본 발명에서 "아릴옥시"는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R은 탄소수 6 내지 60개의 아릴을 의미한다. 이러한 아릴옥시의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[74] 본 발명에서 "알킬옥시"는 R'O-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R'는 탄소수 1 내지 40개의 알킬을 의미하며, 직쇄(linear), 측쇄(branched) 또는 사이클릭(cyclic) 구조를 포함할 수 있다. 알킬옥시의 예로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 1-프로폭시, t-부톡시, n-부톡시, 펜톡시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[75] 본 발명에서 "아릴아민"은 탄소수 6 내지 60개의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.

[76] 본 발명에서 "시클로알킬"은 탄소수 3 내지 40개의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이러한 사이클로알킬의 예로는 사이클로프로필, 사이클로펜틸, 사이클로헥실,

노르보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantine) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[77] 본 발명에서 "헤테로시클로알킬"은 핵원자수 3 내지 40개의 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미하며, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로 원자로 치환된다. 이러한 헤테로시클로알킬의 예로는 모르폴린, 피페라진 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[78] 본 발명에서 "알킬실릴"은 탄소수 1 내지 40개의 알킬로 치환된 실릴이고, "아릴실릴"은 탄소수 6 내지 60개의 아릴로 치환된 실릴을 의미한다.

[79] 본 발명에서 "축합고리"는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.

발명의 효과

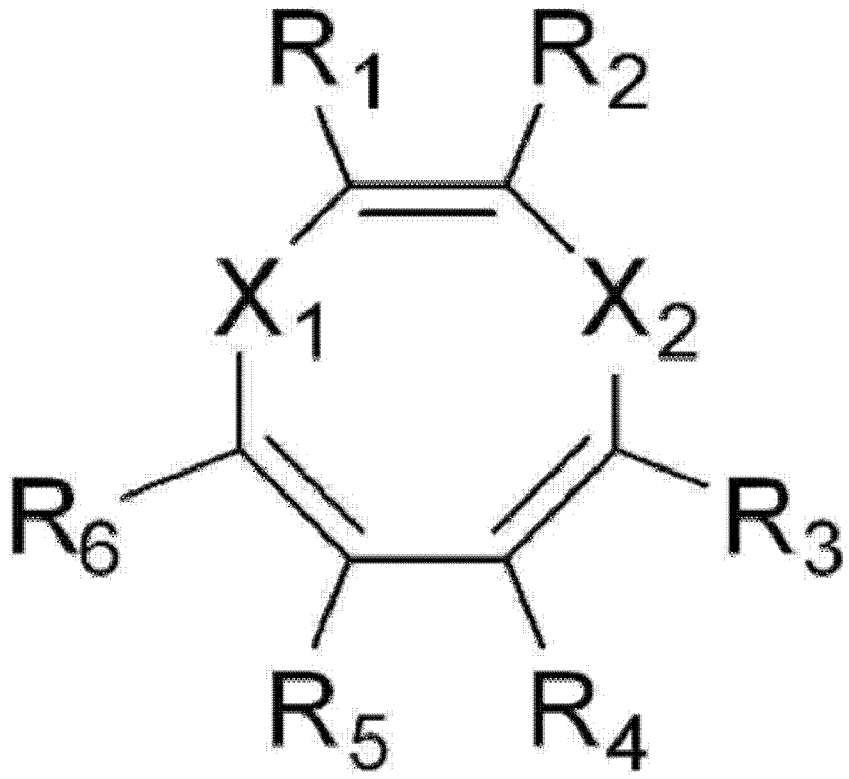
[80] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 열적 안정성 및 발광 특성이 우수하여 유기 전계 발광 소자의 유기물층의 재료로 사용하기에 바람직하다. 특히, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 인광 호스트 재료로 사용할 경우, 종래의 호스트 재료에 비해 우수한 발광 성능, 낮은 구동 전압, 높은 효율 및 장수명의 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있고, 나아가서는 성능 및 수명이 향상된 풀 칼라 디스플레이 패널도 제조할 수 있다.

발명의 실시를 위한 최선의 형태

[81] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다:

[82] [화학식 1]

[83]

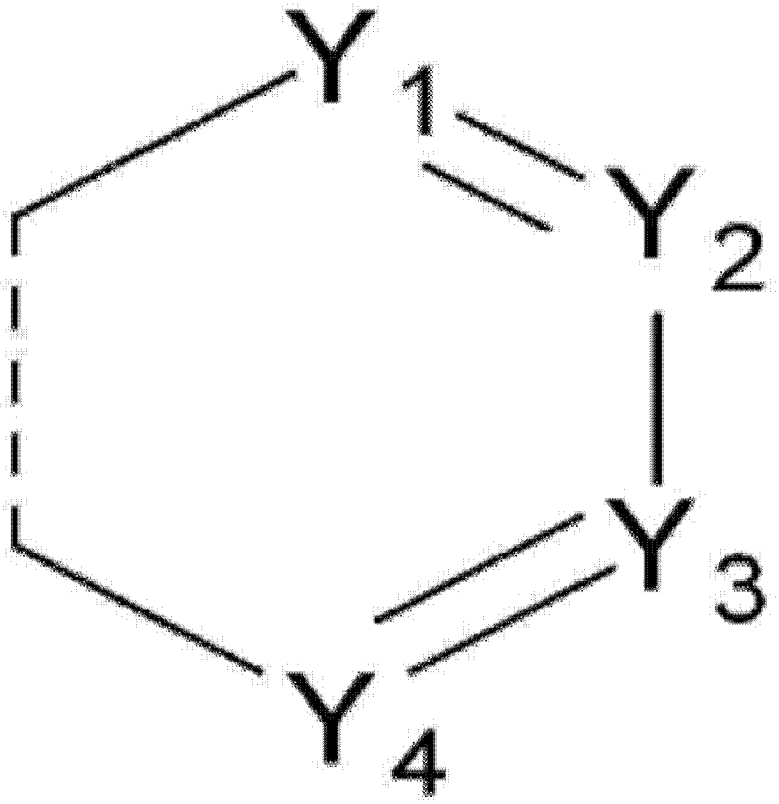


[84] 상기 화학식 1에서,

[85] R_1과 R_2, R_3과 R_4 및 R_5과 R_6중 적어도 하나는 하기 화학식 2 내지 화학식 8 중 어느 하나로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하고;

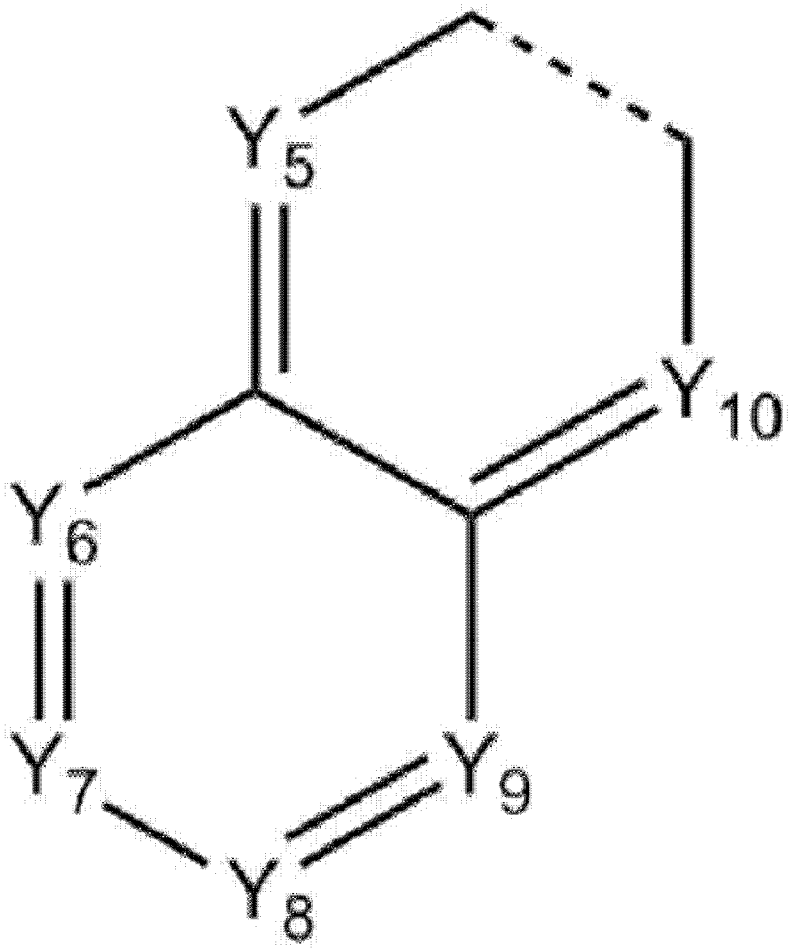
[86] [화학식 2]

[87]



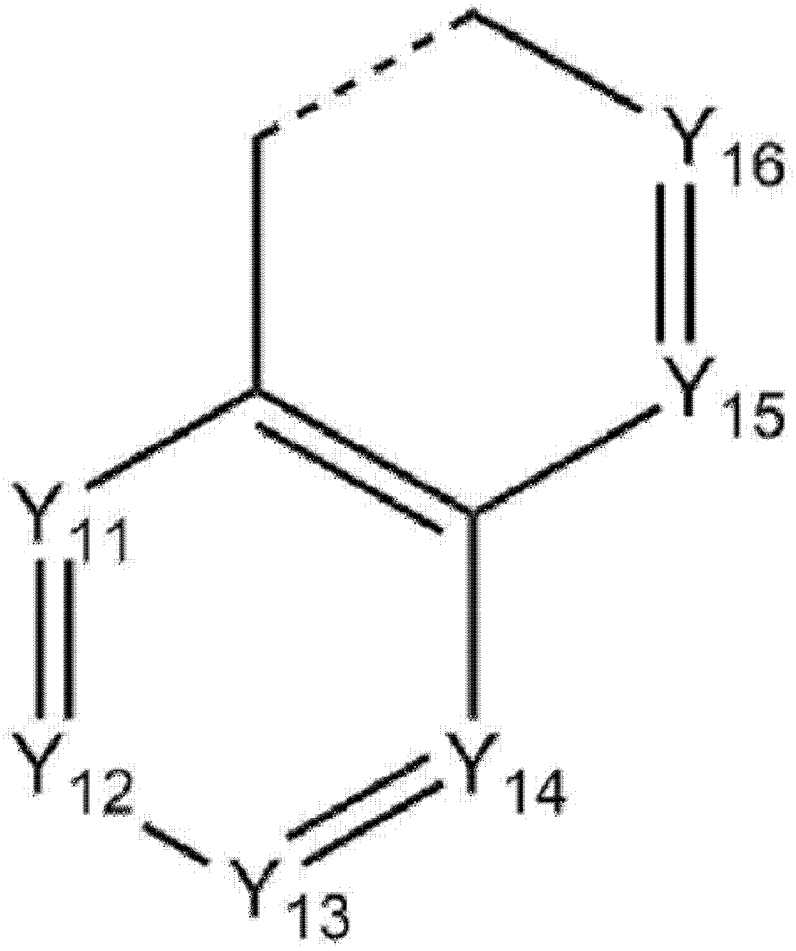
[88] [화학식 3]

[89]



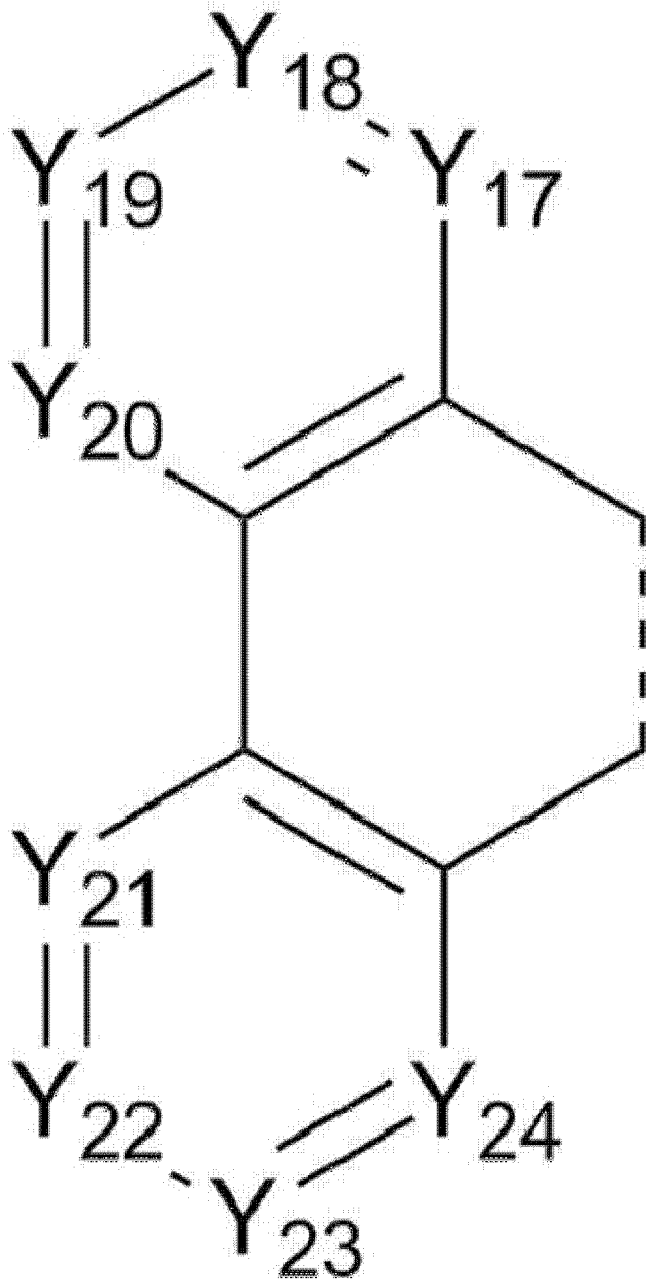
[90] [화학식 4]

[91]



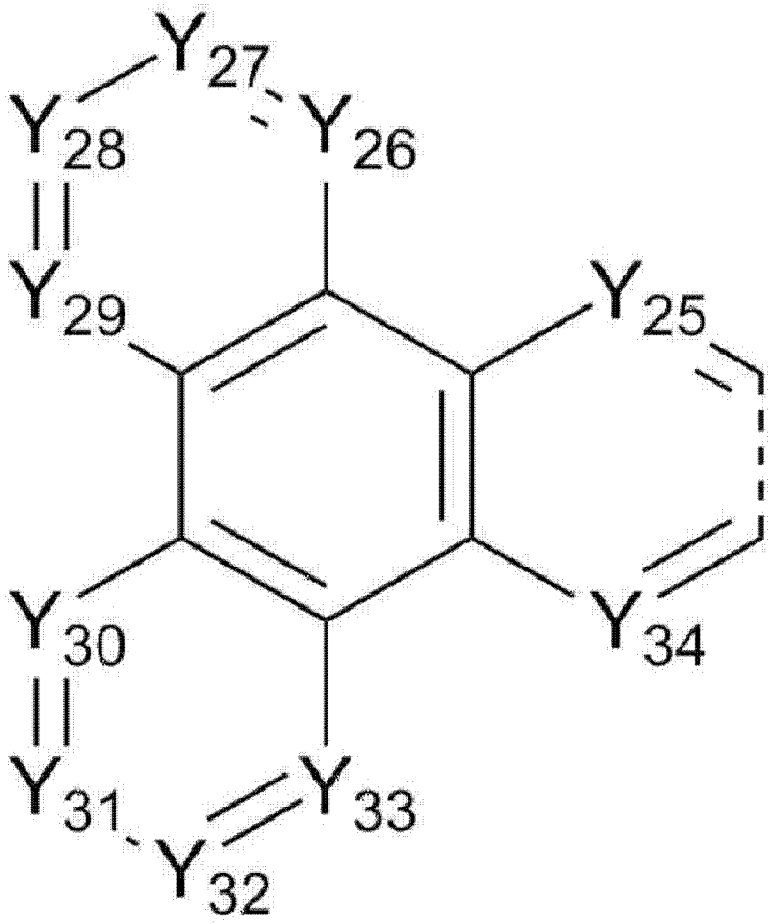
[92] [화학식 5]

[93]



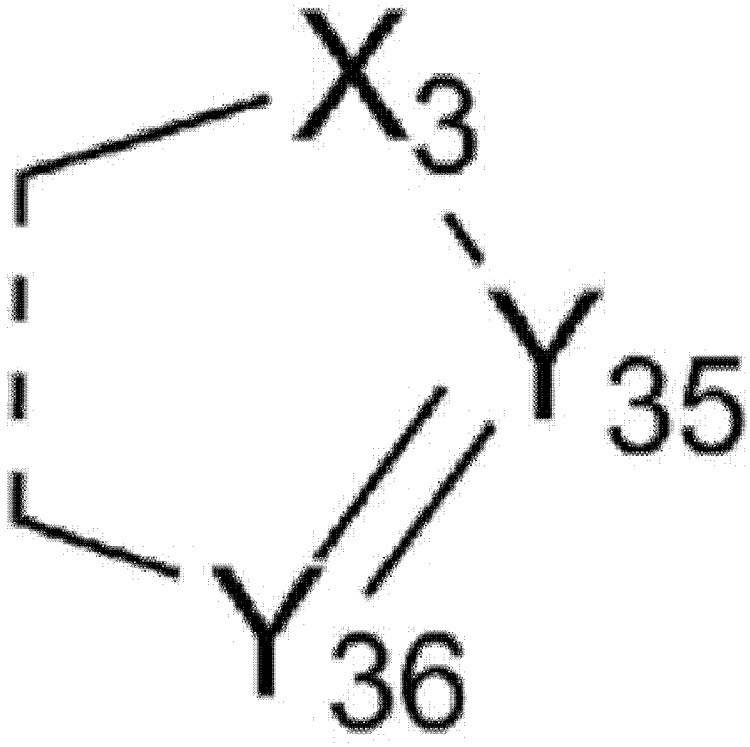
[94] [화학식 6]

[95]



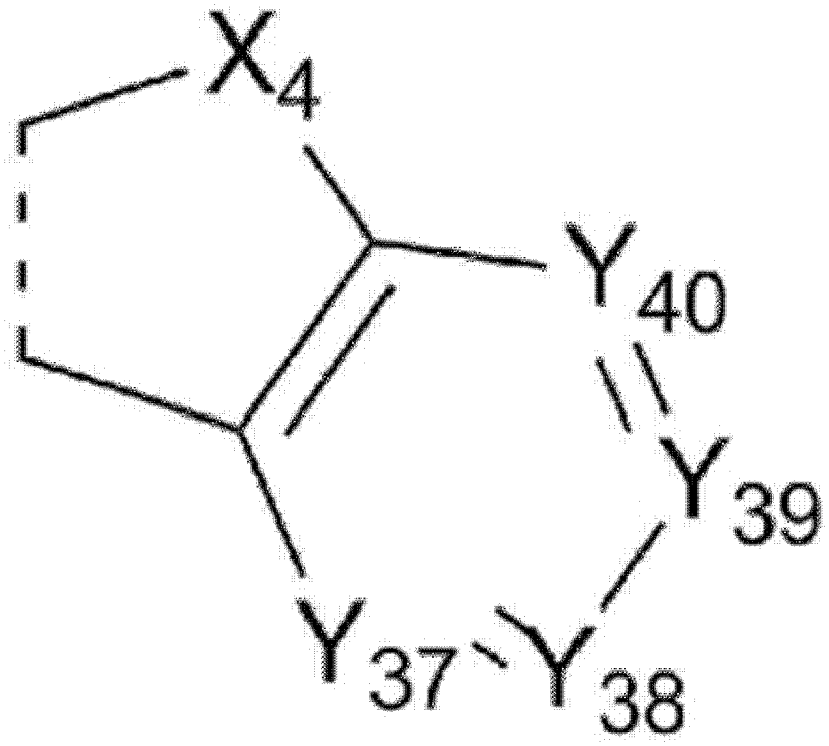
[96] [화학식 7]

[97]



[98] [화학식 8]

[99]



[100] 상기 화학식 1 내지 화학식 8에서,

[101] 점선은 축합이 이루어지는 부분이며;

[102] X_1 내지 X_4는 각각 독립적으로 O, S, Se, P, $N(Ar_1)$, $C(Ar_2)(Ar_3)$ 및 $Si(Ar_4)(Ar_5)$으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 X_3 내지 X_4가 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[103] Y_1 내지 Y_{40}은 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_7)$이고, 상기 Y_1 내지 Y_{40}이 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[104] 상기 화학식 2 내지 화학식 8로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하지 않는 R_1 내지 R_6는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며;

[105] R_7은 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의

아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접한 각각의 R_7가 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R_7이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

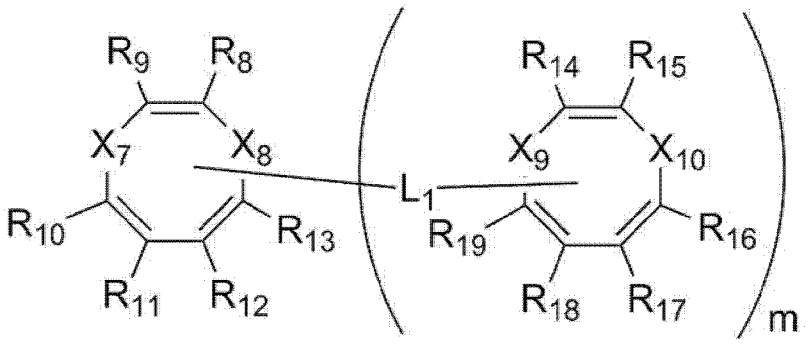
[106] Ar_1 내지 Ar_5는 각각 독립적으로 C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 상기 Ar_1 내지 Ar_5가 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[107] 상기 R_1 내지 R_7 및 Ar_1 내지 Ar_5의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[108] 본 발명의 다른 구현 예에 따르면, 하기 화학식 9로 표시되는 화합물을 제공한다:

[109] [화학식 9]

[110]



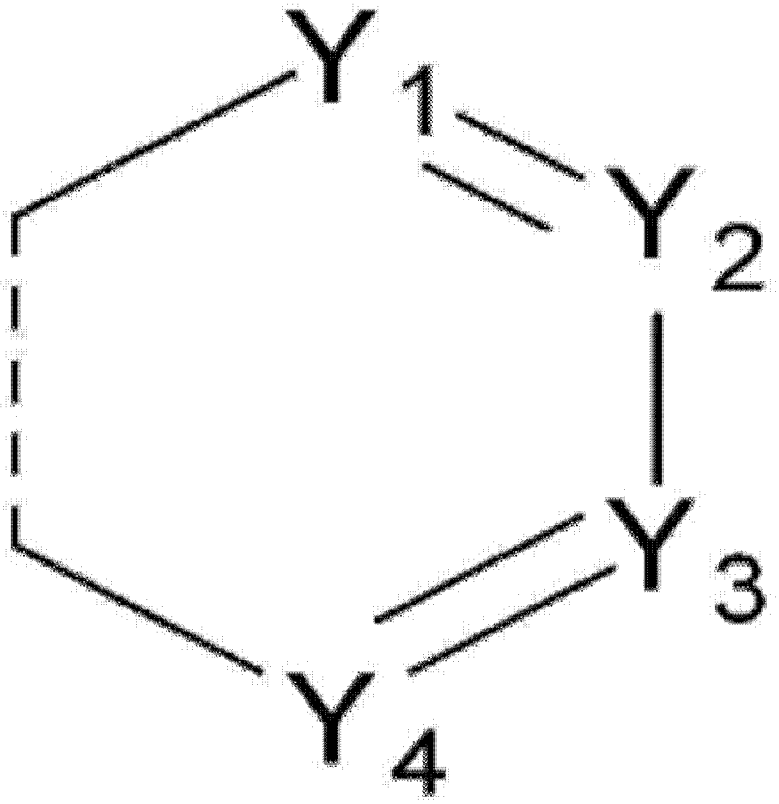
[111] 상기 화학식 9에서,

[112] R_8과 R_9, R_{10}과 R_{11}, R_{12}와 R_{13}, R_{14}와 R_{15}, R_{16}과 R_{17} 및 R_{18}과 R_{19} 중 적어도 하나, 바람직하게는 R_8과 R_9, R_{10}과 R_{11} 및 R_{12}와 R_{13} 중 적어도 하나와 R_{14}와 R_{15}, R_{16}과 R_{17} 및 R_{18}과 R_{19}중 적어도 하나는 하기 화학식 2 내지 화학식 8 중 어느 하나로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하고, 상기 R_{14} 내지 R_{19}가 복수 개인

경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

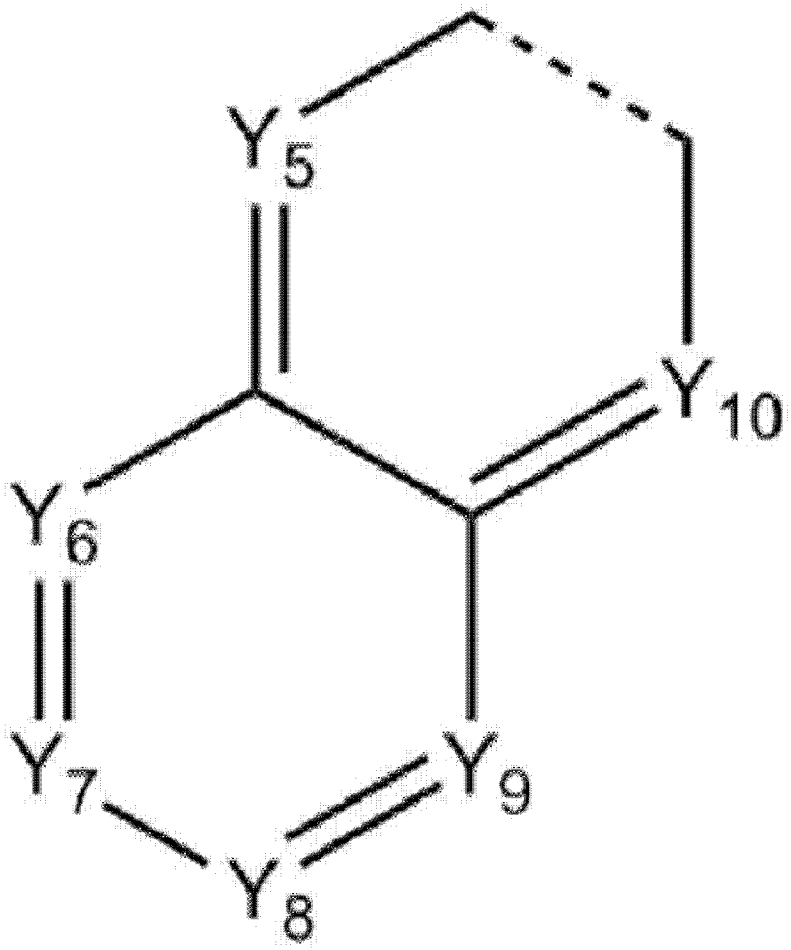
[113] [화학식 2]

[114]



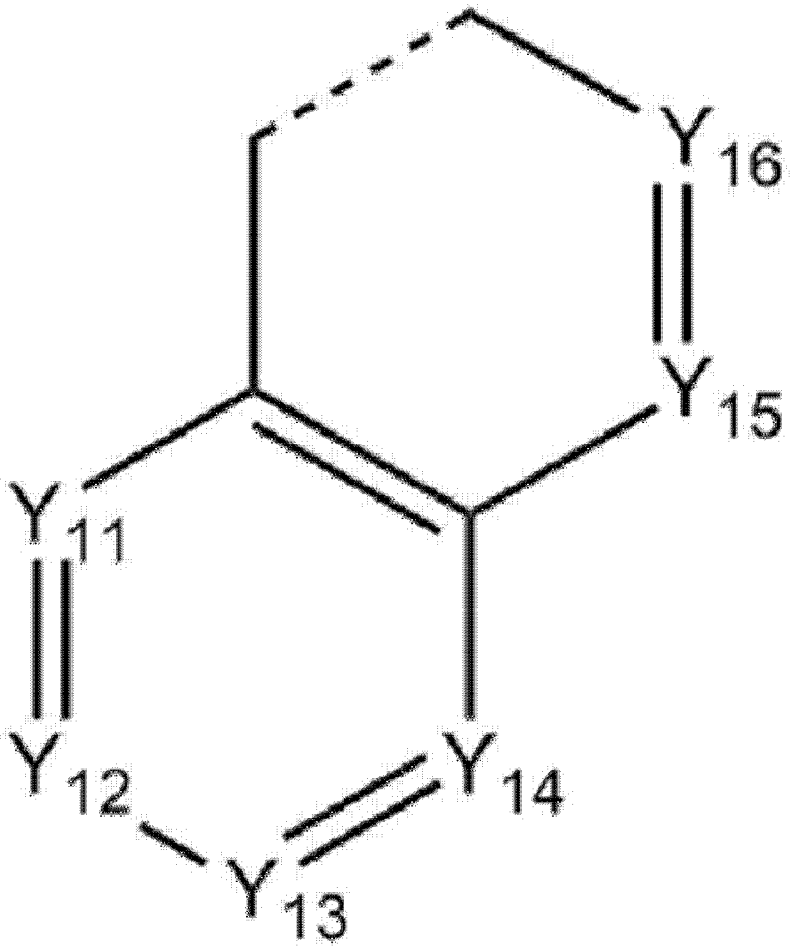
[115] [화학식 3]

[116]



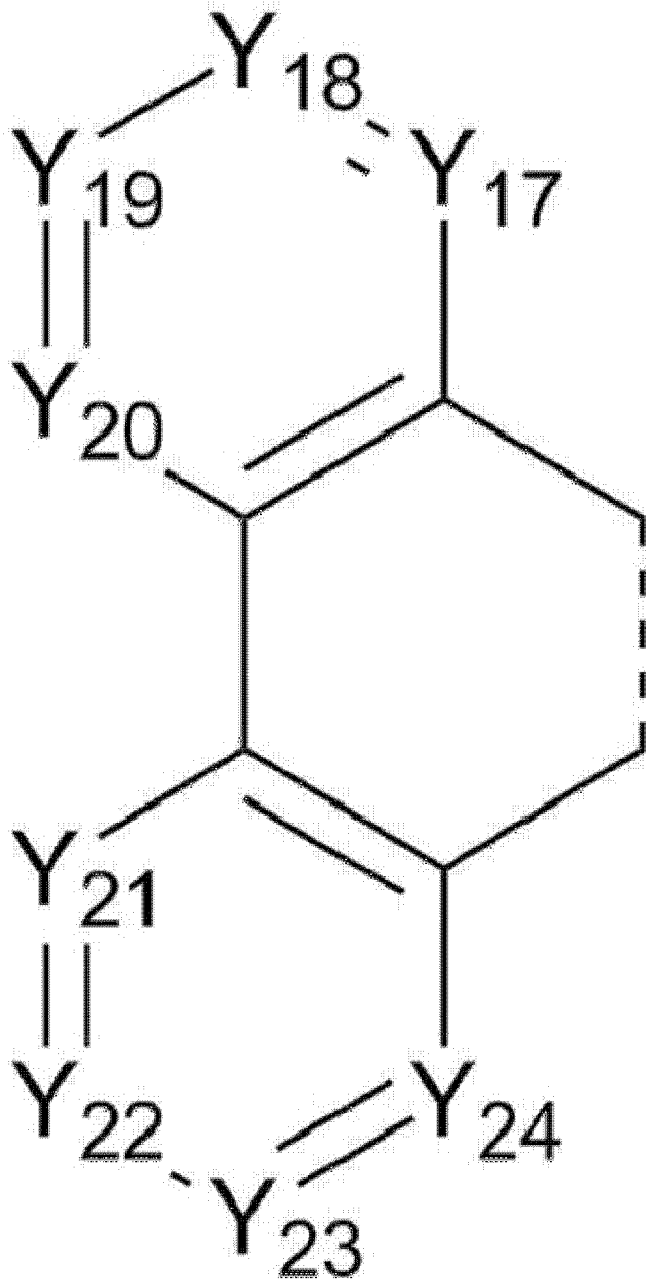
[117] [화학식 4]

[118]



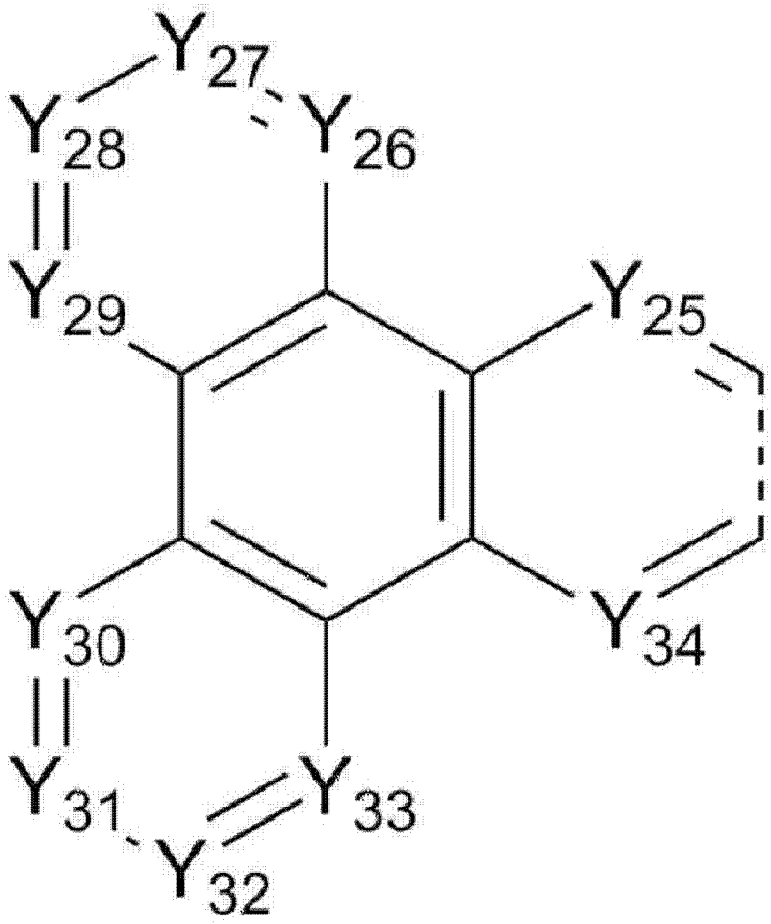
[119] [화학식 5]

[120]



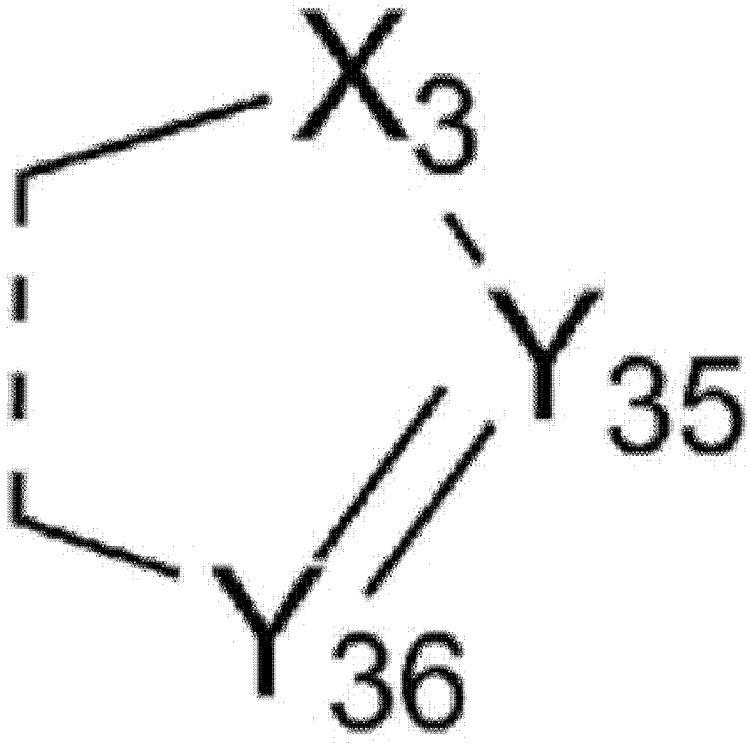
[121] [화학식 6]

[122]



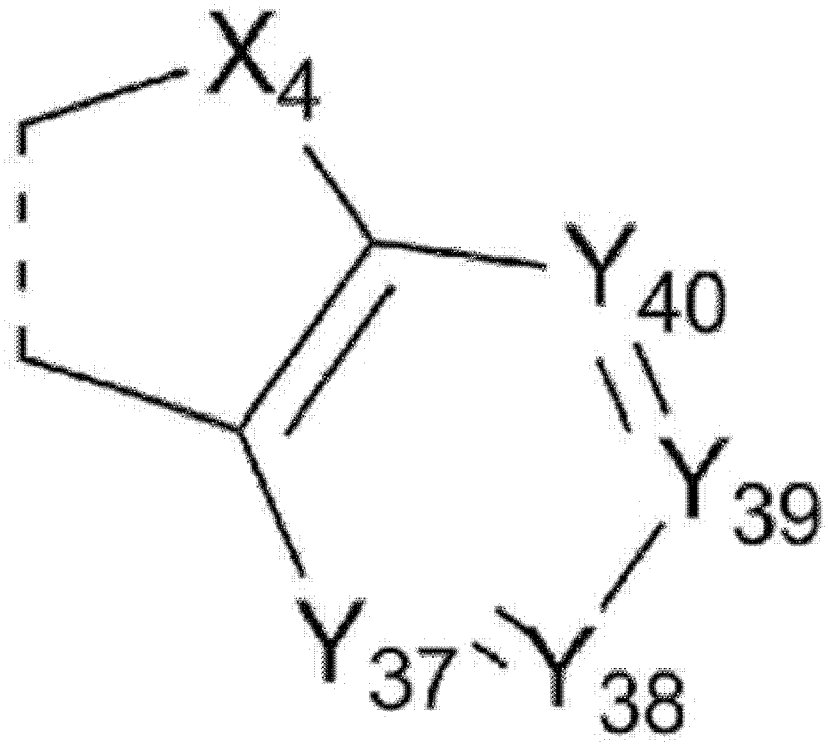
[123] [화학식 7]

[124]



[125] [화학식 8]

[126]



[127] 상기 화학식 2 내지 화학식 9에서,

[128] 점선은 축합이 이루어지는 부분이며;

[129] m은 1 또는 2의 정수이며;

[130] X_3 내지 X_4 및 X_7 내지 X_{10}은 각각 독립적으로 O, S, Se, P, $N(Ar_1)$, $C(Ar_2)(Ar_3)$ 및 $Si(Ar_4)(Ar_5)$으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 X_3 내지 X_4과 X_9 내지 X_{10}이 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[131] L_1은 단일결합, C_6~C_{18}의 아릴렌기 또는 핵원자수 5 내지 18개의 헤테로아릴렌기이고, 바람직하게는 페닐렌기, 비페닐렌기, 카바졸릴기 또는 트리아지닐기일 수 있고, 상기 L_1이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[132] Y_1 내지 Y_{40}은 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_7)$이고, 상기 Y_1 내지 Y_{40}이 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[133] R_7은 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접한 각각의 R_7가 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R_7이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나

상이하며;

[134] 상기 화학식 2 내지 화학식 8로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하지 않는 R_8 내지 R_{19}은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며;

[135] Ar_1 내지 Ar_5는 각각 독립적으로 C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 상기 Ar_1 내지 Ar_5가 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[136] 상기 R_7 내지 R_{19} 및 Ar_1 내지 Ar_5의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

발명의 실시를 위한 형태

[137] 이하, 본 발명을 상세히 설명한다.

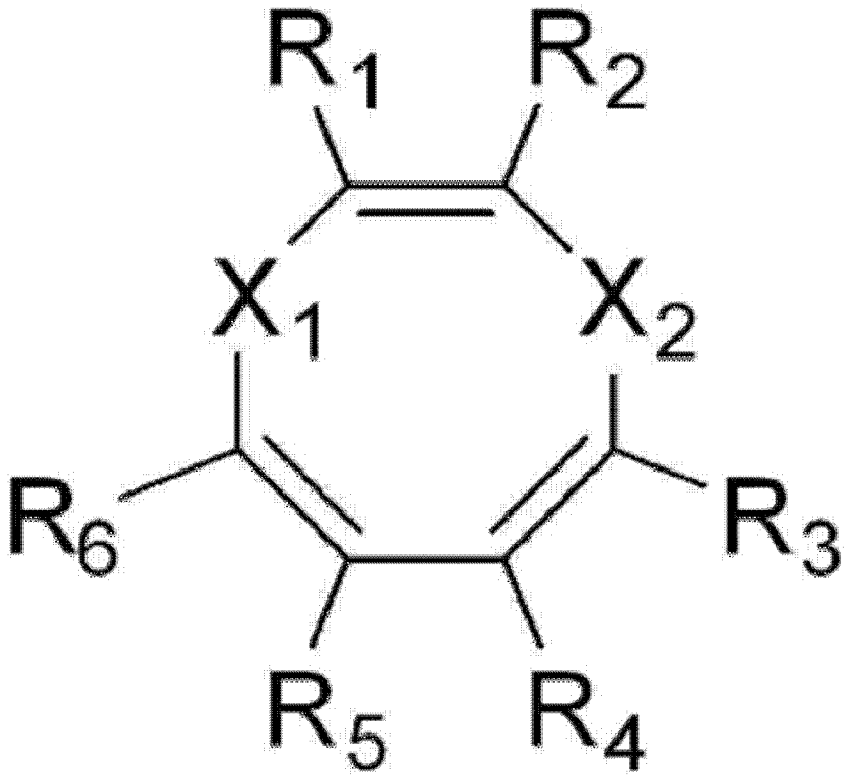
[138] 1. 신규 유기 화합물

[139] 본 발명에 따른 신규 유기 화합물은 디아조신(diazocine), 디싸이오신(dithiocine), 디옥소신(dioxocine), 또는 옥타트리엔(octatriene)에 벤젠(benezene), 나프탈렌(naphthalene), 페난스렌(phenanthrene), 트리페닐렌(triphenylen), 인덴 모이어티(indene moiety), 또는 인돌 모이어티(indole moiety)가 축합되어 기본 골격을 이루며, 구체적으로는 하기 화학식 1 또는 화학식 9로 표시되는 것을 특징으로 한다.

[140] 본 발명의 일 구현 예에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다:

[141] [화학식 1]

[142]

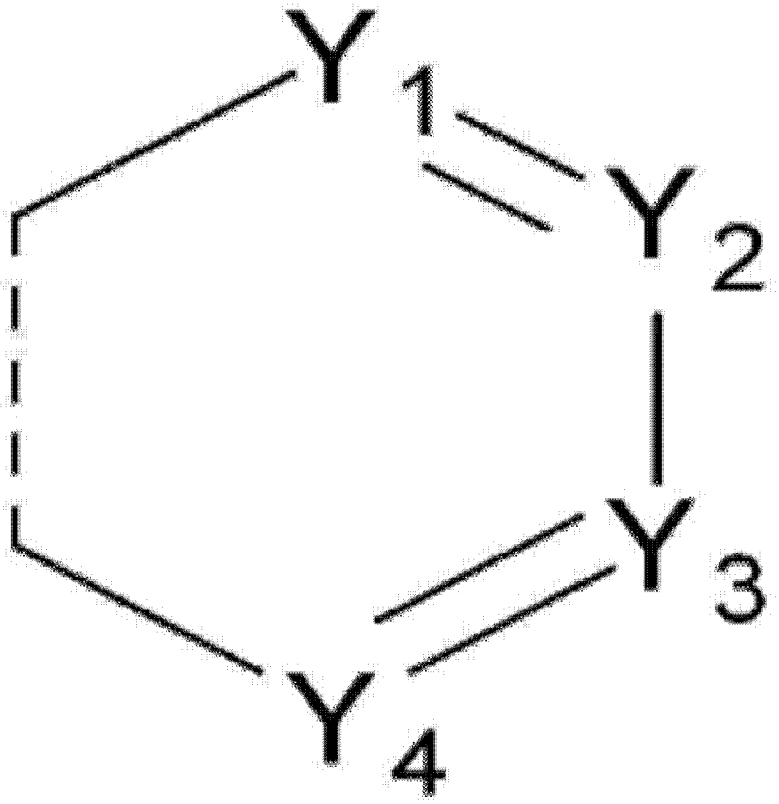


[143] 상기 화학식 1에서,

[144] R_1과 R_2, R_3과 R_4 및 R_5과 R_6 중 적어도 하나는 하기 화학식 2 내지 화학식 8 중 어느 하나로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하되, 상기 R_1과 R_2, R_3과 R_4 및 R_5과 R_6 중 2개 이상이 축합 고리를 형성하는 경우 이들은 각각 독립적으로 하기 화학식 2 내지 화학식 8 중 어느 하나로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성할 수 있고;

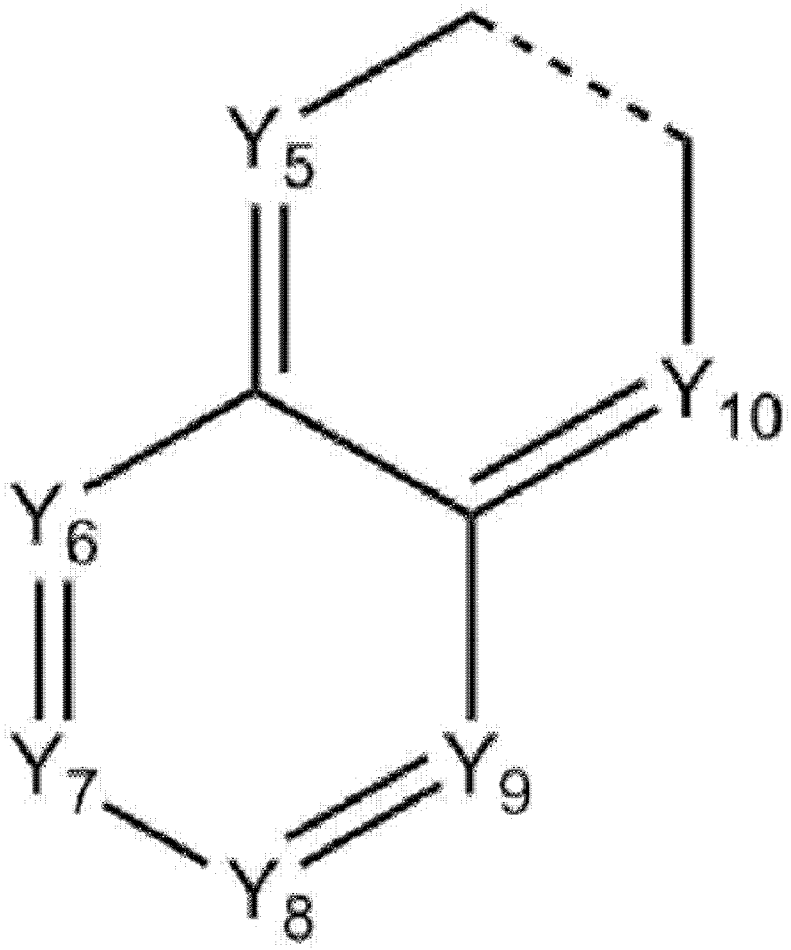
[145] [화학식 2]

[146]



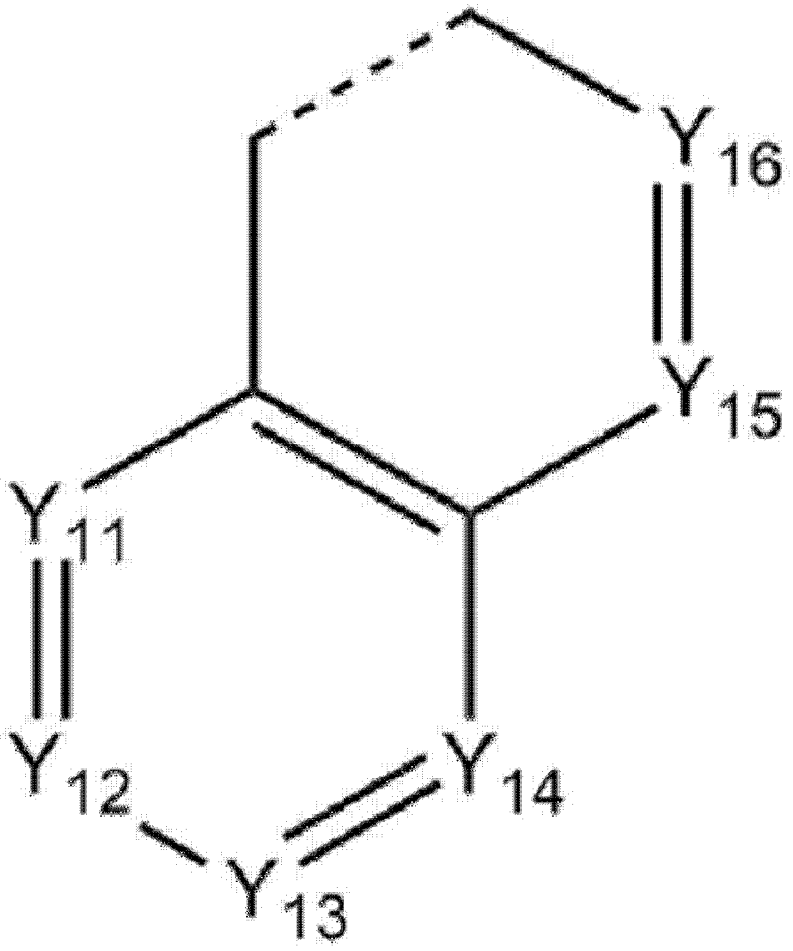
[147] [화학식 3]

[148]



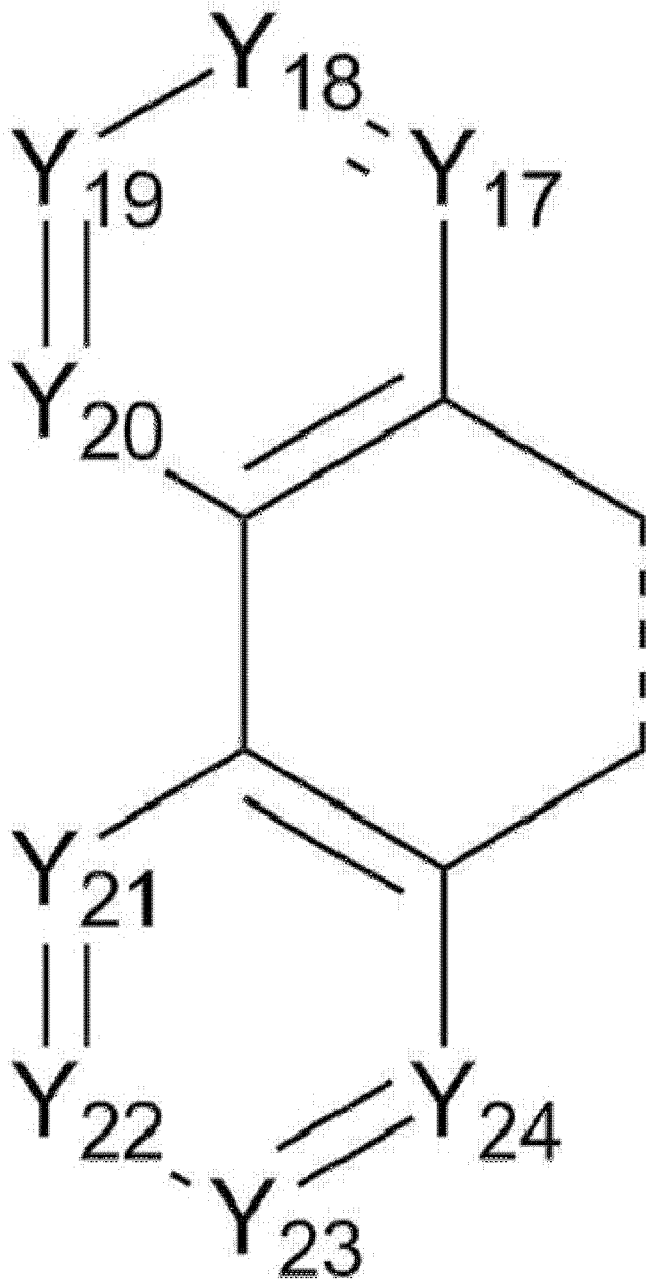
[149] [화학식 4]

[150]



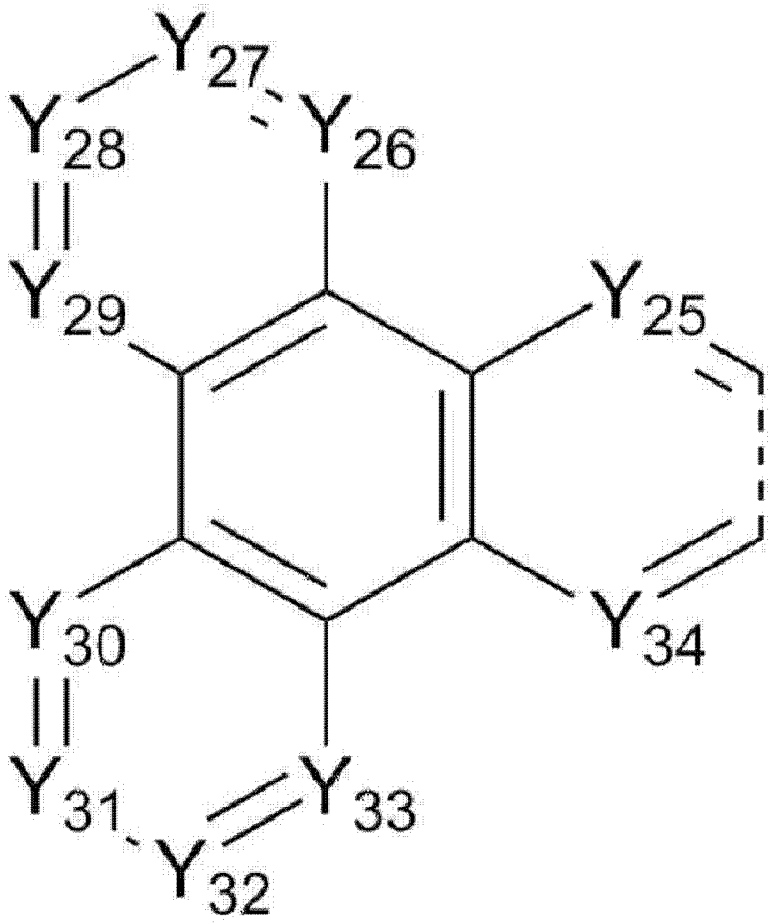
[151] [화학식 5]

[152]



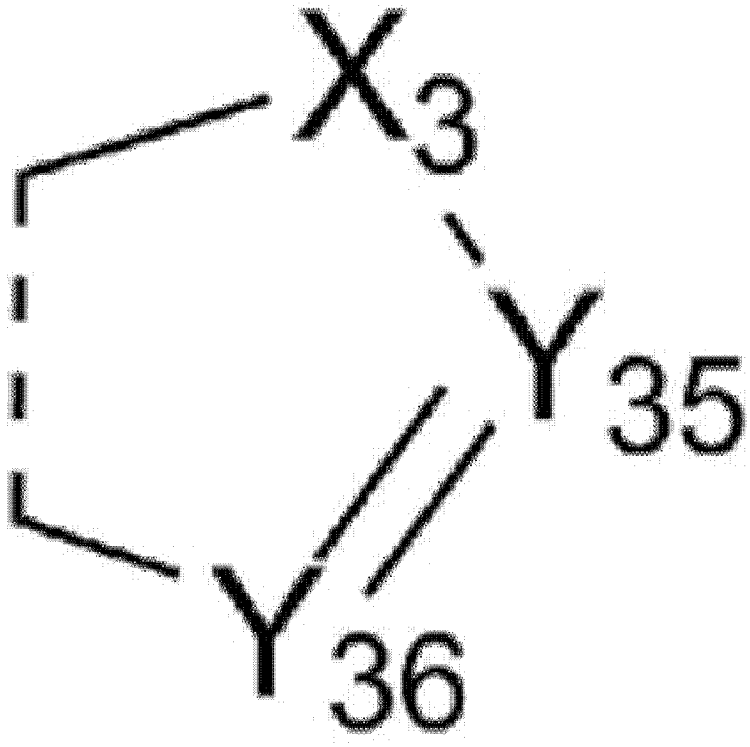
[153] [화학식 6]

[154]



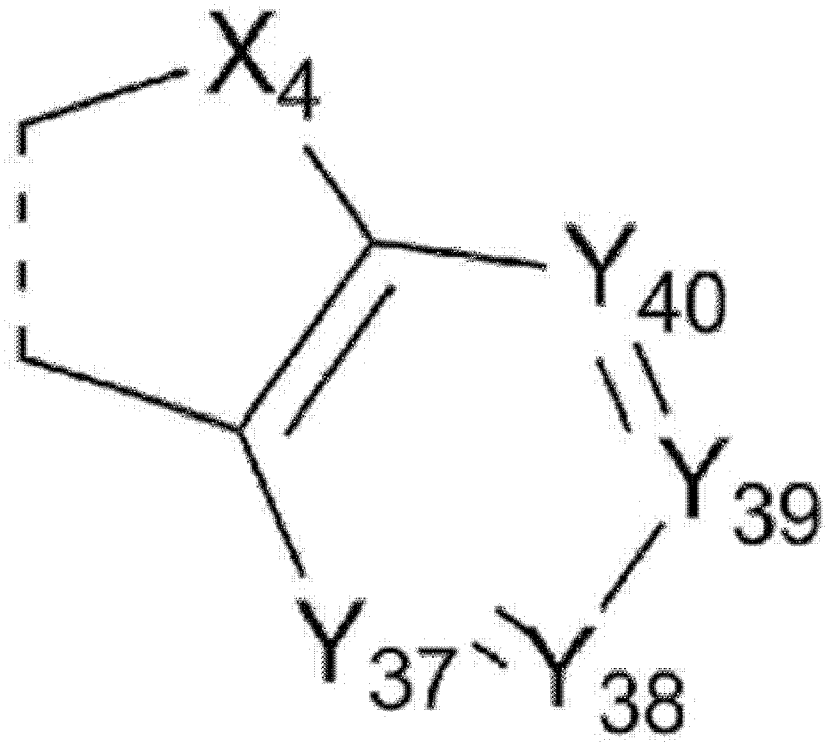
[155] [화학식 7]

[156]



[157] [화학식 8]

[158]



[159] 상기 화학식 1 내지 화학식 8에서,

[160] 점선은 축합이 이루어지는 부분이며;

[161] X_1 내지 X_4는 각각 독립적으로 O, S, Se, P, $N(Ar_1)$, $C(Ar_2)(Ar_3)$ 및 $Si(Ar_4)(Ar_5)$으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 X_3 내지 X_4가 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[162] Y_1 내지 Y_{40}은 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_7)$이고, 상기 Y_1 내지 Y_{40}이 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[163] 상기 화학식 2 내지 화학식 8로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하지 않는 R_1 내지 R_6은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며;

[164] R_7은 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의

아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접한 각각의 R_7가 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R_7이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[165] Ar_1 내지 Ar_5는 각각 독립적으로 C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 상기 Ar_1 내지 Ar_5가 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[166] 상기 R_1 내지 R_7 및 Ar_1 내지 Ar_5의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[167] 본 발명에서 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 종래 유기 전계 발광(electroluminescent, EL) 소자(유기 EL 소자)용 재료[예: 4,4-디카바졸릴비페닐(이하, 'CBP'라 함)]보다 높은 분자량을 갖기 때문에, 유리전이온도가 높아 열적 안정성이 우수할 뿐만 아니라, 캐리어 수송능, 발광능 등이 우수하다. 따라서, 유기 전계 발광 소자에 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 경우, 소자의 구동 전압, 효율 및 수명 등의 특성을 보다 향상시킬 수 있다.

[168] 일반적으로 유기 전계 발광 소자의 인광 발광층에서 호스트 물질은 이의 삼중항 에너지 갭이 도펀트의 삼중항 에너지 갭보다 높아야 한다. 즉, 호스트의 가장 낮은 여기 상태가 도펀트의 가장 낮은 방출 상태보다 에너지가 더 높은 경우, 인광 발광 효율이 보다 향상될 수 있다. 본 발명에서 상기 화학식 1의 화합물은 삼중항 에너지가 높고, 넓은 일중항 에너지 준위와 높은 삼중항 에너지 준위를 갖는 인돌 유도체가 축합되어 있는 기본 골격에 특정의 치환기가 도입됨으로써, 에너지 준위가 도펀트보다 높게 조절될 수 있어 호스트 물질로 사용될 수 있다.

[169] 또한, 본 발명의 화합물은 전술한 바와 같이 높은 삼중항 에너지를 갖기 때문에,

발광층에서 생성된 엑시톤이 발광층에 인접하는 전자 수송층 또는 정공 수송층으로 확산되는 것을 방지할 수 있다. 따라서, 상기 화학식 1의 화합물을 이용하여 정공 수송층과 발광층 사이에 유기물층(이하, '발광 보조층'이라 함)을 형성할 경우, 상기 화합물에 의해서 엑시톤의 확산이 방지되기 때문에, 상기 제1 엑시톤 확산 방지층을 포함하지 않은 종래의 유기 전계 발광 소자와 달리, 실질적으로 발광층 내에서 발광에 기여하는 엑시톤의 수가 증가되어 소자의 발광 효율이 개선될 수 있다. 또한, 상기 화학식 1의 화합물을 이용하여 발광층과 전자 수송층 사이에 유기물층(이하, '수명 개선층'이라 함)을 형성할 경우에도, 상기 화학식 1의 화합물에 의해 엑시톤의 확산이 방지됨으로써, 유기 전계 발광 소자의 내구성 및 안정성이 향상될 수 있고, 이로 인해 소자의 반감 수명이 효율적으로 증가될 수 있다. 이와 같이, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 호스트 이외, 발광 보조층 재료 또는 수명 개선층 재료로 사용될 수 있다.

[170] 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 기본 골격에 도입되는 치환기의 종류에 따라 HOMO 및 LUMO 에너지 레벨을 조절할 수 있어, 넓은 밴드갭을 가질 수 있고, 높은 캐리어 수송성을 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 화합물은 상기 기본 골격에 질소-함유 헤테로환(예컨대, 피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기 등)과 같이 전자 흡수성이 큰 전자 끌개기(EWG)가 결합될 경우, 분자 전체가 바이폴라(bipolar) 특성을 갖기 때문에, 정공과 전자의 결합력을 높일 수 있다. 이와 같이, 상기 기본 골격에 EWG가 도입된 상기 화학식 1의 화합물은 우수한 캐리어 수송성 및 발광 특성이 우수하기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 발광층 재료 이외, 전자주입/수송층 재료, 또는 수명 개선층 재료로도 사용될 수 있다. 한편, 상기 화학식 1의 화합물이 상기한 기본 골격에 아릴아민기, 카바졸기, 터페닐기, 트리페닐렌기 등과 같이 전자 공여성이 큰 전자 주게기(EDG)가 결합될 경우, 정공의 주입 및 수송이 원활하게 이루어지기 때문에, 발광층 재료 이외, 정공주입/수송층 또는 발광 보조층 재료로도 유용하게 사용될 수 있다.

[171] 이와 같이, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 전계 발광 소자의 발광 특성을 향상시킴과 동시에, 정공 주입/수송 능력, 전자 주입/수송 능력, 발광 효율, 구동 전압, 수명 특성 등을 향상시킬 수 있다. 따라서, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물은 유기 전계 발광 소자의 유기물층 재료, 바람직하게는 발광층 재료(청색, 녹색 및/또는 적색의 인광 호스트 재료), 전자 수송/주입층 재료, 정공 수송/주입층 재료, 발광 보조층 재료 및 수명 개선층 재료, 더 바람직하게는 발광층 재료, 전자 주입층 재료, 발광 보조층 재료 및 수명 개선층 재료로 사용될 수 있다.

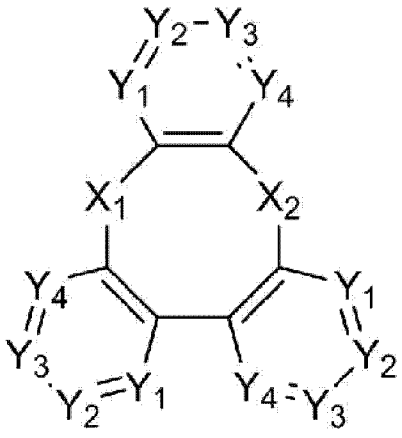
[172] 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 기본 골격에 다양한 치환기, 특히 아릴기 및/또는 헤테로아릴기가 도입되어 화합물의 분자량이 유의적으로 증대됨으로써, 유리 전이온도가 향상될 수 있고, 이로 인해 종래의 발광 재료(예를 들어, CBP)보다 높은 열적 안정성을 가질 수 있다. 또한, 상기 화학식

1로 표시되는 화합물은 유기물층의 결정화 억제에도 효과가 있다. 따라서, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 성능 및 수명 특성이 크게 향상될 수 있고, 이러한 유기 전계 발광 소자가 적용된 풀 칼라 유기 발광 패널도 성능이 극대화될 수 있다.

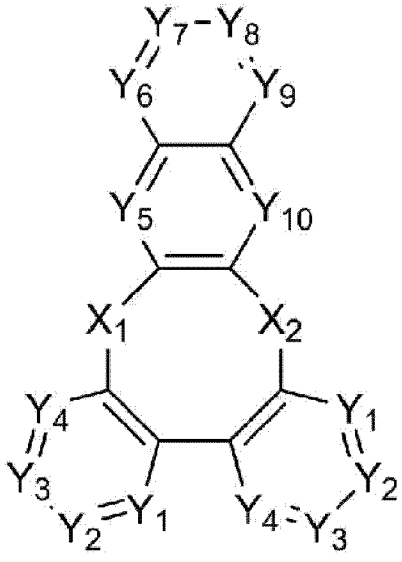
[173] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서 상기 R_1과 R_2, R_3과 R_4 및 R_5과 R_6 중 2개는 상기 화학식 2로 표시되는 고리와 축합되어 축합고리를 형성하고, 나머지 하나는 상기 화학식 3으로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성할 수 있다.

[174] 또한, 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 구체적으로 하기 화학식 N-1 내지 화학식 N-31 중 어느 하나로 표시되는 화합물일 수 있으며, 보다 바람직하게는 하기 화학식 N-1로 표시되는 화합물일 수 있다:

[175]

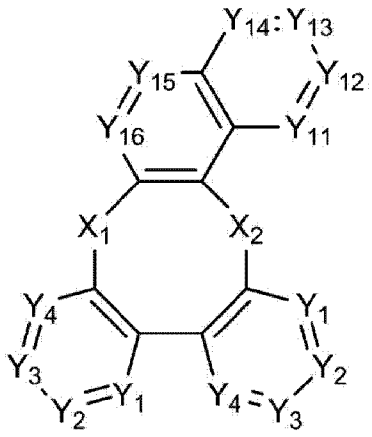


N-1

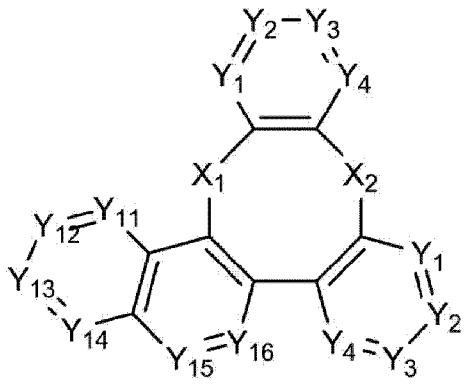


N-2

[176]

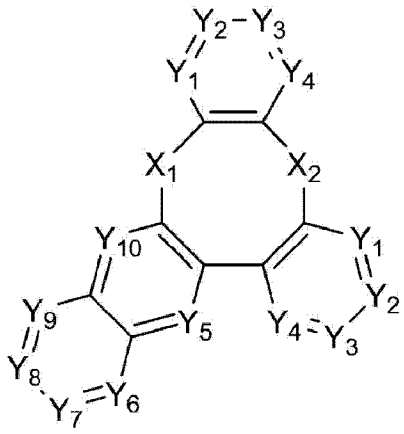


N-3

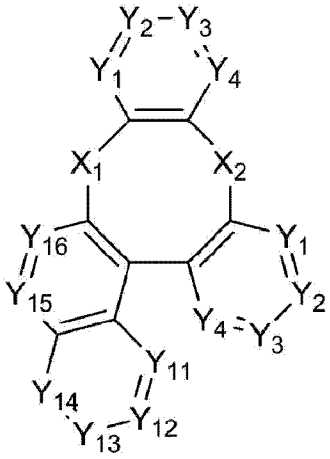


N-4

[177]

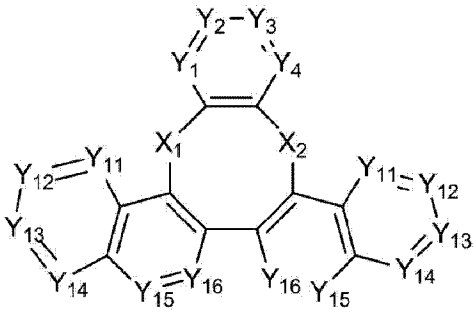


N-5

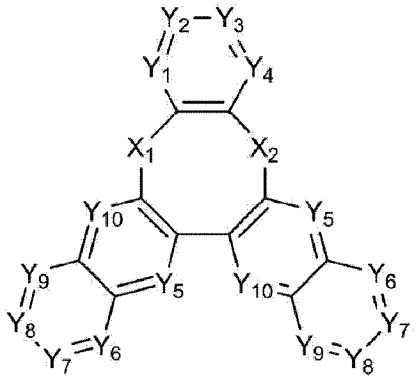


N-6

[178]

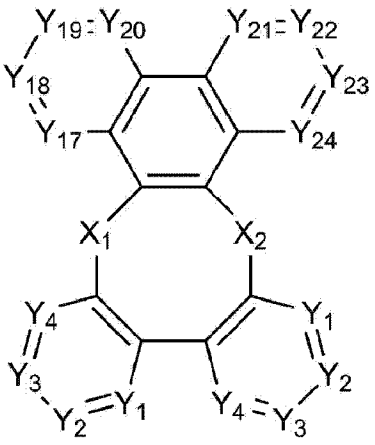


N-7

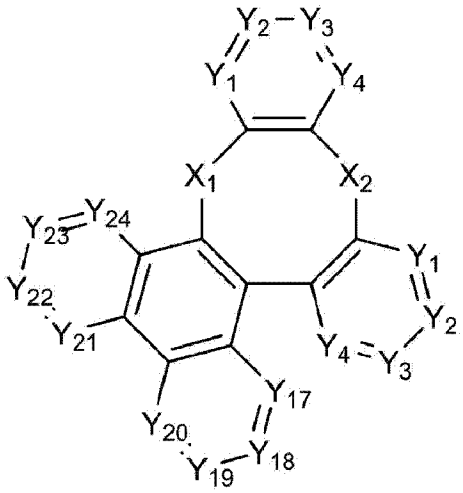


N-8

[179]

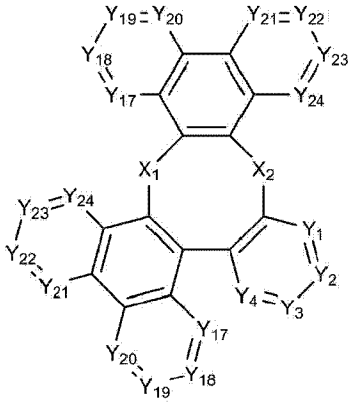


N-9

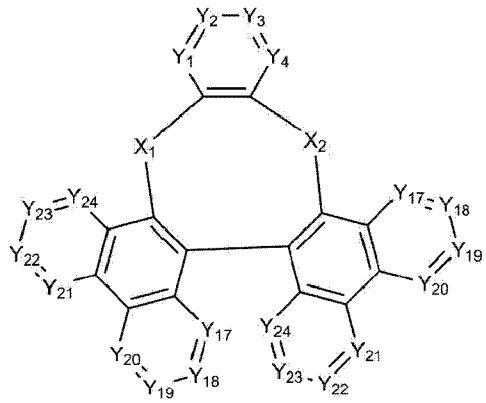


N-10

[180]

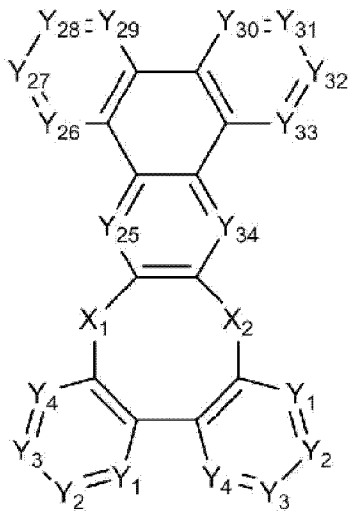


N-11

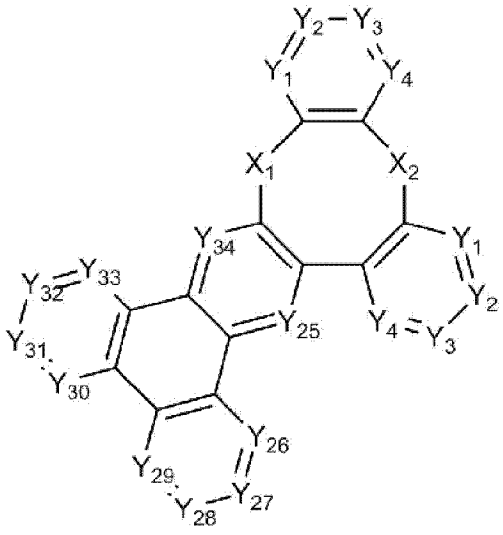


N-12

[181]

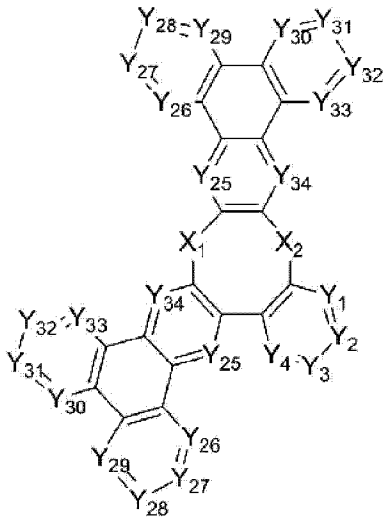


N-13

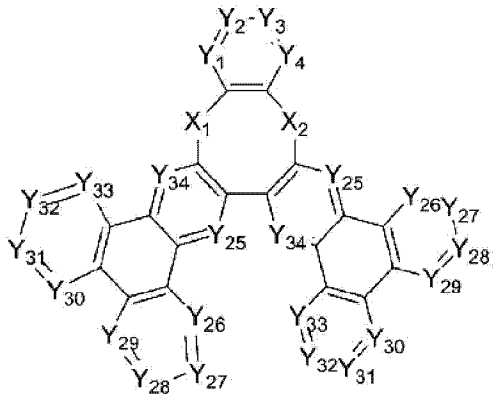


N-14

[182]

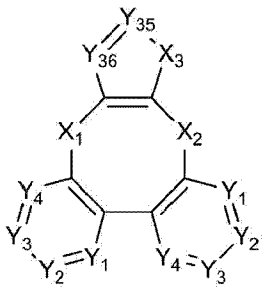


N-15

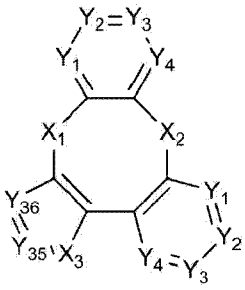


N-16

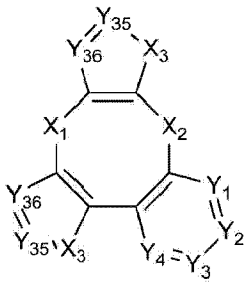
[183]



N-17

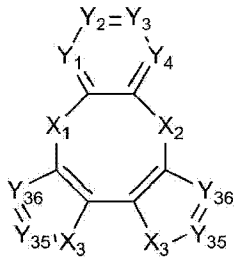


N-18

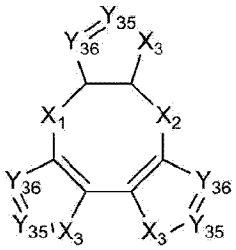


N-19

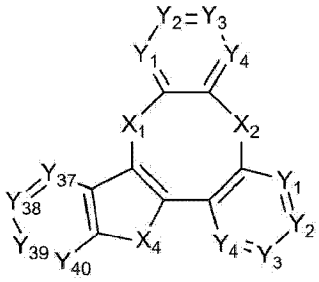
[184]



N-20

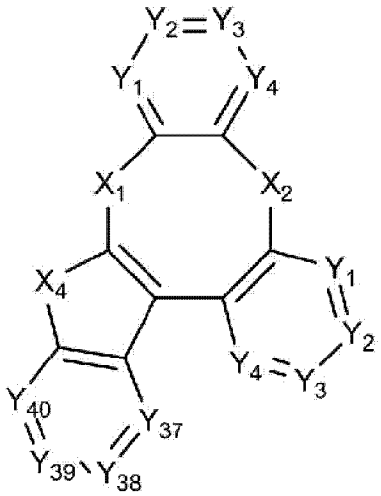


N-21

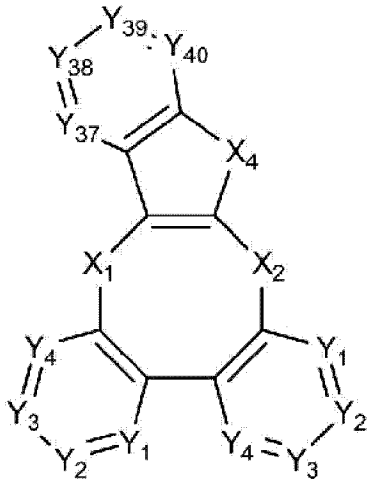


N-22

[185]

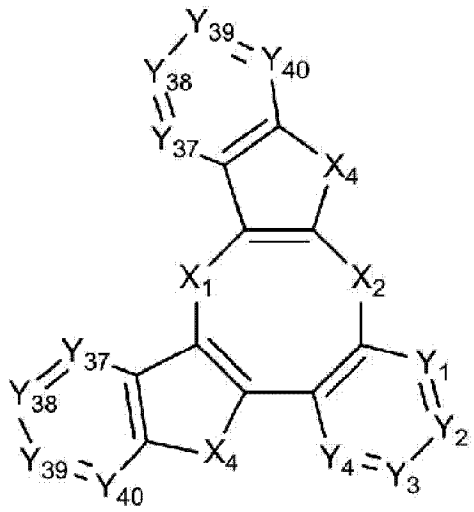


N-23

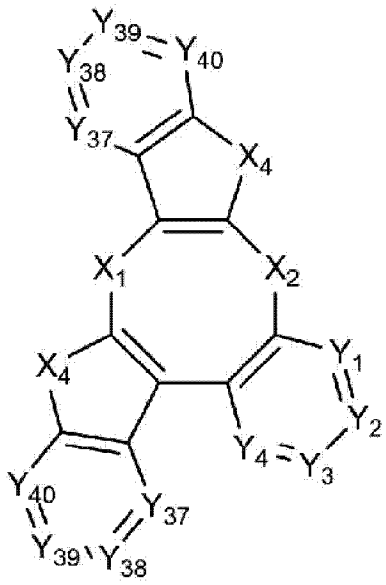


N-24

[186]

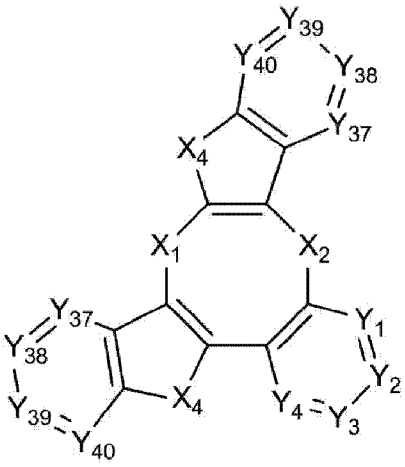


N-25

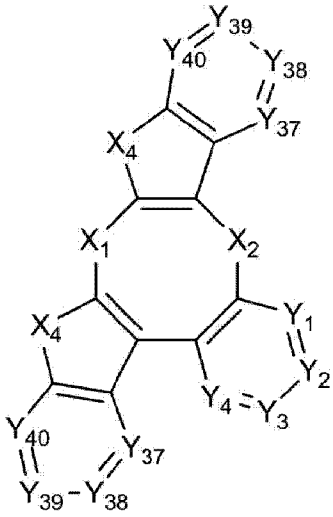


N-26

[187]

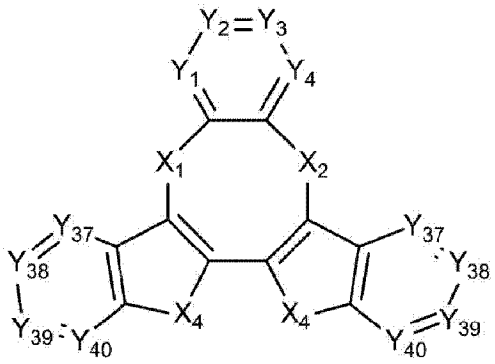


N-27

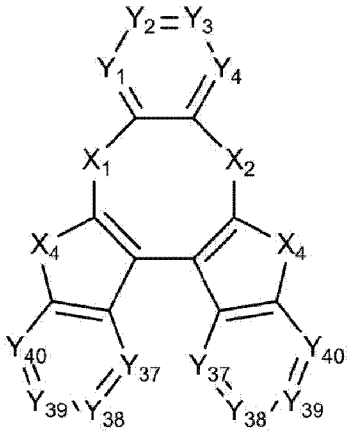


N-28

[188]

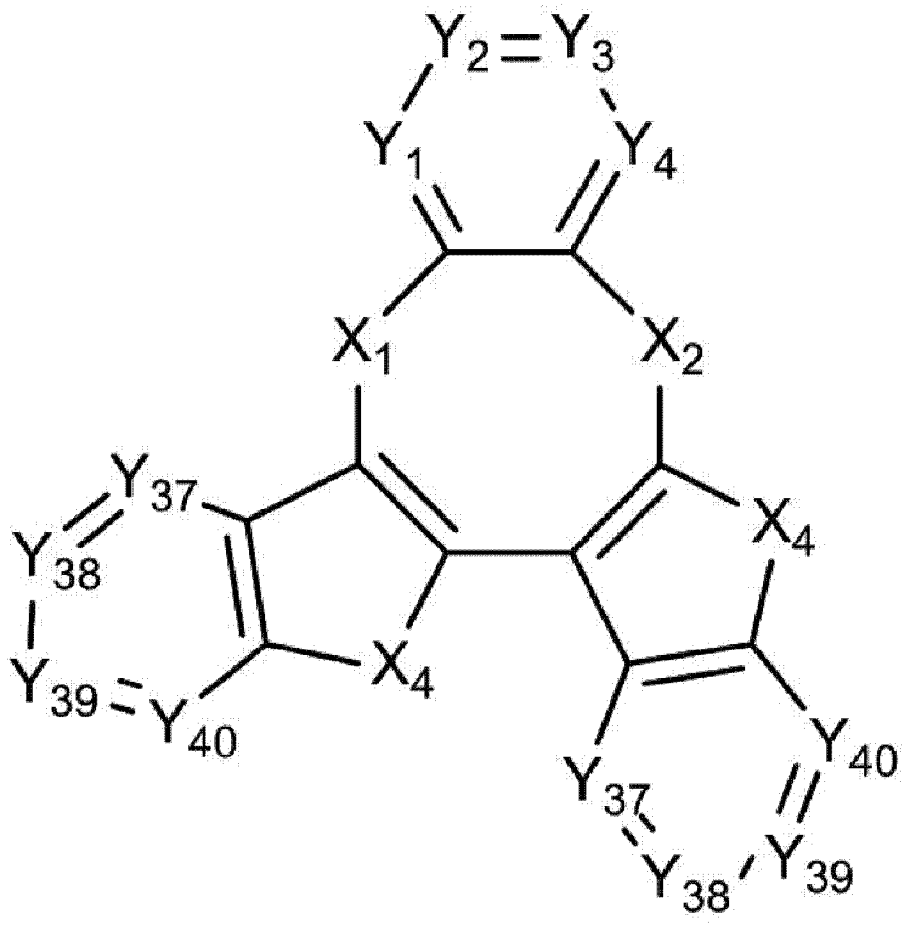


N-29



N-30

[189]



N-31

[190] 상기 화학식 N-1 내지 화학식 N-31에 있어서,

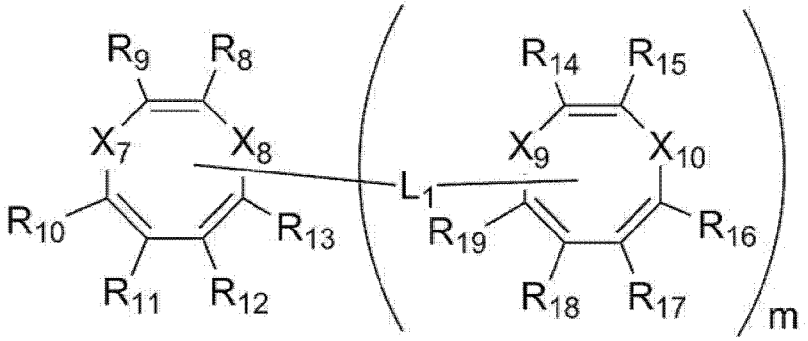
[191] X_1 내지 X_4 및 Y_1 내지 Y_{40}은 상기 화학식 1 내지 화학식 8에서 정의된 바와 같다.

[192]

[193] 본 발명의 다른 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 2 이상을 링커로 연결시킴으로써 열적 안정성, 캐리어 수송능, 발광능 등을 더욱 향상시킬 수 있고, 이를 유기 전계 발광 소자에 사용하는 경우, 소자의 구동 전압, 효율 및 수명 등의 특성을 더욱 향상시킬 수 있다. 구체적으로는 하기 화학식 9로 표시되는 화합물을 제공한다:

[194] [화학식 9]

[195]

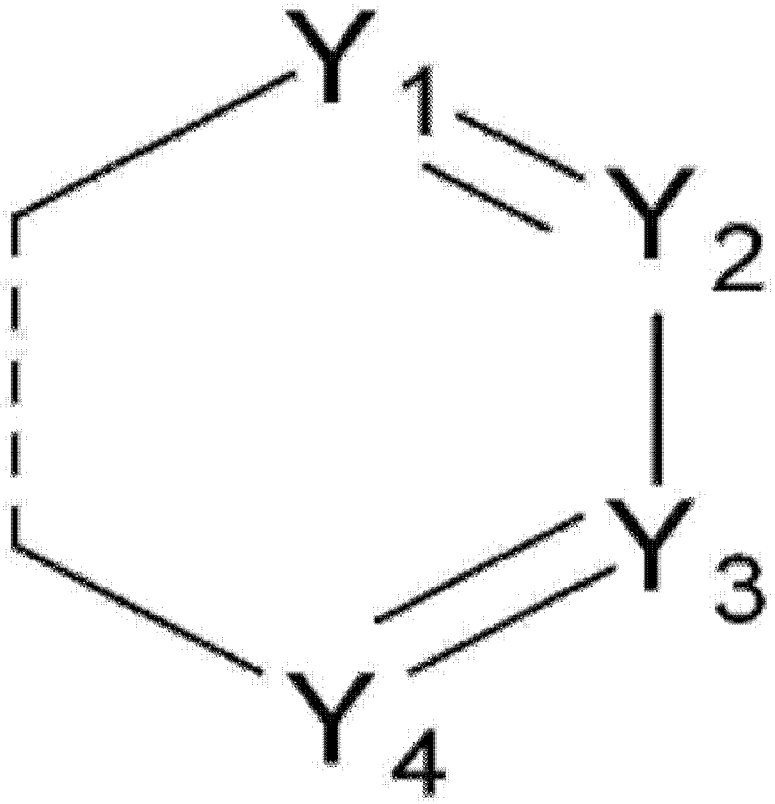


[196] 상기 화학식 9에서,

[197] R_8과 R_9, R_{10}과 R_{11}, R_{12}와 R_{13}, R_{14}와 R_{15}, R_{16}과 R_{17} 및 R_{18}과 R_{19} 중 적어도 하나, 바람직하게는 R_8과 R_9, R_{10}과 R_{11} 및 R_{12}와 R_{13} 중 적어도 하나와 R_{14}와 R_{15}, R_{16}과 R_{17} 및 R_{18}과 R_{19}중 적어도 하나는 하기 화학식 2 내지 화학식 8 중 어느 하나로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하되, 상기 R_8과 R_9, R_{10}과 R_{11}, R_{12}와 R_{13}, R_{14}와 R_{15}, R_{16}과 R_{17} 및 R_{18}과 R_{19}중 2개 이상이 축합 고리를 형성하는 경우 이들은 각각 독립적으로 화학식 2 내지 화학식 8 중 어느 하나로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R_{14} 내지 R_{19}가 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

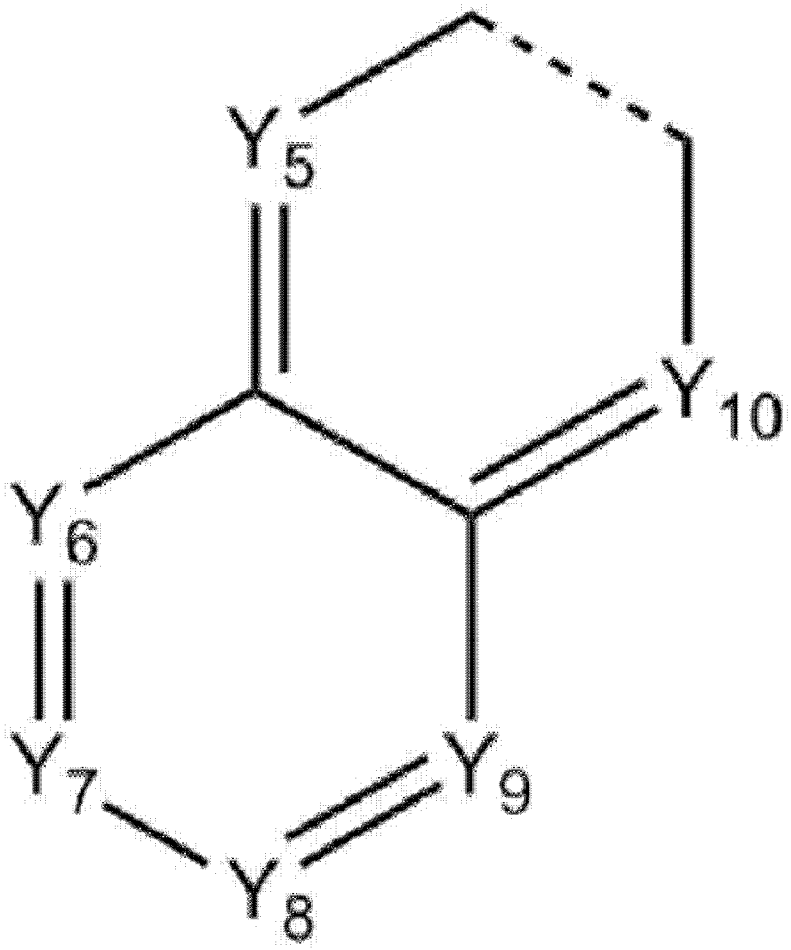
[198] [화학식 2]

[199]



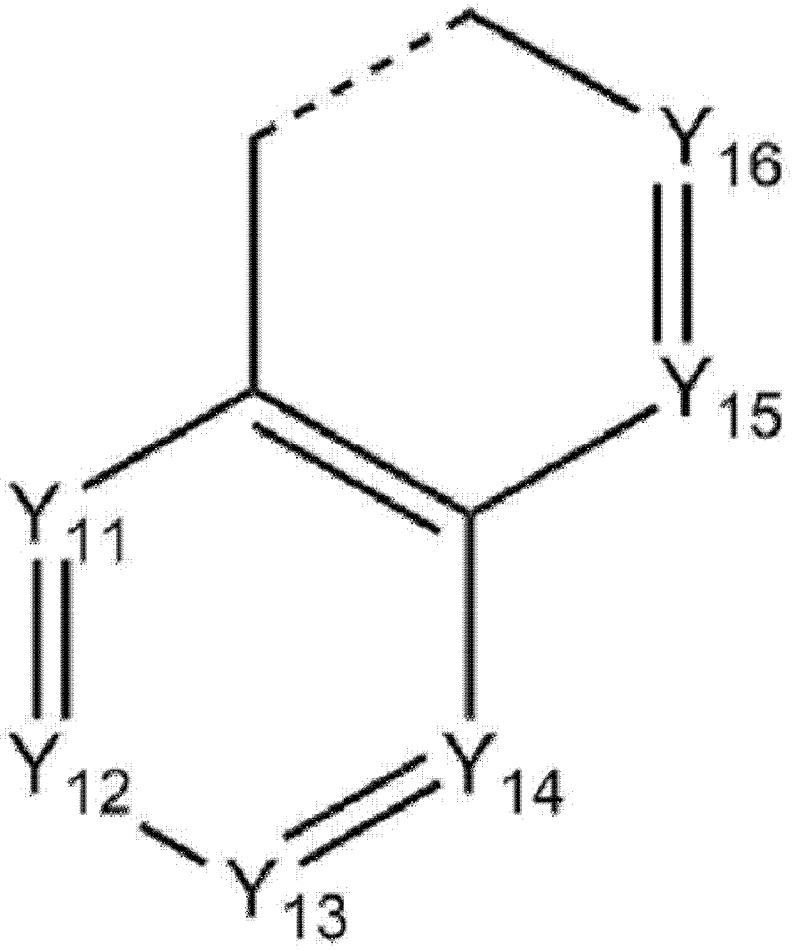
[200] [화학식 3]

[201]



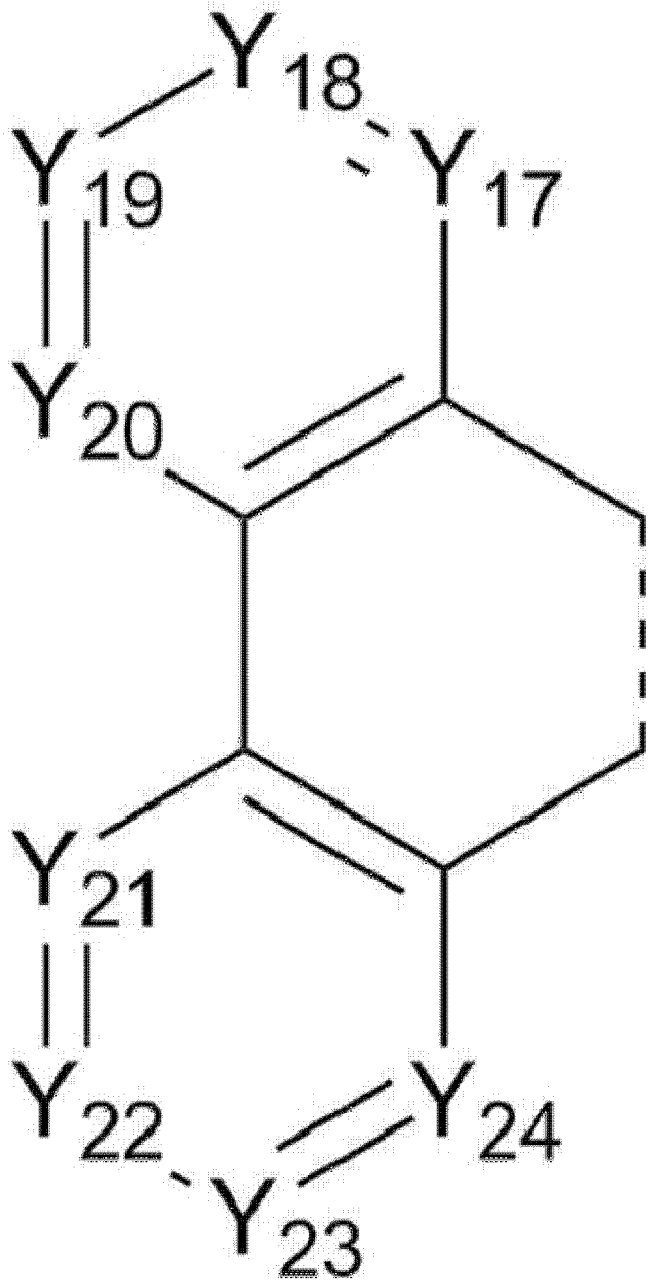
[202] [화학식 4]

[203]



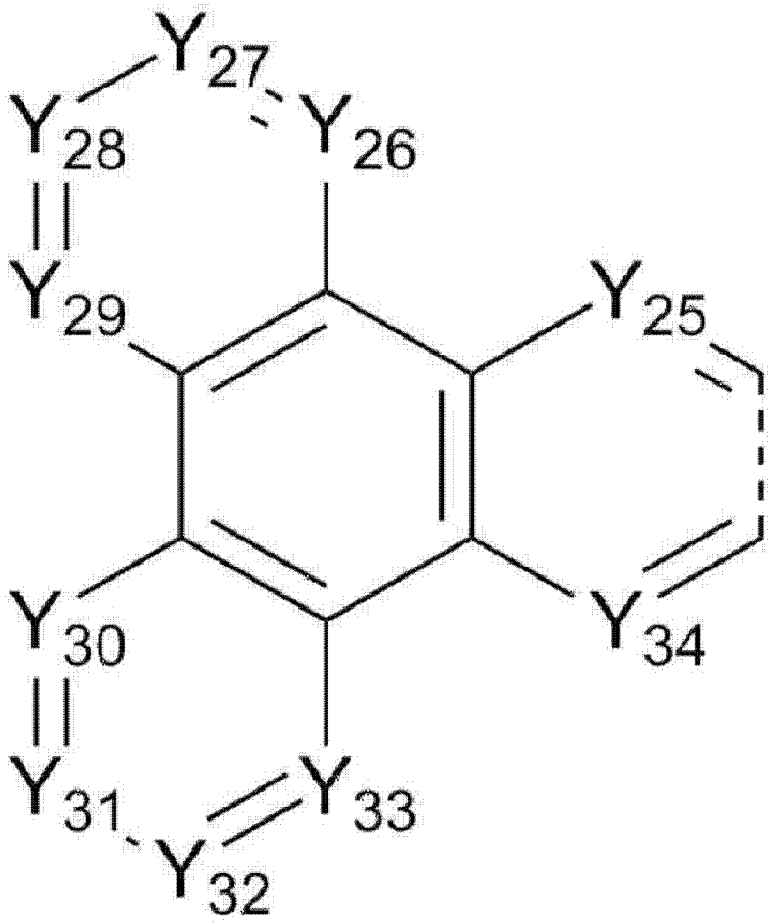
[204] [화학식 5]

[205]



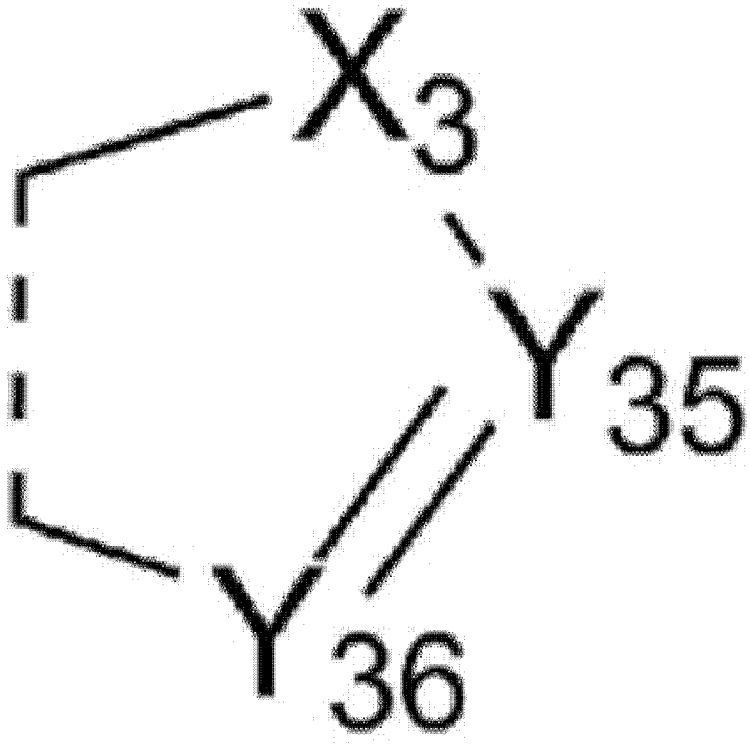
[206] [화학식 6]

[207]



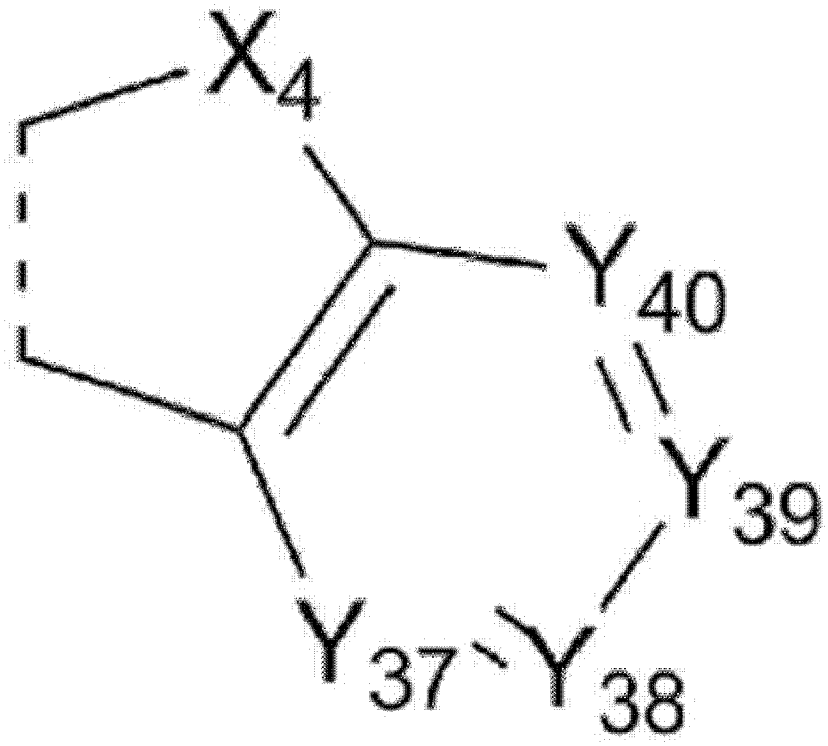
[208] [화학식 7]

[209]



[210] [화학식 8]

[211]



[212] 상기 화학식 2 내지 화학식 9에서,

[213] 점선은 축합이 이루어지는 부분이며;

[214] m은 1 또는 2의 정수이며;

[215] X_3 내지 X_4 및 X_7 내지 X_{10}은 각각 독립적으로 O, S, Se, P, $N(Ar_1)$, $C(Ar_2)(Ar_3)$ 및 $Si(Ar_4)(Ar_5)$으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 X_3 내지 X_4 및 X_9 내지 X_{10}이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[216] L_1은 단일결합, C_6~C_{18}의 아릴렌기 또는 핵원자수 5 내지 18개의 헤테로아릴렌기이고, 바람직하게는 페닐렌기, 비페닐렌기, 카바졸릴기 또는 트리아지닐기일 수 있고, 상기 L_1이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[217] Y_1 내지 Y_{40}은 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_7)$이고, 상기 Y_1 내지 Y_{40} 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[218] R_7은 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접한 각각의 R_7가 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R_7이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나

상이하며;

[219] 상기 화학식 2 내지 화학식 8로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하지 않는 R_8 내지 R_{19}는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며;

[220] Ar_1 내지 Ar_5는 각각 독립적으로 C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 상기 Ar_1 내지 Ar_5가 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[221] 상기 R_7 내지 R_{19} 및 Ar_1 내지 Ar_5의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[222] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1 또는 화학식 9로 표시되는 화합물에서 상기 R_7은 C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기 및 C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기로 이루어진 군에서 선택되고,

[223] 상기 R_7의 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴실릴기, 아릴포스파닐기 및 모노 또는 디아릴포스피닐기는 각각 독립적으로, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의

아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

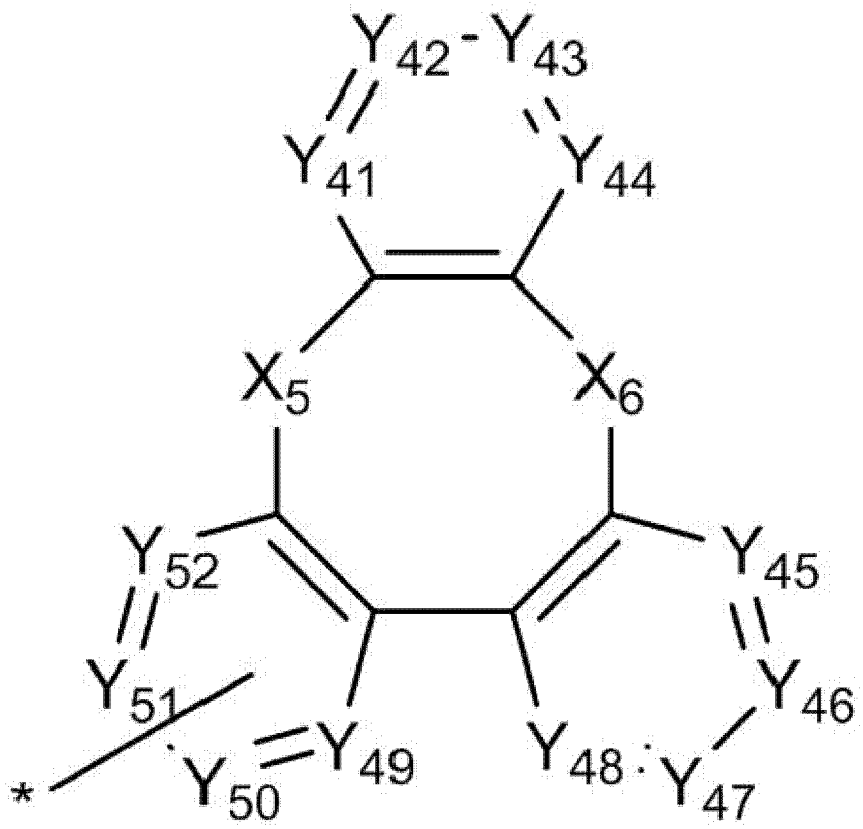
[224] 보다 바람직하게는, 상기 화학식 1 또는 화학식 9로 표시되는 화합물에서 R_7은 페닐기, 비페닐기, 트리페닐기, 나프탈렌, 트리페닐렌, 페난스렌, 카바졸, 디벤조[b,d]퓨란, 디벤조[b,d]티오펜, 플루오렌, 스피로비[플루오렌], 피리딘, 피리미딘, 트리아진, 디페닐포스피닐기, 트리페닐실릴기 및 퀴나졸린으로 이루어진 군으로부터 선택되고,

[225] 상기 R_7의 페닐기, 비페닐기, 트리페닐기, 나프탈렌, 트리페닐렌, 페난스렌, 카바졸, 디벤조[b,d]퓨란, 디벤조[b,d]티오펜, 플루오렌, 스피로비[플루오렌], 피리딘, 피리미딘, 트리아진, 디페닐포스피닐기, 트리페닐실릴기 및 퀴나졸린은 각각 독립적으로, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[226] 또한, 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1 또는 화학식 9로 표시되는 화합물에서 상기 R_7은 하기 화학식 10 또는 하기 화학식 11로 표시되는 치환기일 수 있다:

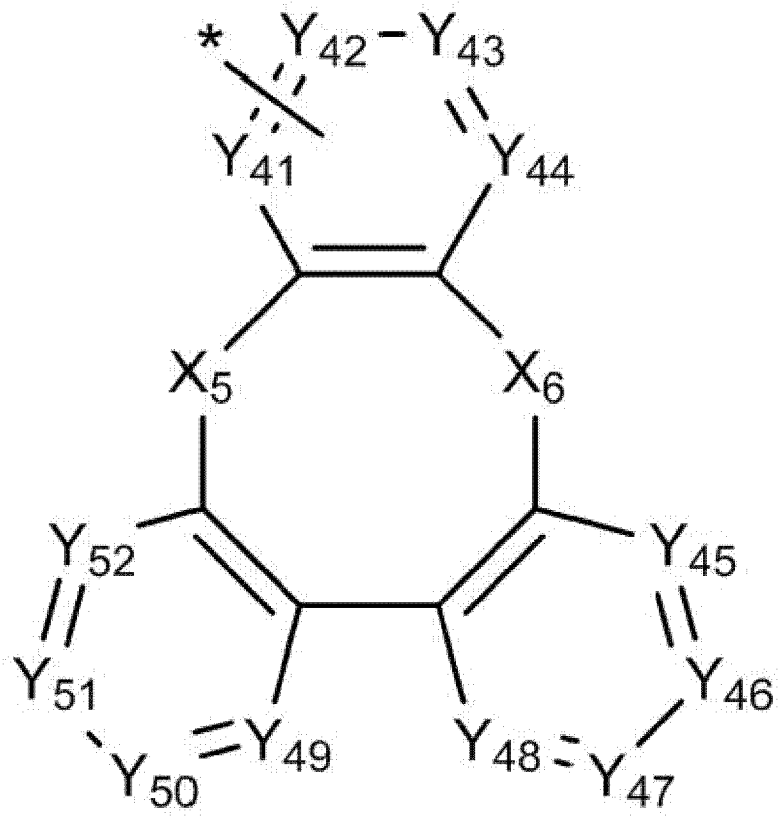
[227] [화학식 10]

[228]



[229] [화학식 11]

[230]



[231] 상기 화학식 10 및 화학식 11에서,

[232] *은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

[233] X_5 및 X_6는 각각 독립적으로 O, S, Se, P, $N(Ar_6)$, $C(Ar_7)(Ar_8)$ 및 $Si(Ar_9)(Ar_{10})$ 으로 이루어진 군으로부터 선택되며;

[234] Y_{41} 내지 Y_{52}는 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_8)$이며;

[235] 상기 화학식 10에서 화학식 1 내지 9에 결합되는 Y_{49} 내지 Y_{52} 중 어느 하나는 $C(R_8)$이고, 이때 상기 R_8은 부재이고, 상기 화학식 11에서 화학식 1 내지 9에 결합되는 Y_{41} 내지 Y_{44} 중 어느 하나는 $C(R_8)$이고, 이때 상기 R_8은 부재이며;

[236] R_8은 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접한 각각의 R_8이 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R_8이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

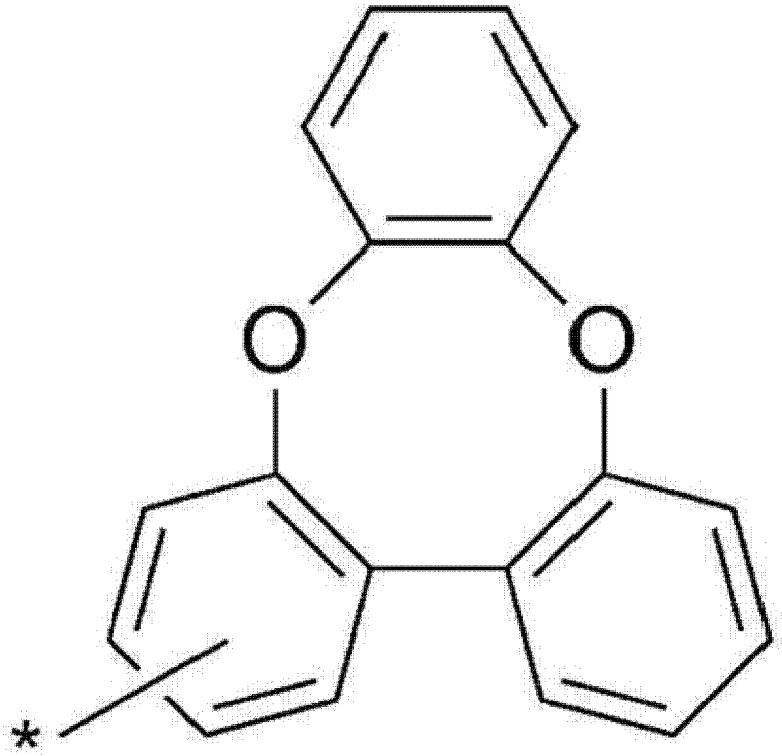
[237] Ar_6 내지 Ar_{10}은 각각 독립적으로 C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 상기 Ar_6 내지 Ar_{10}이 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[238] 상기 R_8 및 Ar_6 내지 Ar_{10}의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[239] 보다 바람직하게는, 상기 화학식 10으로 표시되는 치환기는 하기 화학식 12 내지 화학식 15 중 어느 하나로 표시되는 치환기일 수 있다:

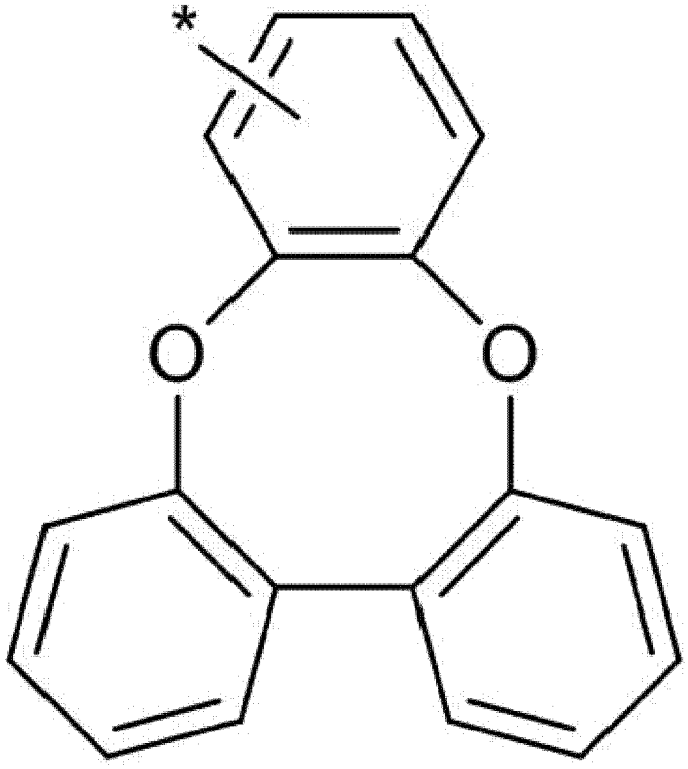
[240] [화학식 12]

[241]



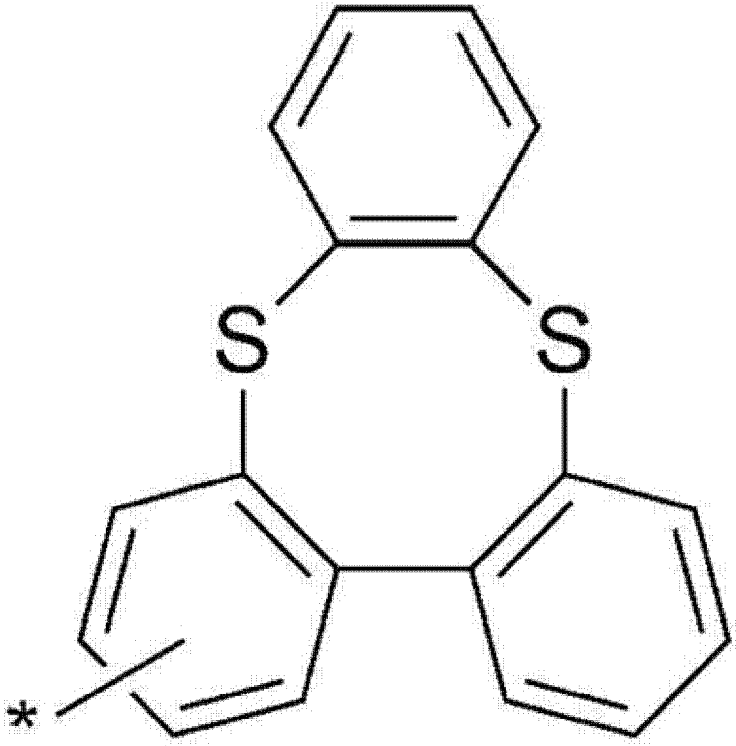
[242] [화학식 13]

[243]



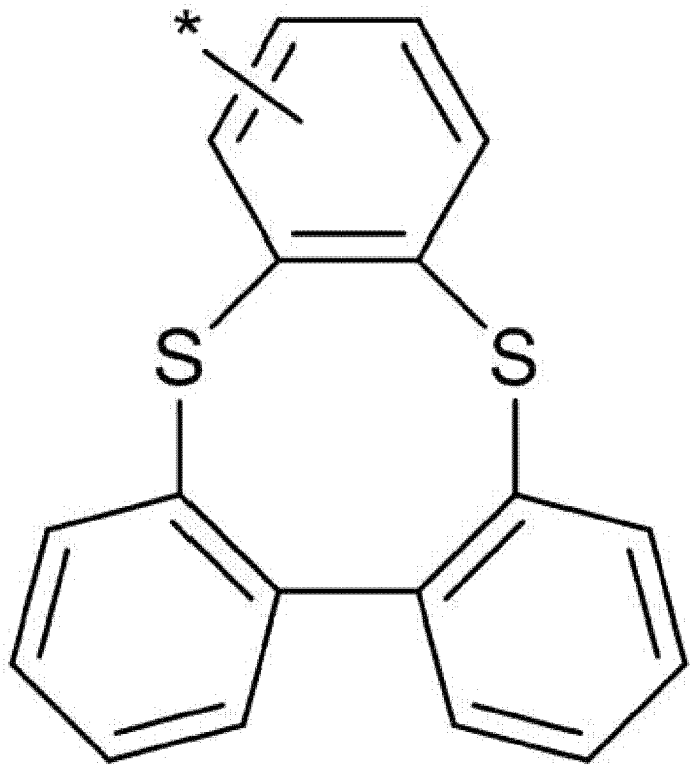
[244] [화학식 14]

[245]



[246] [화학식 15]

[247]



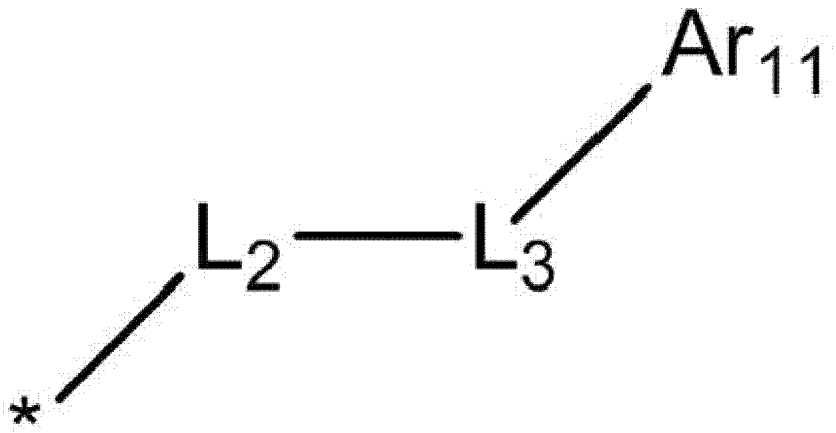
[248] 상기 화학식 12 내지 화학식 15에서,

[249] *는 결합이 이루어지는 부분을 의미한다.

[250] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1 또는 화학식 9로 표시되는 화합물에서 축합 고리를 형성하지 않는 R_7 및 Ar_1 내지 Ar_5 중 적어도 하나는 하기 화학식 16으로 표시되는 치환기일 수 있다:

[251] [화학식 16]

[252]



[253] 상기 화학식 16에서,

[254] *는 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

[255] L_2 및 L_3는 각각 독립적으로 단일결합, C_6~C_{18}의 아릴렌기 또는 핵원자수 5 내지 18개의 헤테로아릴렌기이고, 바람직하게는 단일결합, 페닐렌기, 비페닐렌기, 피리미디닐기 및 카바졸릴기로 이루어진 군에서 선택되며;

[256] Ar_{11}은 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기(예컨대, L_2 또는 L_3)와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

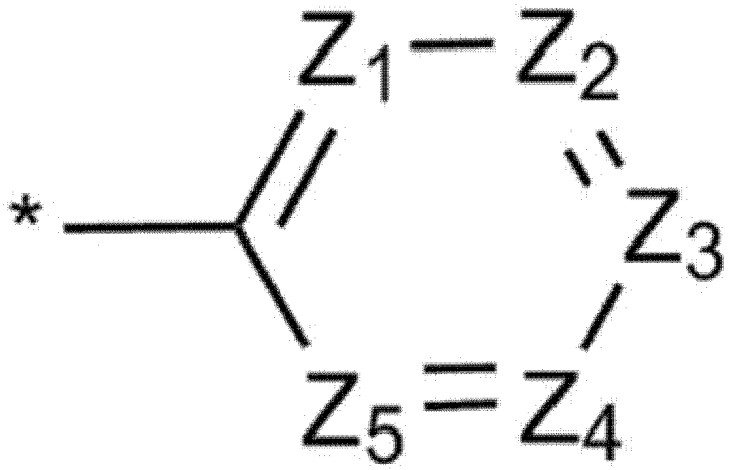
[257] 상기 L_2 및 L_3 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와, 상기 Ar_{11}의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우,

이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[258] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 Ar_{11}은 하기 화학식 17 내지 화학식 24 중 어느 하나로 표시되는 치환기일 수 있다:

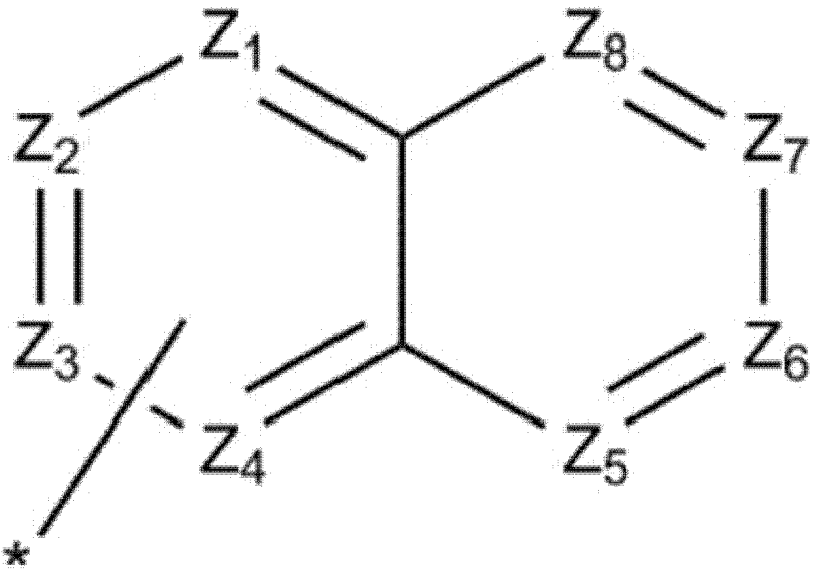
[259] [화학식 17]

[260]



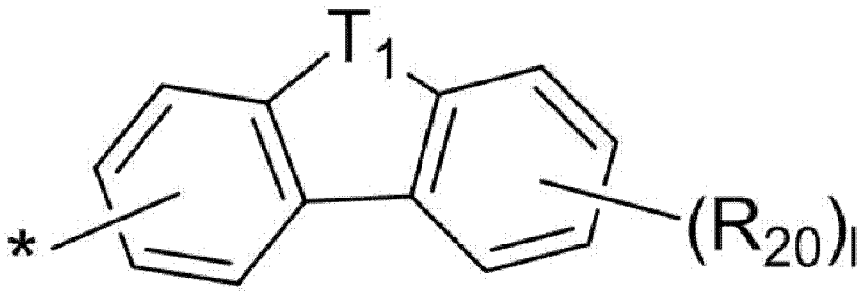
[261] [화학식 18]

[262]



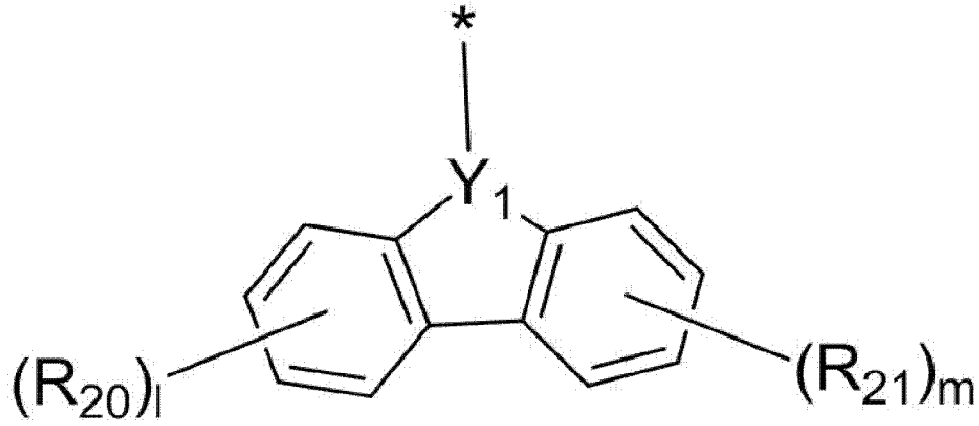
[263] [화학식 19]

[264]



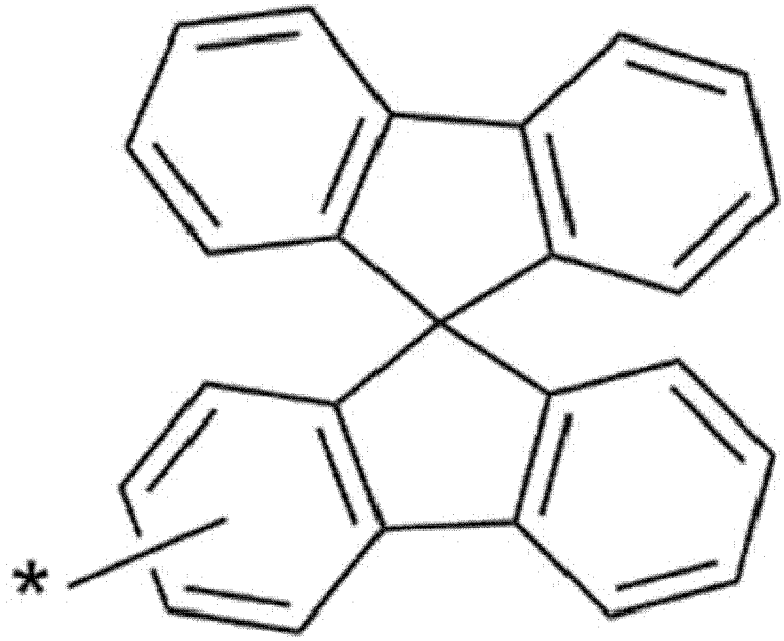
[265] [화학식 20]

[266]



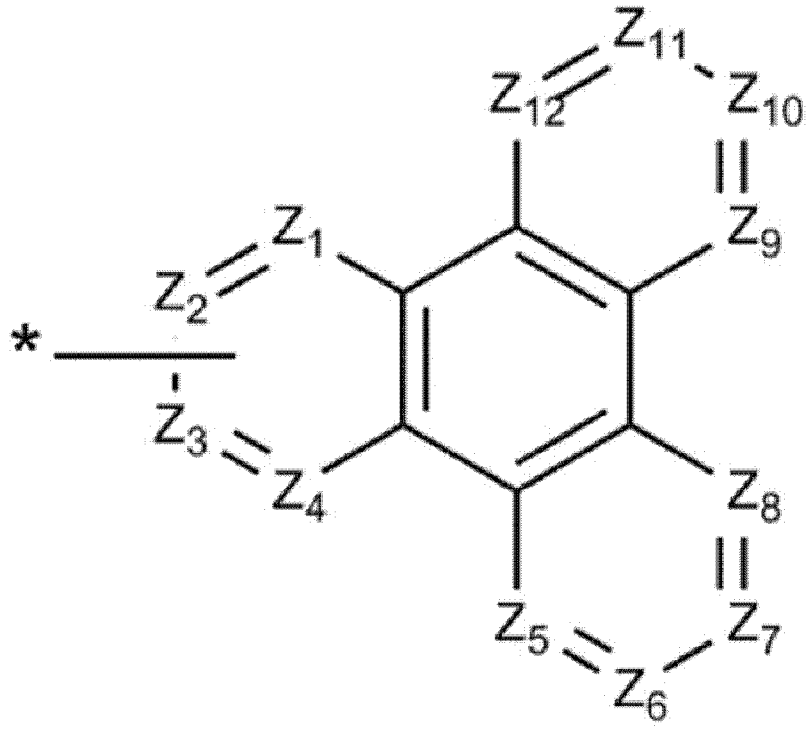
[267] [화학식 21]

[268]



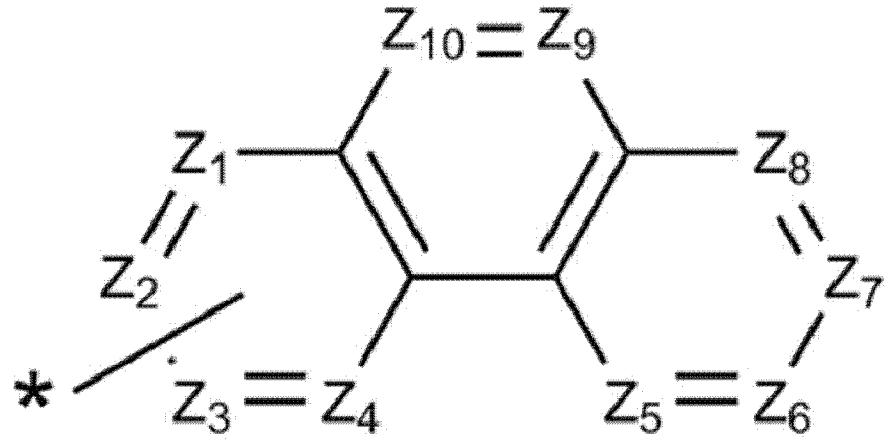
[269] [화학식 22]

[270]



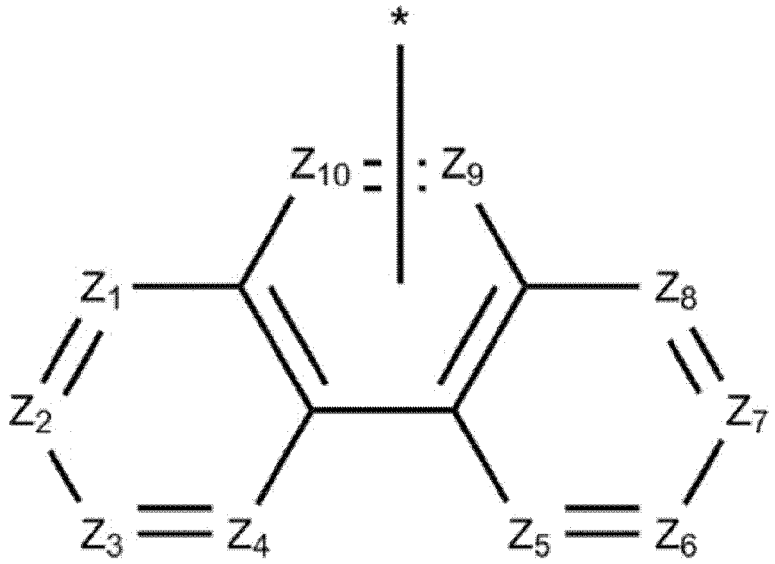
[271] [화학식 23]

[272]



[273] [화학식 24]

[274]



[275] 상기 화학식 17 내지 화학식 24에서,

[276] *은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고:

[277] l 및 m은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며;

[278] R_{20} 및 R_{21}은 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기(예컨대, L_2 또는 L_3, 인접하는 다른 R_{20} 또는 R_{21} 등)와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R_{20} 및 R_{21} 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[279] Z_1 내지 Z_{12}는 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_{22})$이며;

[280] 상기 화학식 22 및 23에서 L_3와 결합되는 Z_1 내지 Z_4 중 어느 하나는 $C(R_{22})$이나, 이때 상기 R_{22}는 부재이고, 상기 화학식 24에서 L_3와 결합되는 Z_9 또는 Z_{10}은 $C(R_{22})$이고, 이때 상기 R_{22}는 부재이며;

[281] T_1은 O, S, $N(R_{23})$ 또는 $C(R_{24})(R_{25})$이며;

[282] Y_1은 N 또는 $C(R_{26})$이며;

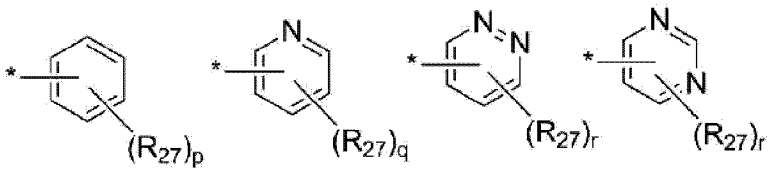
[283] R_{22} 내지 R_{26}은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나,

인접하는 기(예컨대, L_2 또는 L_3, 인접하는 다른 R_{22} 내지 R_{26} 등)와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R_{22}가 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

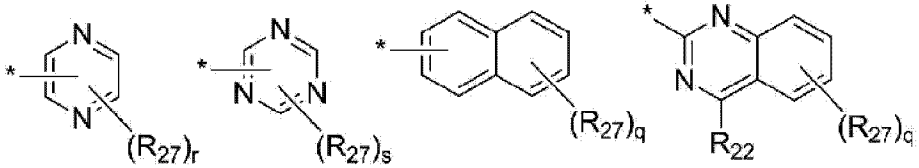
[284] 상기 R_{20} 내지 R_{26}의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[285] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 17 내지 화학식 24로 표시되는 치환기는 하기 화학식 F-1 내지 화학식 F-22 중 어느 하나로 표시되는 치환기일 수 있다:

[286]

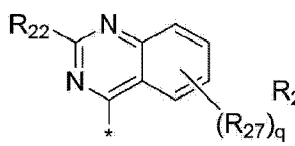


F-1 F-2 F-3 F-4

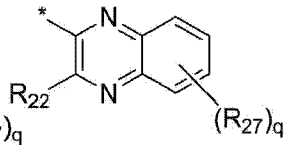


F-5 F-6 F-7 F-8

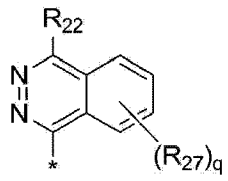
[287]



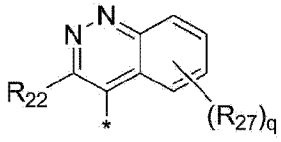
F-9



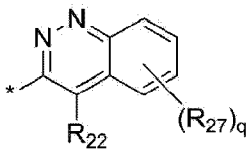
F-10



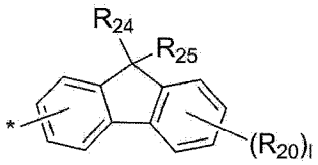
F-11



F-12

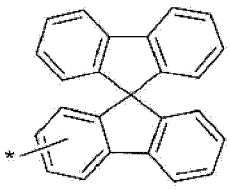


F-13

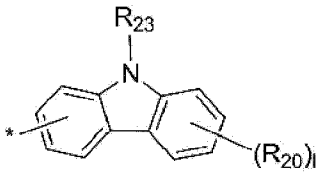


F-14

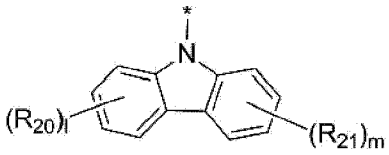
[288]



F-15

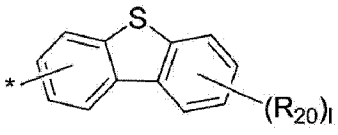


F-16

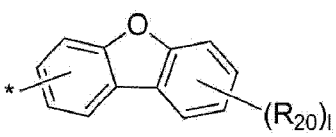


F-17

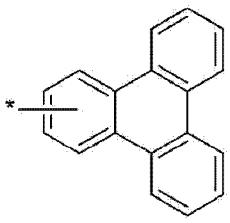
[289]



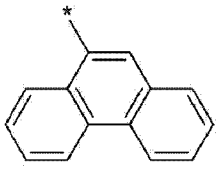
F-18



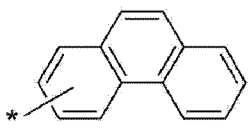
F-19



F-20



F-21



F-22

[290] 상기 화학식 F-1 내지 화학식 F-22에서,

[291] *은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

[292] p는 0 내지 5의 정수이고;

[293] q는 0 내지 4의 정수이며;

[294] r은 0 내지 3의 정수이며;

[295] s는 0 내지 2의 정수이며;

[296] R_{27}은 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기(예컨대, L_2, L_3, R_{22} 또는 다른 R_{27} 등)와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R_{27}이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

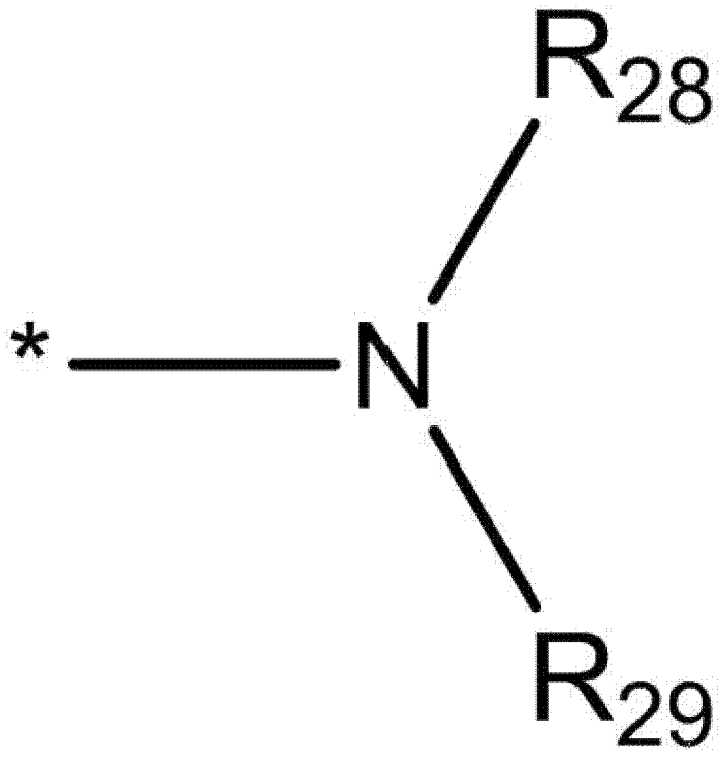
[297] 상기 R_{27}의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

[298] l, m, R_{20} 내지 R_{25} 각각은 상기 화학식 17 내지 화학식 24에서 정의된 바와 같다.

[299] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 Ar_{11}은 하기 화학식 25 내지 화학식 27 중 어느 하나로 표시되는 치환기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

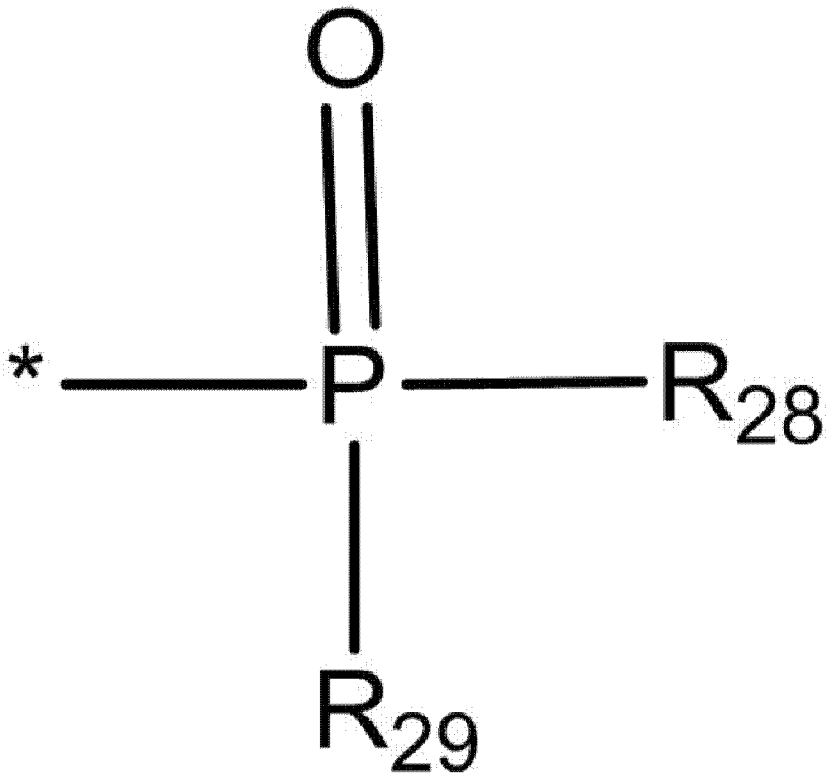
[300] [화학식 25]

[301]



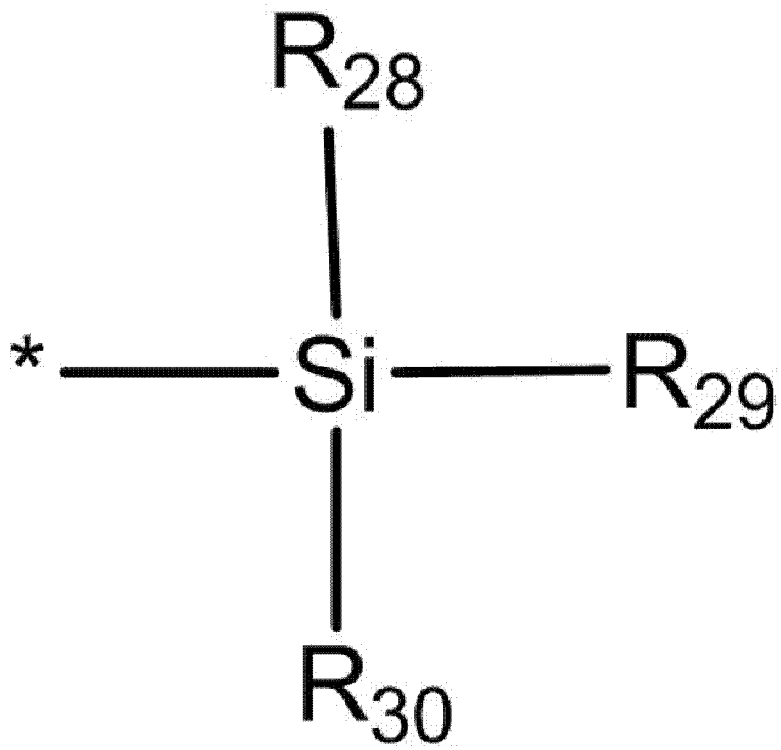
[302] [화학식 26]

[303]



[304] [화학식 27]

[305]



[306] 상기 화학식 25 내지 화학식 27에서,

[307] *는 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

[308] R_{28} 내지 R_{30}은 각각 독립적으로 C_1~C_{40}의 알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 상기 R_{28} 및 R_{29} 또는 R_{29} 및 R_{30}이 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

[309] 상기 R_{28} 내지 R_{30}의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[310] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 25 내지 화학식 27에서 R_{28} 내지 R_{30}은 각각 독립적으로, C_6~C_{60}의 아릴기 또는 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기일 수 있고,

[311] 상기 R_{28} 내지 R_{30}의 아릴기 및 헤테로아릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의

알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

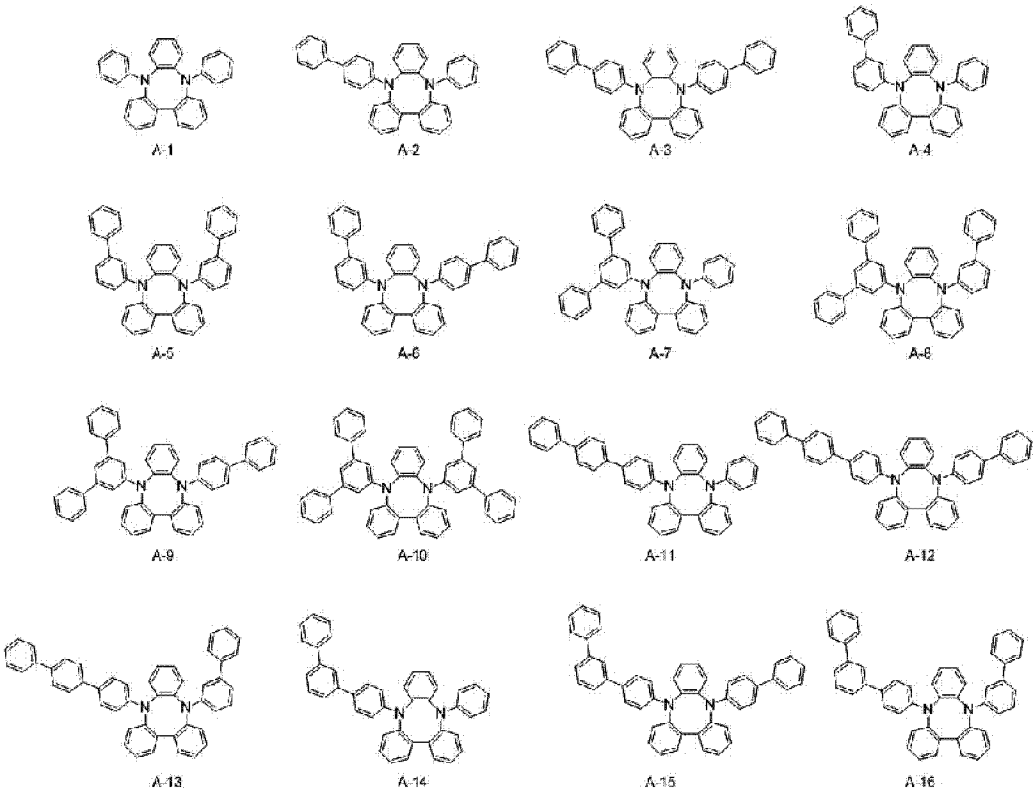
[312] 보다 바람직하게는, 상기 화학식 25 내지 화학식 27에서 R_{28} 내지 R_{30}은 각각 독립적으로, 페닐기, 비페닐기, 플루오렌 및 나프탈렌으로 이루어진 군에서 선택될 수 있으며,

[313] 상기 R_{28} 내지 R_{30}의 페닐기, 비페닐기, 플루오렌기 및 나프탈렌은 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

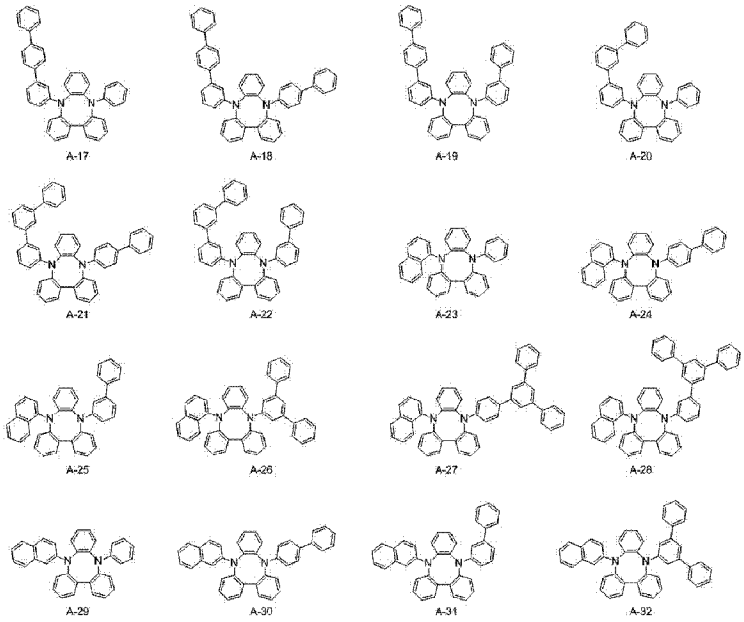
[314]

[315] 본 발명에서 상기 화학식 1 또는 화학식 9로 표시되는 화합물은 보다 구체적으로 하기 화합물로 나타낼 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다:

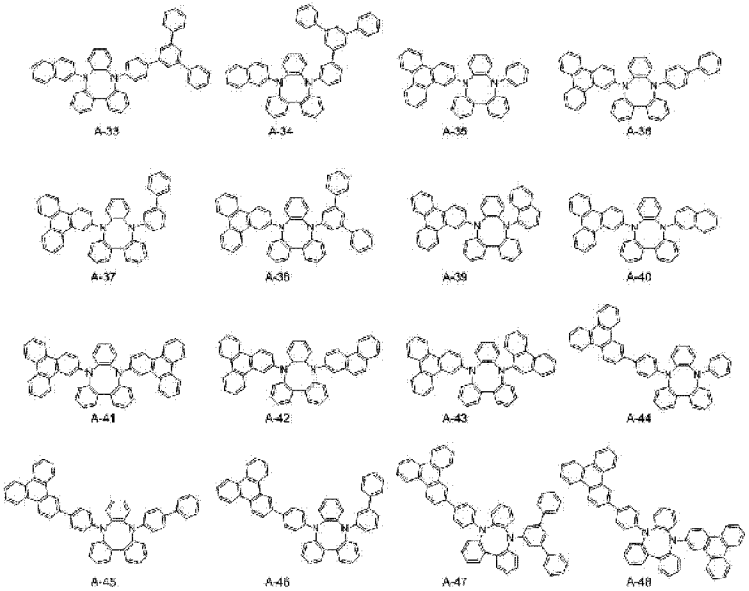
[316]


A-1
A-2
A-3
A-4
A-5
A-6
A-7
A-8
A-9
A-10
A-11
A-12
A-13
A-14
A-15
A-16

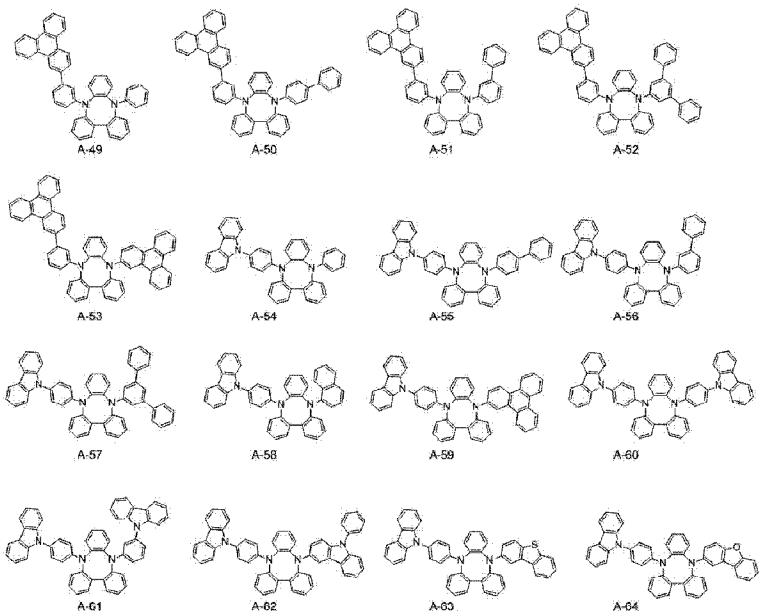
[317]


A-17
A-18
A-19
A-20
A-21
A-22
A-23
A-24
A-25
A-26
A-27
A-28
A-29
A-30
A-31
A-32

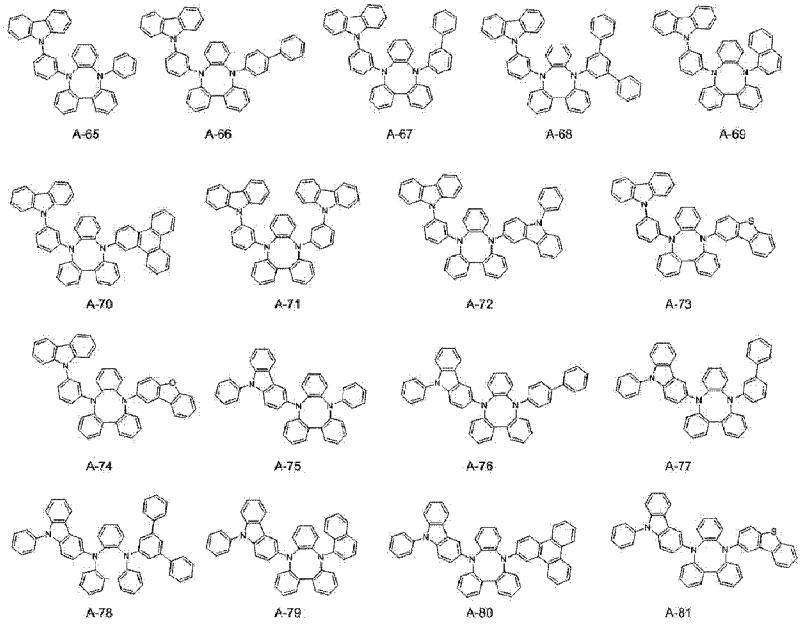
[318]


A-33
A-34
A-35
A-36
A-37
A-38
A-39
A-40
A-41
A-42
A-43
A-44
A-45
A-46
A-47
A-48

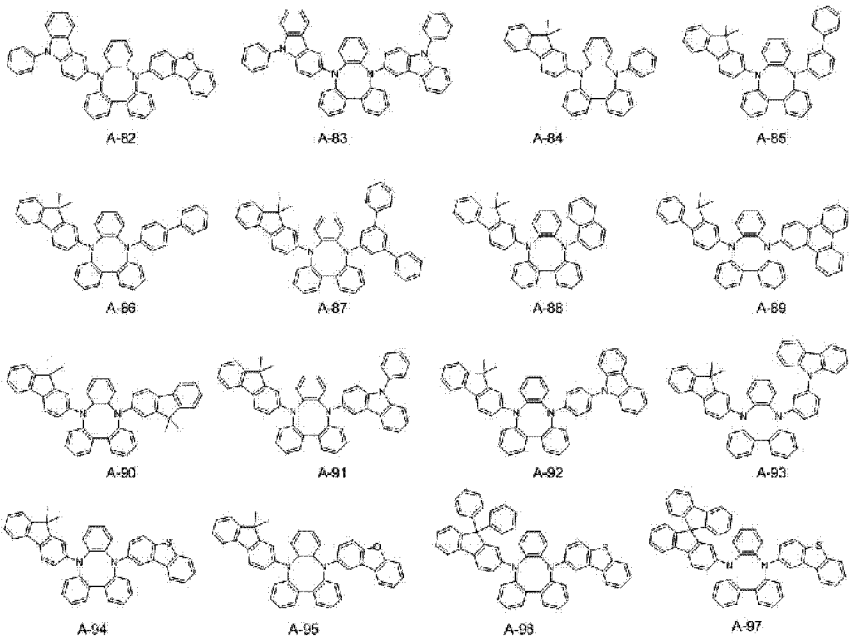
[319]


A-49
A-50
A-51
A-52
A-53
A-54
A-55
A-56
A-57
A-58
A-59
A-60
A-61
A-62
A-63
A-64

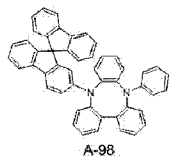
[320]

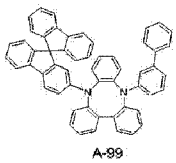

A-65
A-66
A-67
A-68
A-69
A-70
A-71
A-72
A-73
A-74
A-75
A-76
A-77
A-78
A-79
A-80
A-81

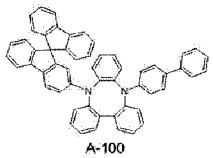
[321]

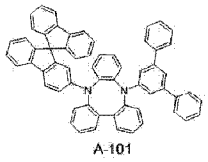

A-82
A-83
A-84
A-85
A-86
A-87
A-88
A-89
A-90
A-91
A-92
A-93
A-94
A-95
A-96
A-97

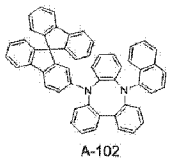
[322]

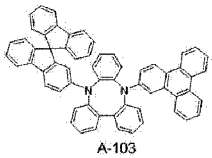

A-98

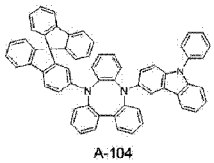

A-99

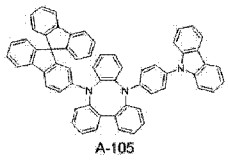

A-100

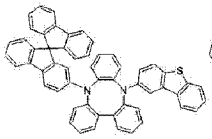

A-101

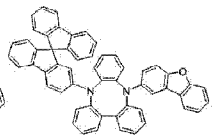

A-102

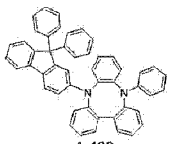

A-103

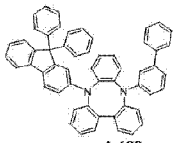

A-104


A-105

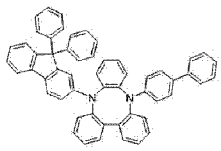

A-106

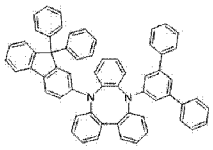

A-107

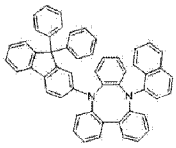

A-108

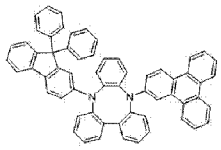

A-109

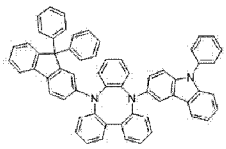
[323]

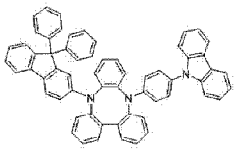

A-110

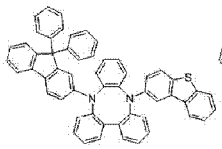

A-111

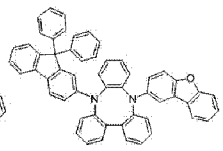

A-112


A-113

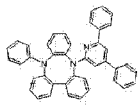

A-114

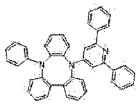

A-115

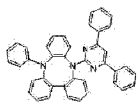

A-116

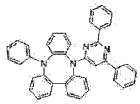

A-117

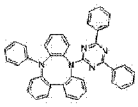
[324]

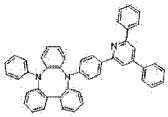

B-1

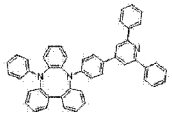

B-2

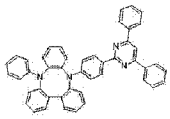

B-3

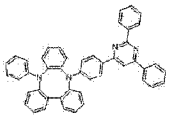

B-4

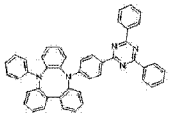

B-5

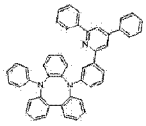

B-6

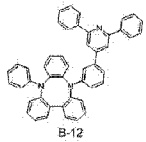

B-7

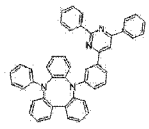

B-8

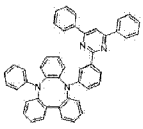

B-9

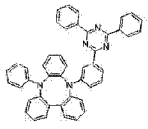

B-10

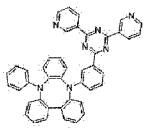

B-11


B-12

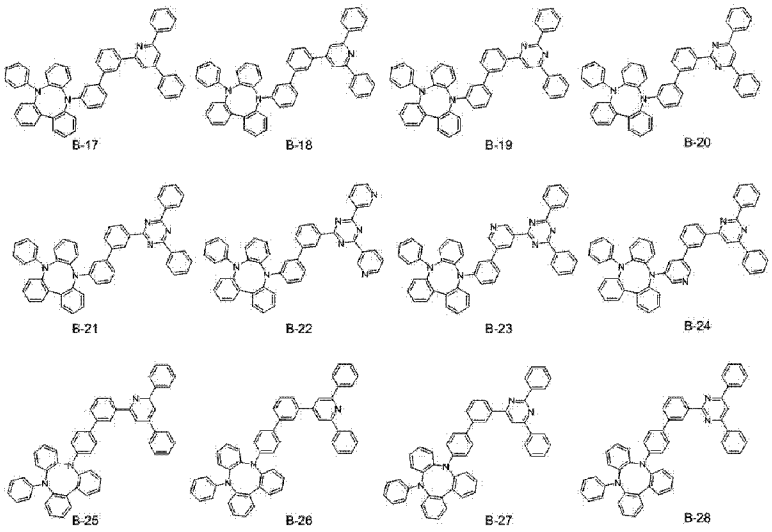

B-13


B-14

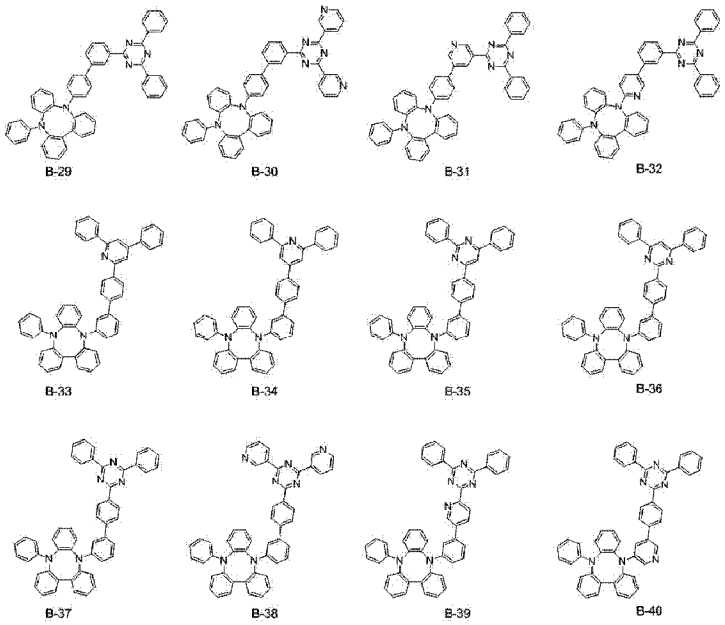

B-15


B-16

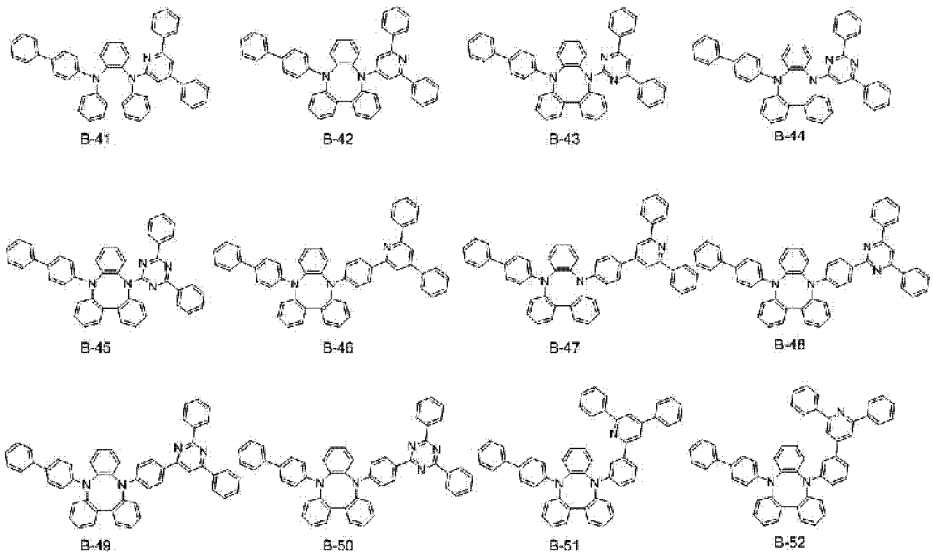
[325]


B-17
B-18
B-19
B-20
B-21
B-22
B-23
B-24
B-25
B-26
B-27
B-28

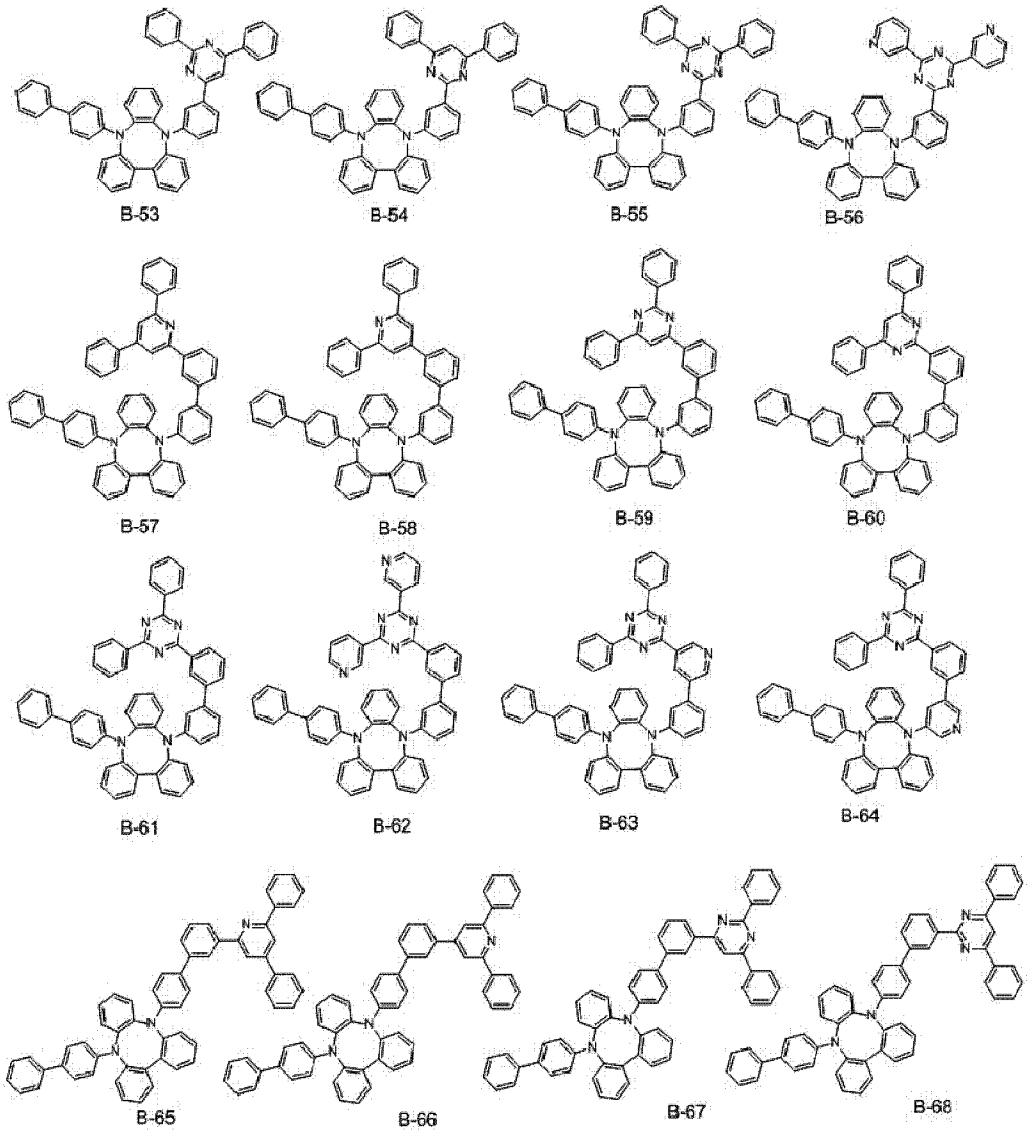
[326]


B-29
B-30
B-31
B-32
B-33
B-34
B-35
B-36
B-37
B-38
B-39
B-40

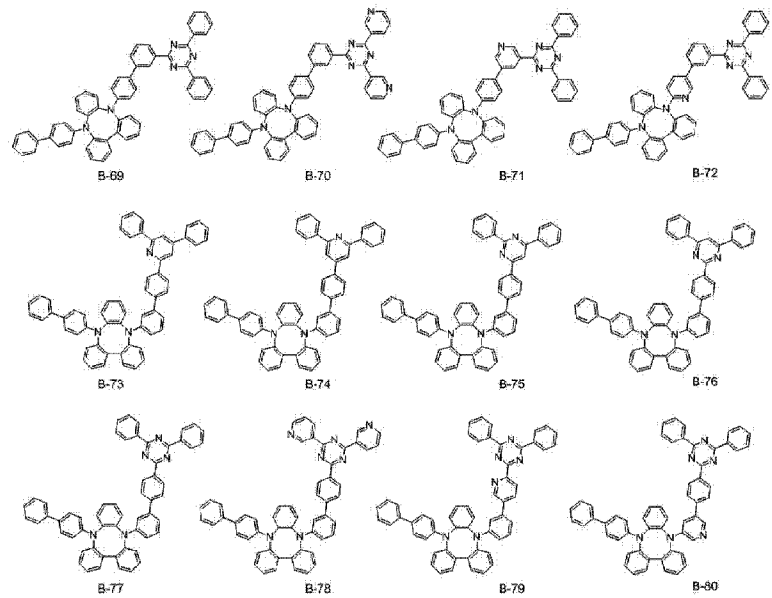
[327]


B-41
B-42
B-43
B-44
B-45
B-46
B-47
B-48
B-49
B-50
B-51
B-52

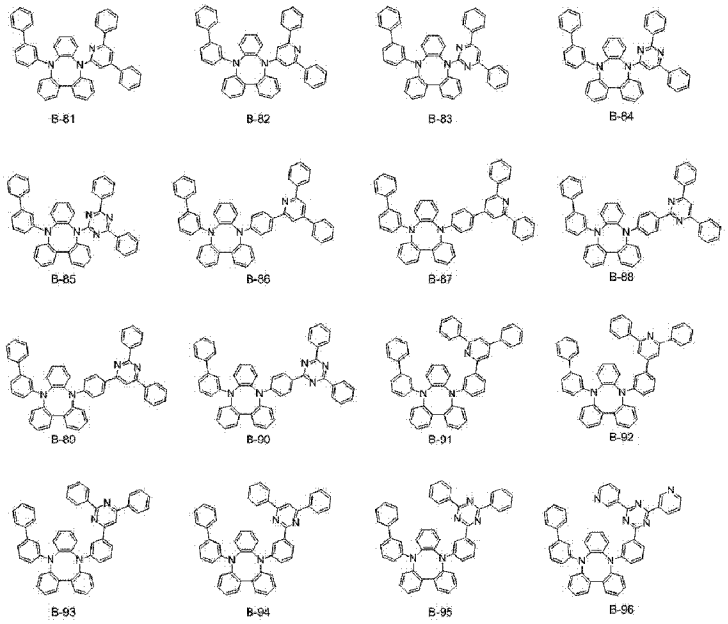
[328]


B-53
B-54
B-55
B-56
B-57
B-58
B-59
B-60
B-61
B-62
B-63
B-64
B-65
B-66
B-67
B-68

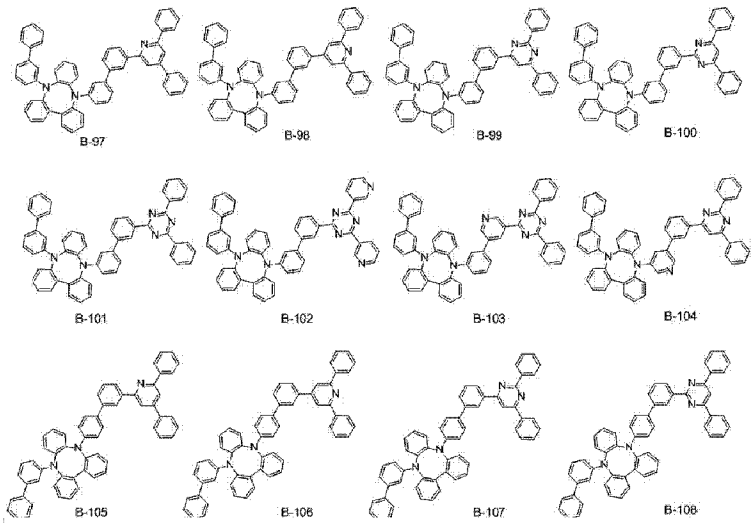
[329]


B-69
B-70
B-71
B-72
B-73
B-74
B-75
B-76
B-77
B-78
B-79
B-80

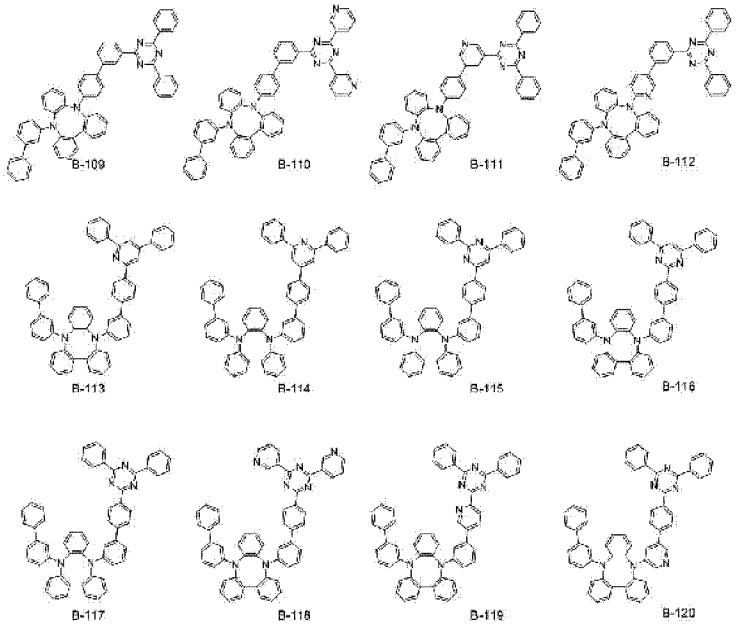
[330]


B-81
B-82
B-83
B-84
B-85
B-86
B-87
B-88
B-89
B-90
B-91
B-92
B-93
B-94
B-95
B-96

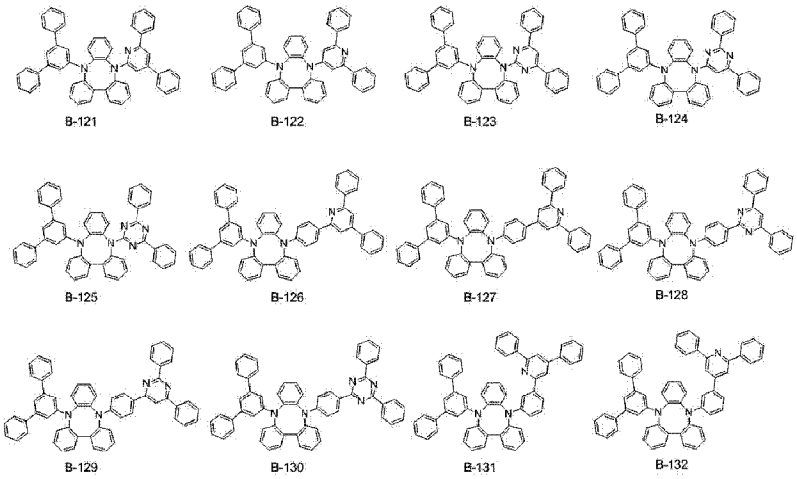
[331]


B-97
B-98
B-99
B-100
B-101
B-102
B-103
B-104
B-105
B-106
B-107
B-108

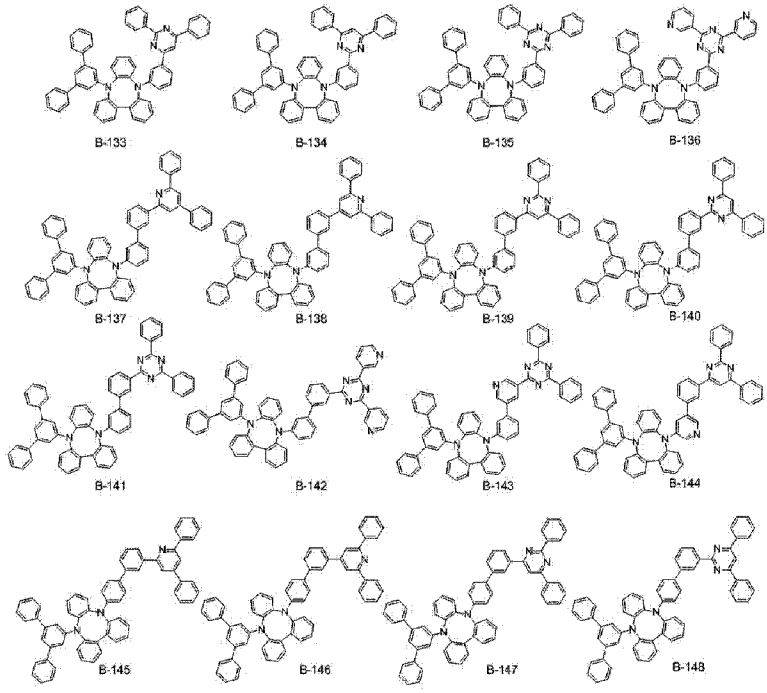
[332]


B-109
B-110
B-111
B-112
B-113
B-114
B-115
B-116
B-117
B-118
B-119
B-120

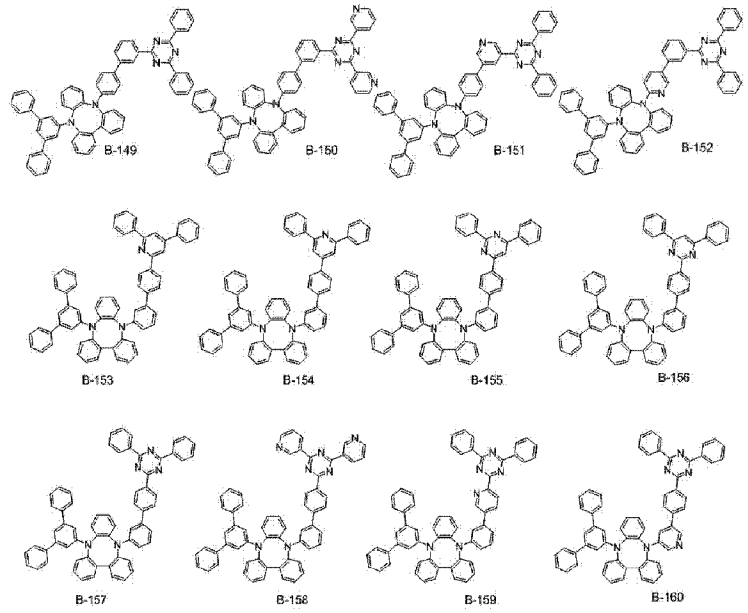
[333]


B-121
B-122
B-123
B-124
B-125
B-126
B-127
B-128
B-129
B-130
B-131
B-132

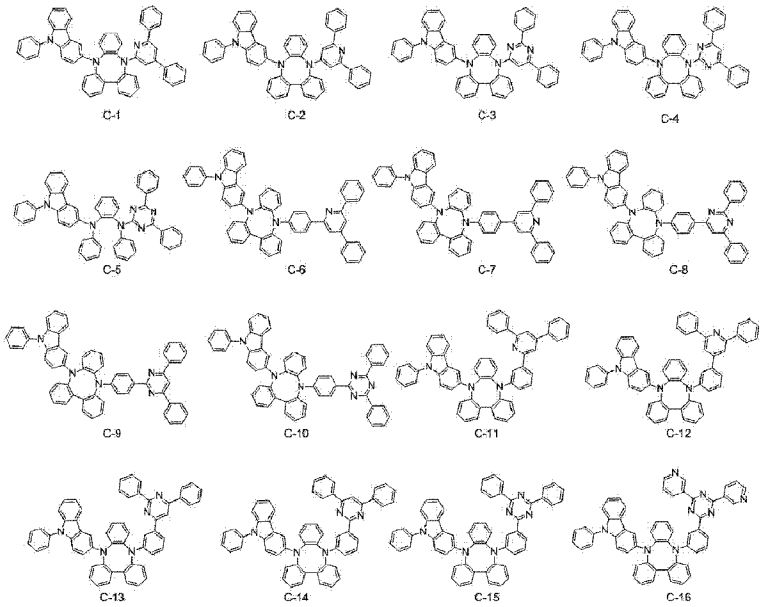
[334]


B-133
B-134
B-135
B-136
B-137
B-138
B-139
B-140
B-141
B-142
B-143
B-144
B-145
B-146
B-147
B-148

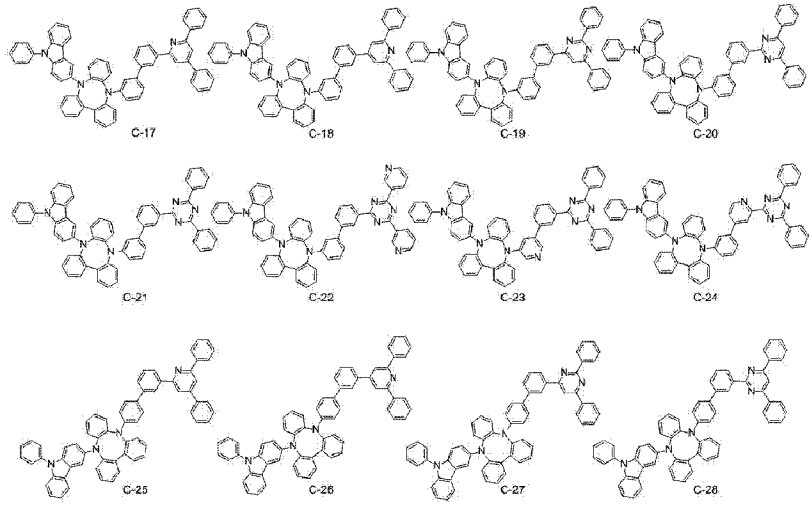
[335]


B-149
B-150
B-151
B-152
B-153
B-154
B-155
B-156
B-157
B-158
B-159
B-160

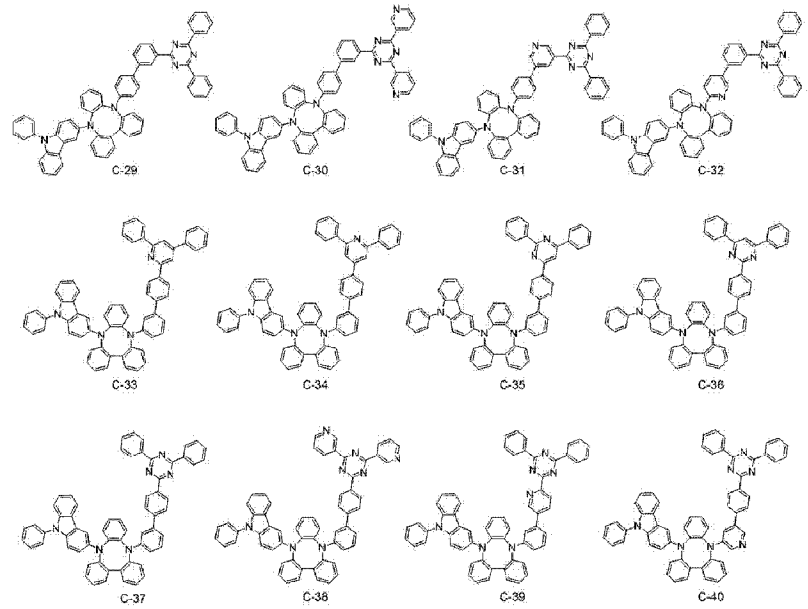
[336]


C-1
C-2
C-3
C-4
C-5
C-6
C-7
C-8
C-9
C-10
C-11
C-12
C-13
C-14
C-15
C-16

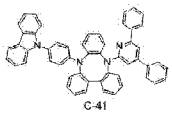
[337]

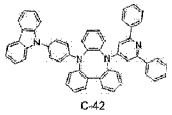

C-17
C-18
C-19
C-20
C-21
C-22
C-23
C-24
C-25
C-26
C-27
C-28

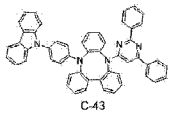
[338]

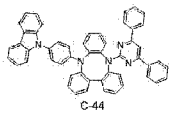

C-29
C-30
C-31
C-32
C-33
C-34
C-35
C-36
C-37
C-38
C-39
C-40

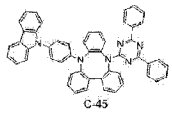
[339]

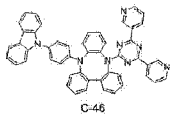

C-41

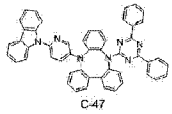

C-42

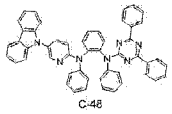

C-43

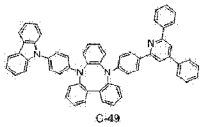

C-44

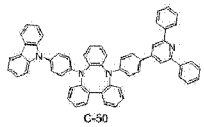

C-45

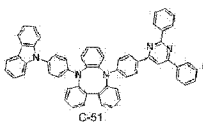

C-46

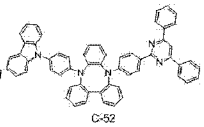

C-47


C-48

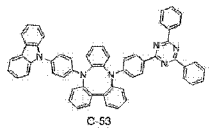

C-49

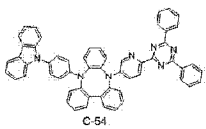

C-50

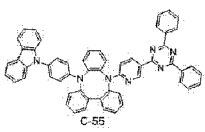

C-51

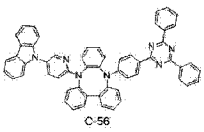

C-52

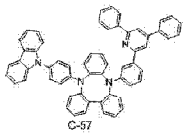
[340]

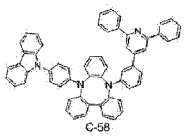

C-53

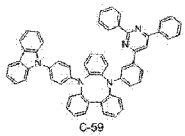

C-54

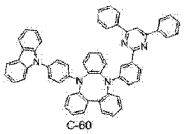

C-55

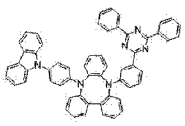

C-56

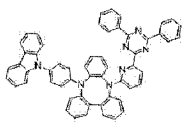

C-57

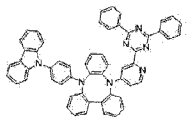

C-58

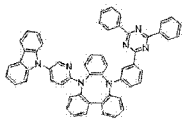

C-59

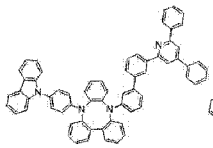

C-60

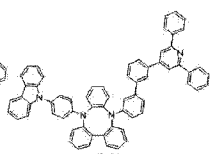

C-61

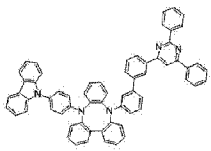

C-62

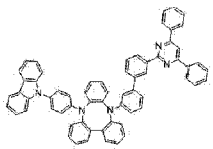

C-63


C-64

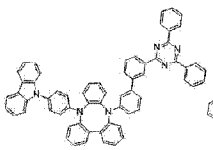

C-65

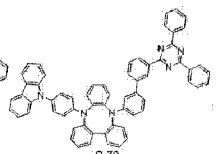

C-66

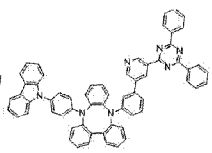

C-67

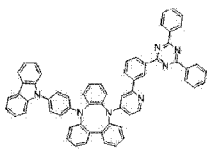

C-68

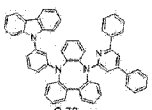
[341]

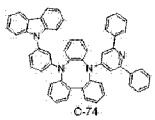

C-69

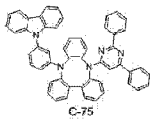

C-70

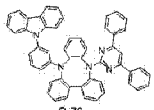

C-71

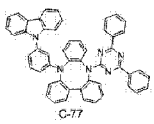

C-72

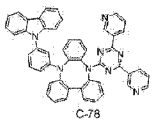

C-73

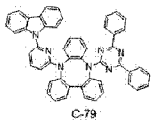

C-74

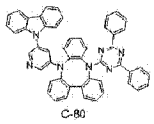

C-75


C-76

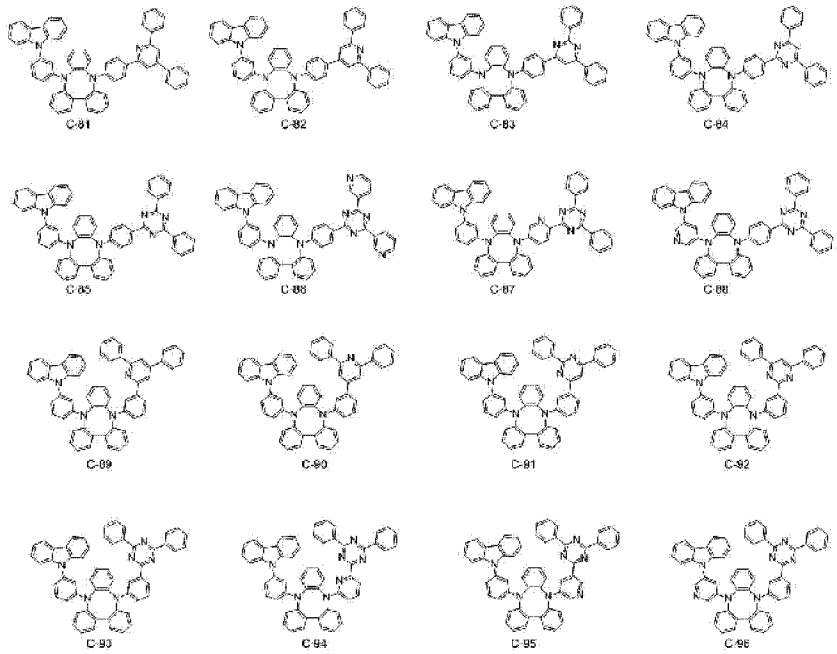

C-77


C-78

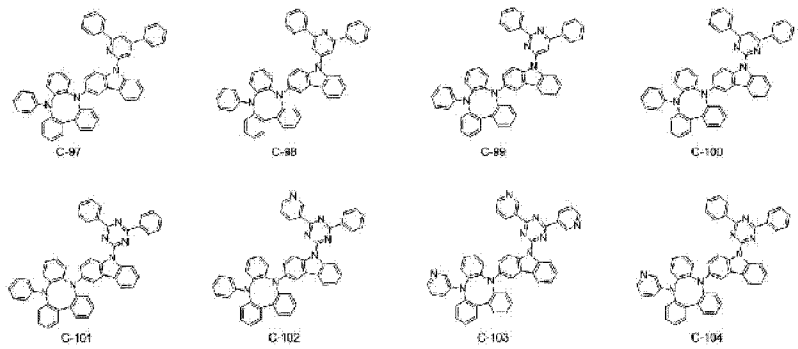

C-79


C-80

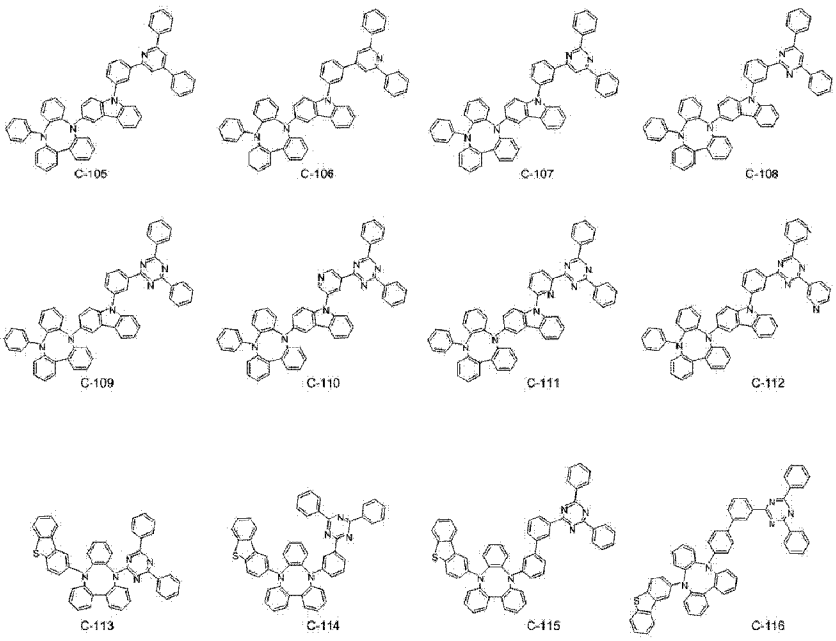
[342]


C-81
C-82
C-83
C-84
C-85
C-86
C-87
C-88
C-89
C-90
C-91
C-92
C-93
C-94
C-95
C-96

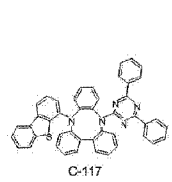
[343]

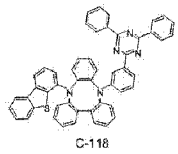

C-97
C-98
C-99
C-100
C-101
C-102
C-103
C-104

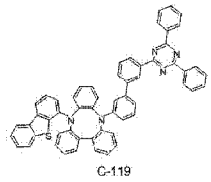
[344]

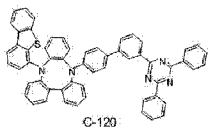

C-105
C-106
C-107
C-108
C-109
C-110
C-111
C-112
C-113
C-114
C-115
C-116

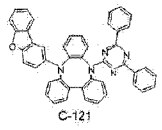
[345]

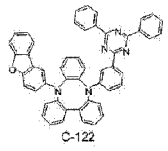

C-117

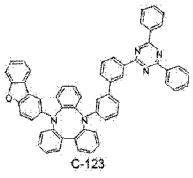

C-118

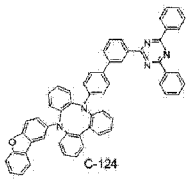

C-119

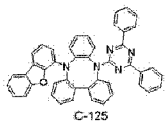

C-120

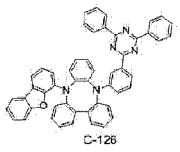

C-121

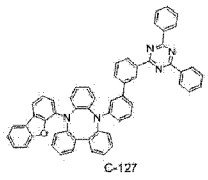

C-122

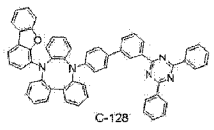

C-123


C-124

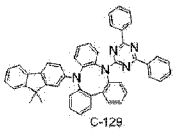

C-125

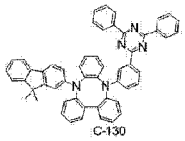

C-126

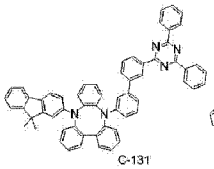

C-127

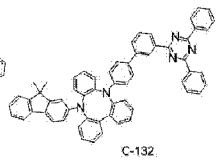

C-128

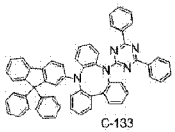
[346]

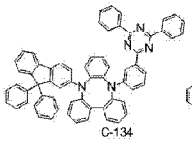

C-129

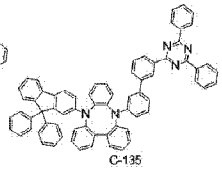

C-130

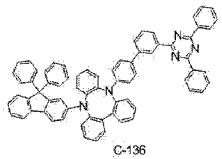

C-131

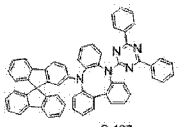

C-132

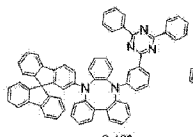

C-133

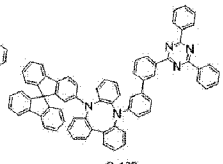

C-134

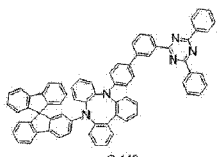

C-135


C-136

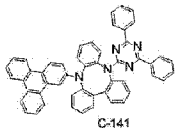

C-137

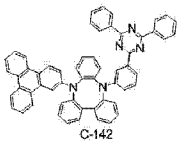

C-138

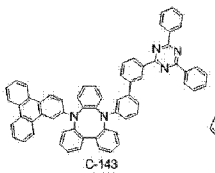

C-139

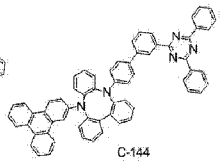

C-140

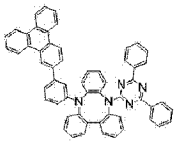
[347]

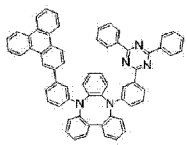

C-141

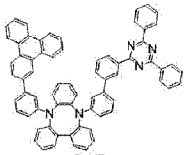

C-142

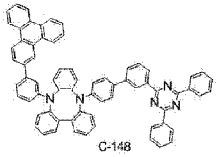

C-143


C-144

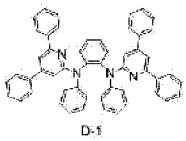

C-145

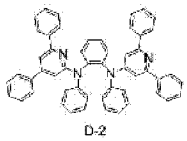

C-146

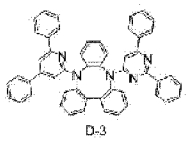

C-147

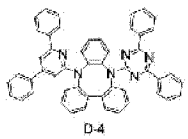

C-148

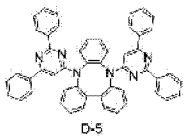
[348]

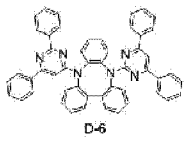

D-1

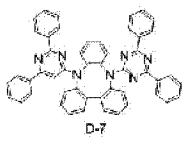

D-2

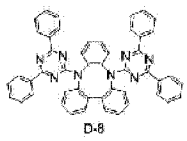

D-3

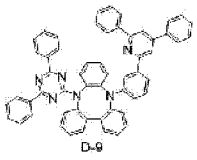

D-4

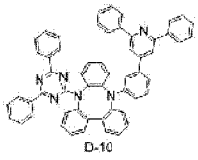

D-5

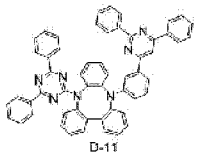

D-6

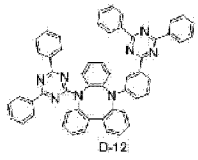

D-7


D-8

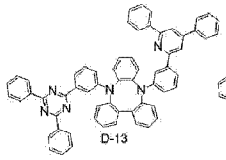

D-9

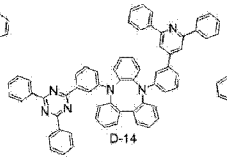

D-10

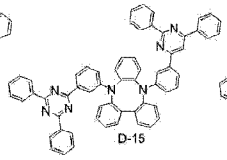

D-11

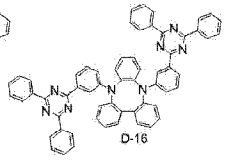

D-12

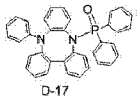
[349]

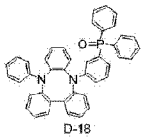

D-13

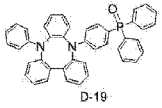

D-14

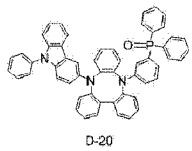

D-15

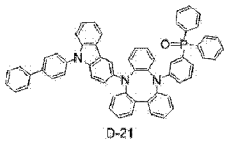

D-16

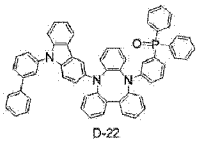

D-17

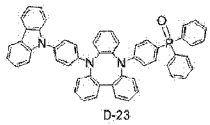

D-18

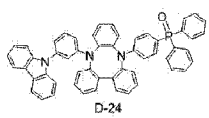

D-19


D-20

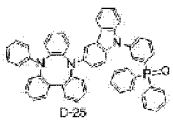

D-21

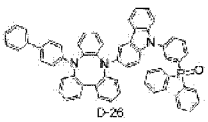

D-22

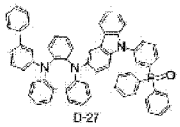

D-23

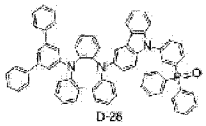

D-24

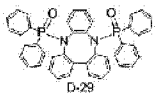
[350]

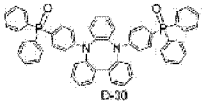

D-25

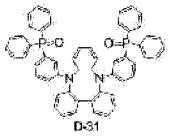

D-26

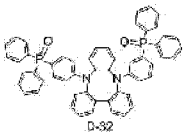

D-27

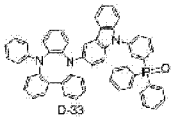

D-28

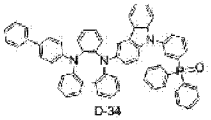

D-29

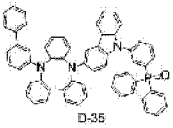

D-30

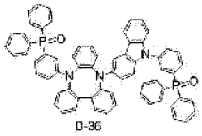

D-31

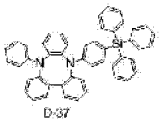

D-32

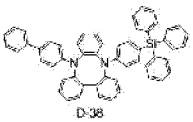

D-33

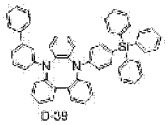

D-34

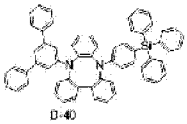

D-35


D-36

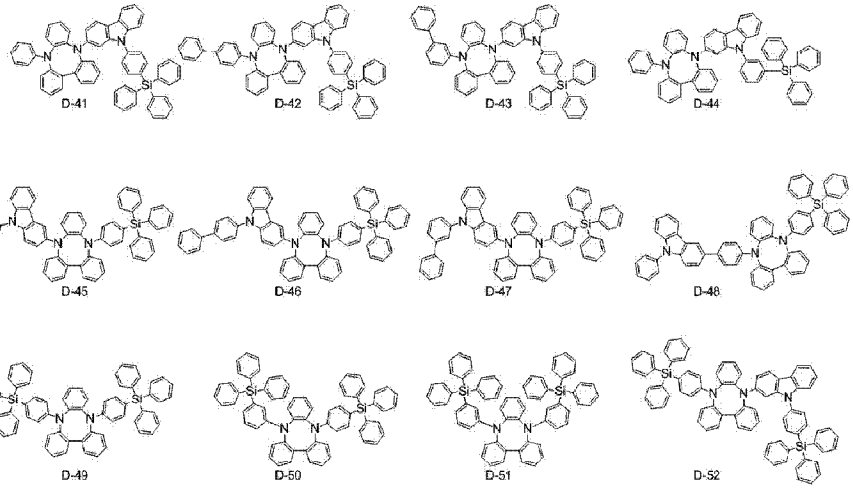

D-37


D-38

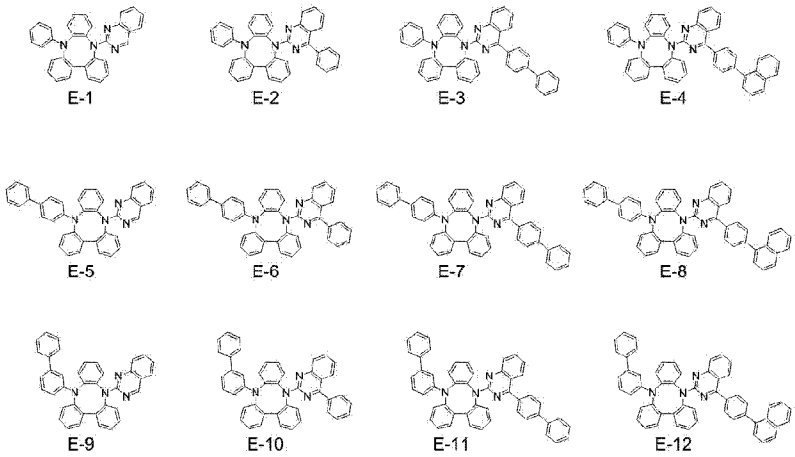

D-39


D-40

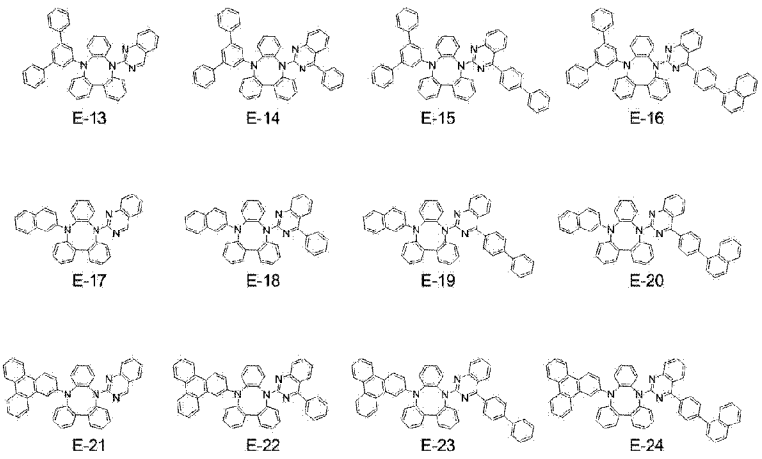
[351]


D-41
D-42
D-43
D-44
D-45
D-46
D-47
D-48
D-49
D-50
D-51
D-52

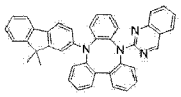
[352]

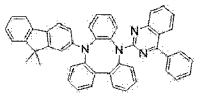

E-1
E-2
E-3
E-4
E-5
E-6
E-7
E-8
E-9
E-10
E-11
E-12

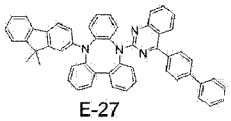
[353]

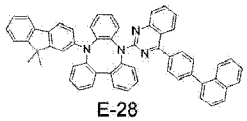

E-13
E-14
E-15
E-16
E-17
E-18
E-19
E-20
E-21
E-22
E-23
E-24

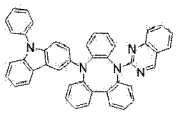
[354]

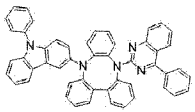

E-25

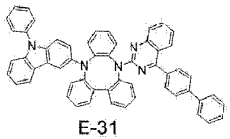

E-26

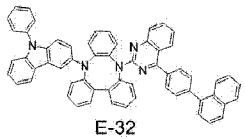

E-27

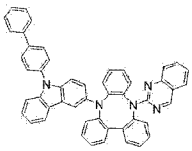

E-28

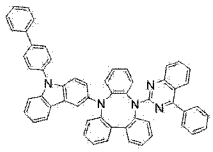

E-29

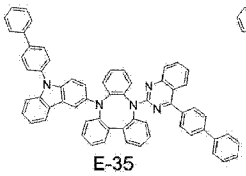

E-30

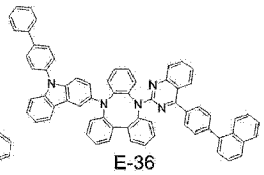

E-31


E-32

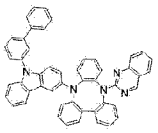

E-33

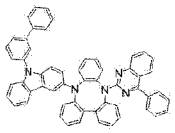

E-34

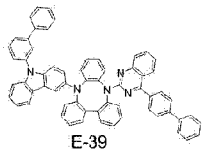

E-35

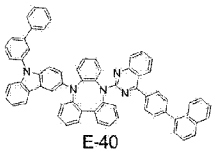

E-36

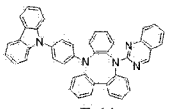
[355]

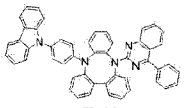

E-37

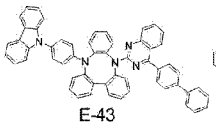

E-38

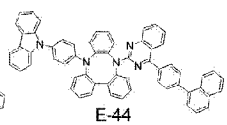

E-39

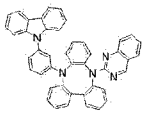

E-40

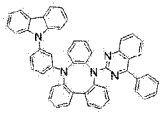

E-41

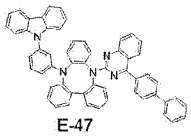

E-42

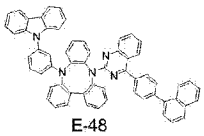

E-43


E-44

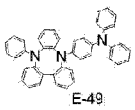

E-45

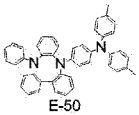

E-46

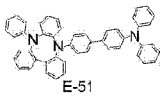

E-47

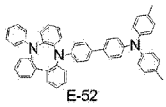

E-48

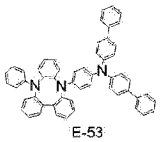
[356]

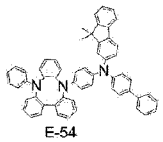

E-49

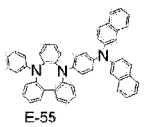

E-50

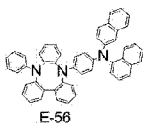

E-51

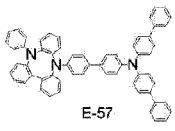

E-52

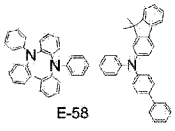

E-53

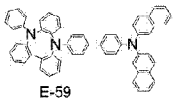

E-54

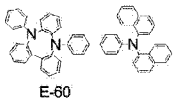

E-55


E-56

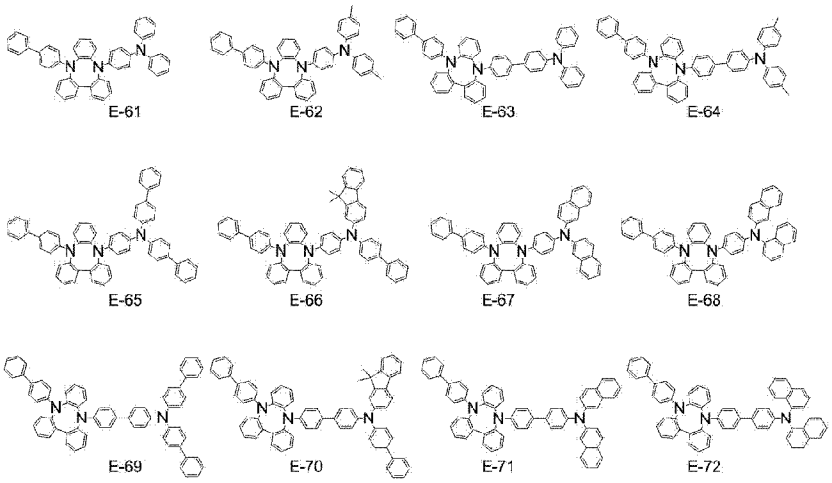

E-57


E-58

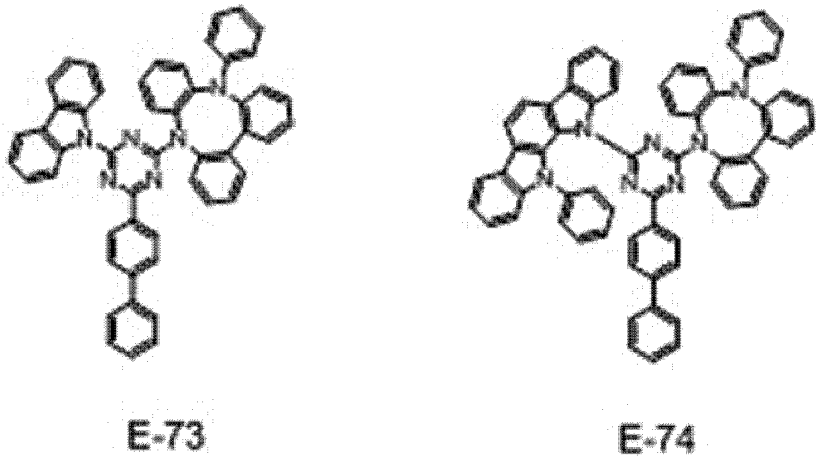

E-59


E-60

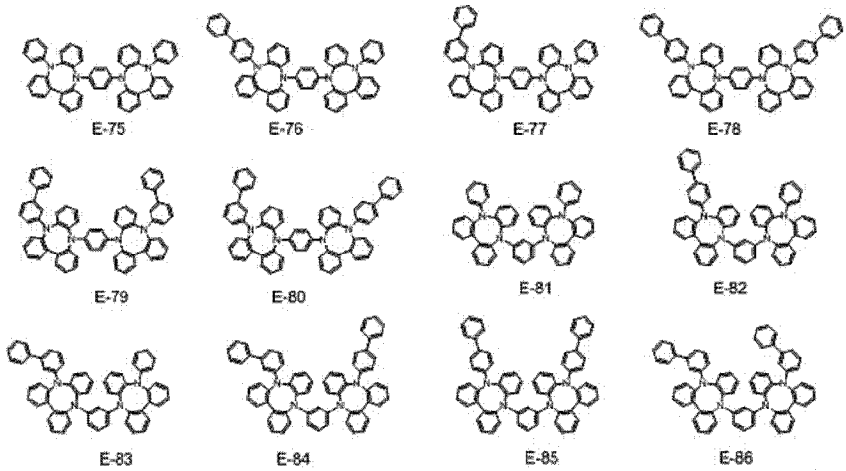
[357]


E-61
E-62
E-63
E-64
E-65
E-66
E-67
E-68
E-69
E-70
E-71
E-72

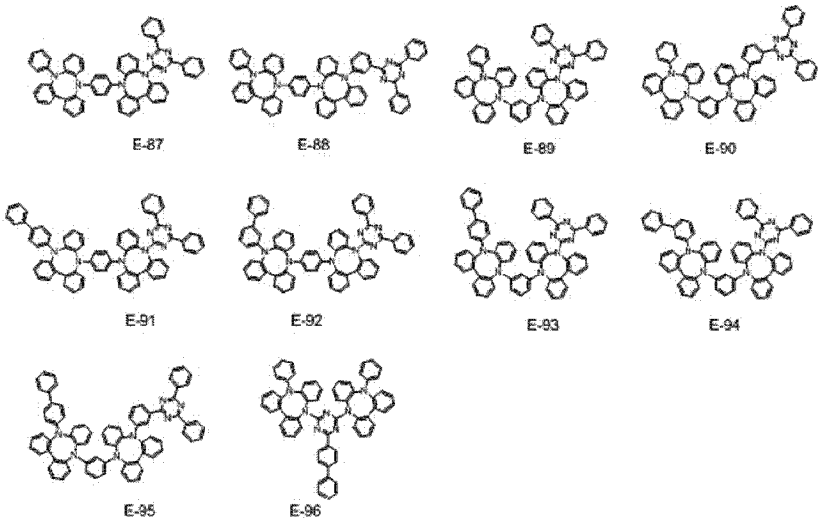
[358]


E-73
E-74

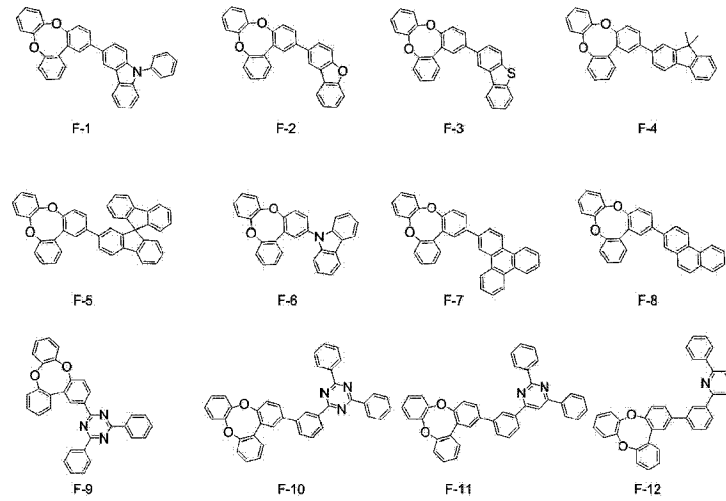
[359]


E-75
E-76
E-77
E-78
E-79
E-80
E-81
E-82
E-83
E-84
E-85
E-86

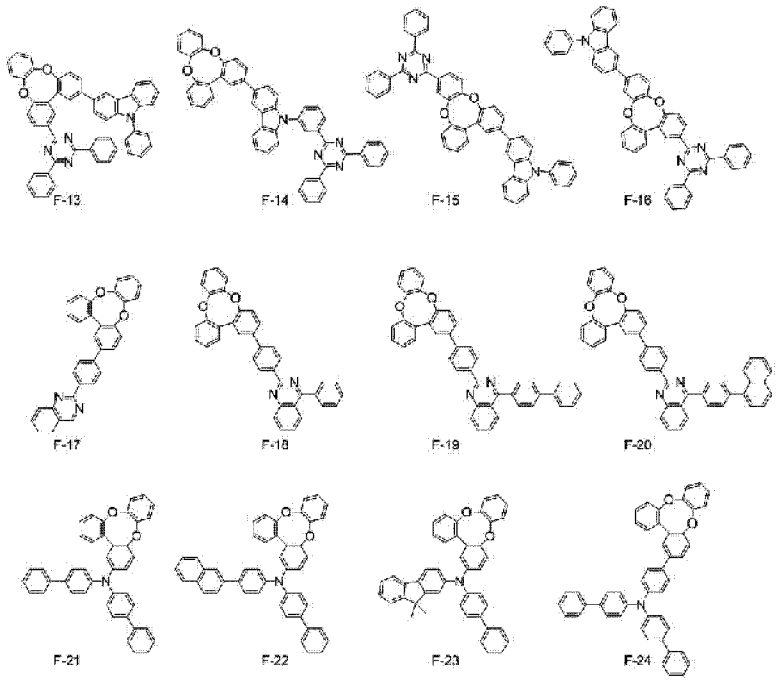
[360]


E-87
E-88
E-89
E-90
E-91
E-92
E-93
E-94
E-95
E-96

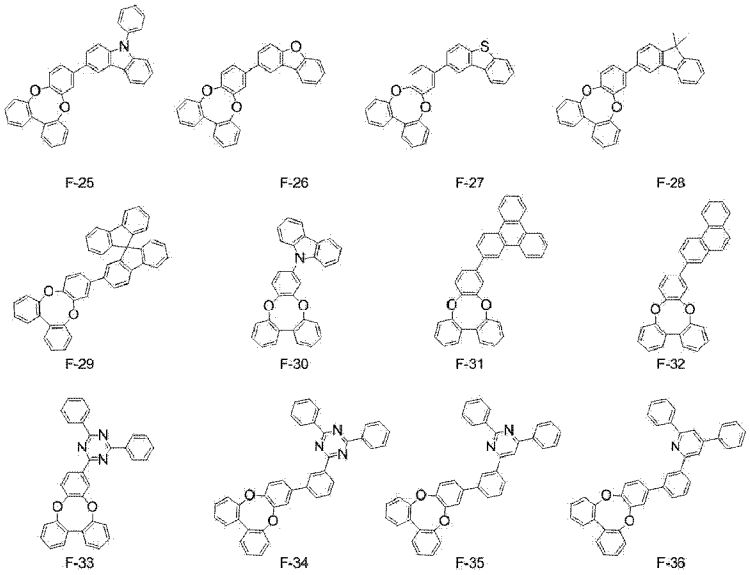
[361]


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

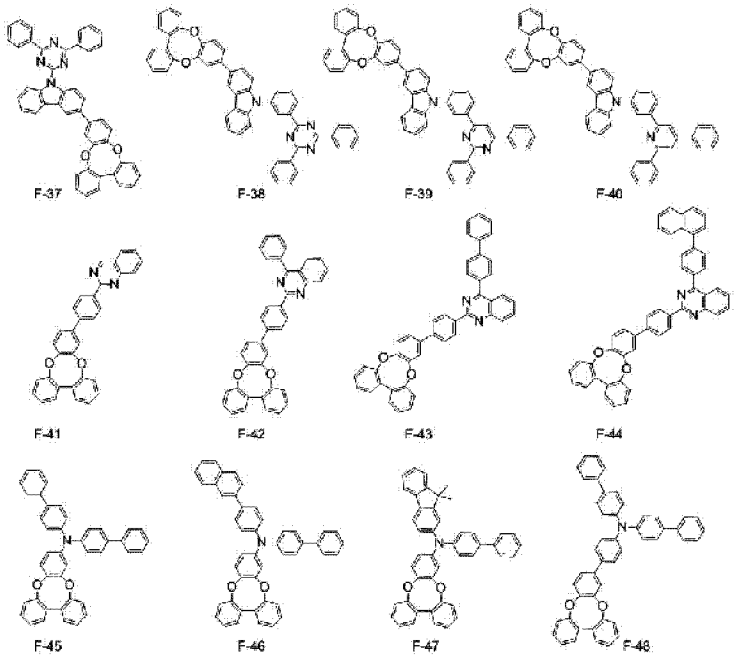
[362]


F-13
F-14
F-15
F-16
F-17
F-18
F-19
F-20
F-21
F-22
F-23
F-24

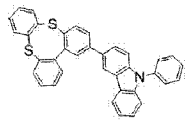
[363]

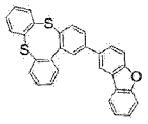

F-25
F-26
F-27
F-28
F-29
F-30
F-31
F-32
F-33
F-34
F-35
F-36

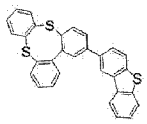
[364]

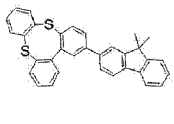

F-37
F-38
F-39
F-40
F-41
F-42
F-43
F-44
F-45
F-46
F-47
F-48

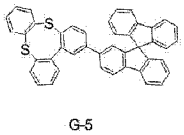
[365]

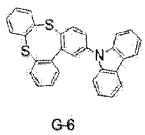

G-1

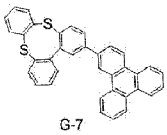

G-2

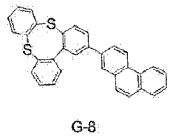

G-3

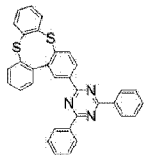

G-4

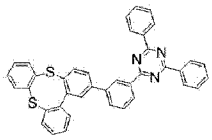

G-5

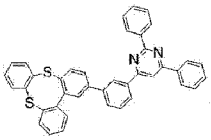

G-6

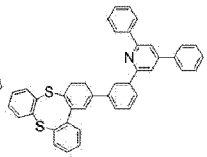

G-7


G-8

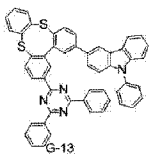

G-9

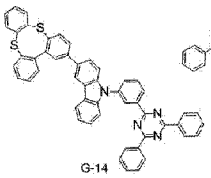

G-10

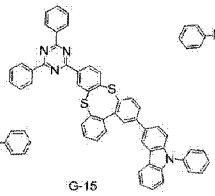

G-11

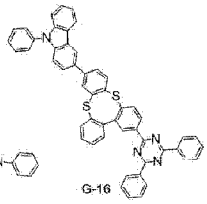

G-12

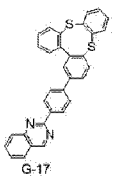
[366]

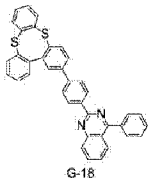

G-13

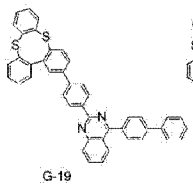

G-14

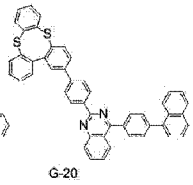

G-15

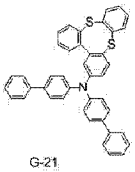

G-16

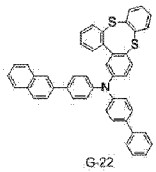

G-17

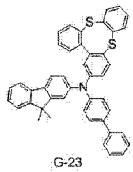

G-18

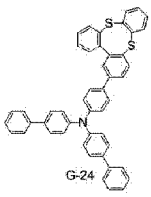

G-19


G-20

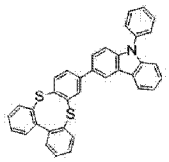

G-21

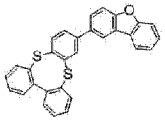

G-22

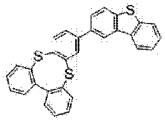

G-23

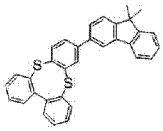

G-24

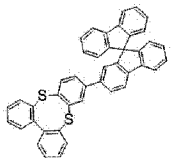
[367]

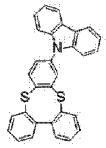

G-25

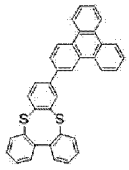

G-26

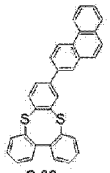

G-27

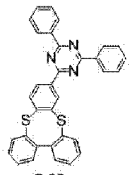

G-28

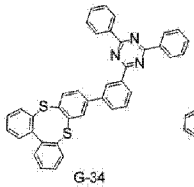

G-29

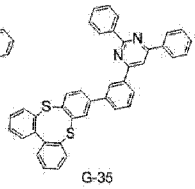

G-30

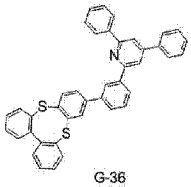

G-31


G-32

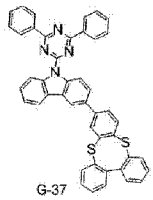

G-33

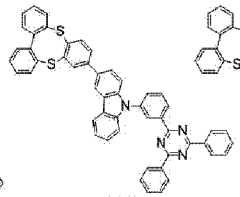

G-34

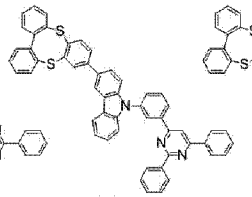

G-35

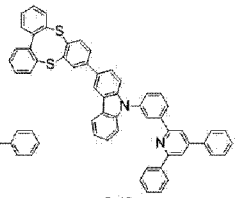

G-36

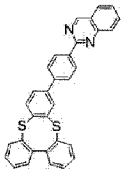
[368]

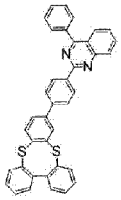

G-37

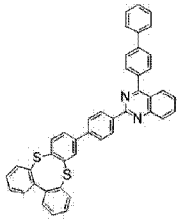

G-38

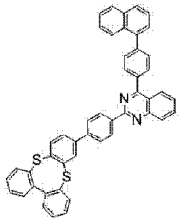

G-39

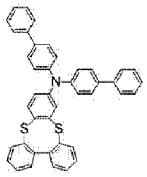

G-40

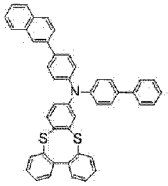

G-41

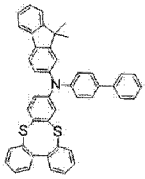

G-42

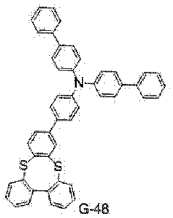

G-43


G-44

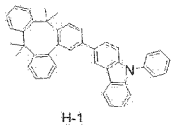

G-45

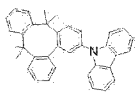

G-46

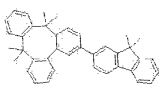

G-47

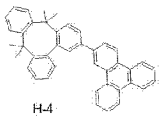

G-48

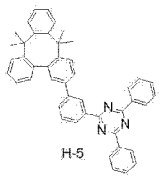
[369]

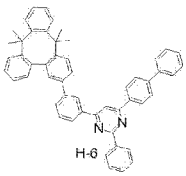

H-1

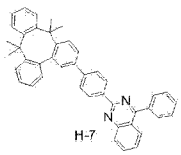

H-2

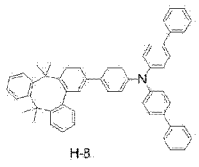

H-3


H-4

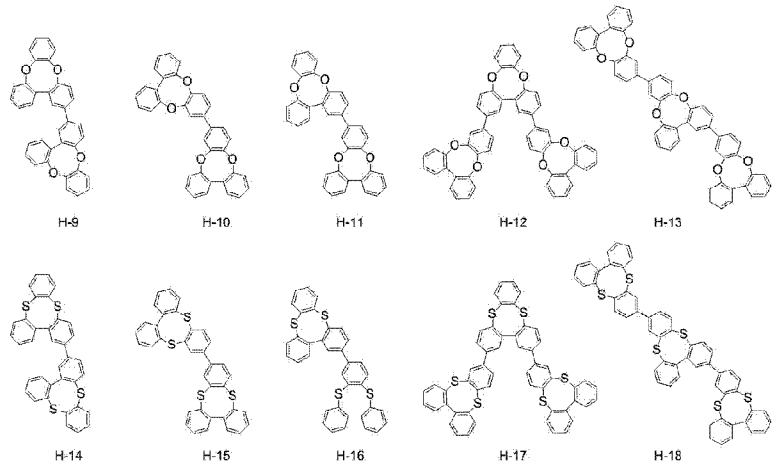

H-5


H-6


H-7


H-8

[370]



[371] 본 발명에서 상기 화학식 1 또는 화학식 9로 표시되는 화합물은 일반적인 합성방법에 따라 합성될 수 있다. 본 발명의 화합물에 대한 상세한 합성 과정은 후술하는 합성예에서 구체적으로 기술하도록 한다.

[372]

[373] 2. 유기 전계 발광 소자

[374] 한편, 본 발명의 다른 측면은 상기한 본 발명에 따른 화학식 1 또는 화학식 9로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자(유기 EL 소자)에 관한 것이다.

[375] 보다 구체적으로, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 (i) 양극(anode), (ii) 음극(cathode) 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 이때, 상기 화합물은 단독으로 사용되거나, 또는 2 이상이 혼합되어 사용될 수 있다.

[376] 본 발명의 일 구현 예에 따르면, 상기 1층 이상의 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 어느 하나 이상일 수 있고, 이 중에서 적어도 하나의 유기물층은 상기 화학식 1 또는 화학식 9로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 구체적으로 상기 화학식 1 또는 화학식 9의 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층, 전자 수송층 또는 정공 수송층인 것이 바람직하다.

[377] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 발광층은 호스트 재료를 포함할 수 있는데, 이때 호스트 재료로서 상기 화학식 1 또는 화학식 9의 화합물을 포함할 수 있다. 또한 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 발광층은 상기 화학식 1 또는 화학식 9의 화합물 이외의 화합물을 호스트로 포함할 수 있다.

[378] 이러한 본 발명의 유기 EL 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으나, 기판, 양극, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 발광층, 전자 수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조일 수 있다. 이때, 상기 전자 수송층 위에는 전자 주입층이 추가로 적층될 수 있으며, 상기한 바와 같이 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 하나 이상은 상기 화학식 1

또는 화학식 9로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[379] 또한, 상기 유기 전계 발광 소자는 발광층과 전자 수송층 사이에 수명 개선층 또는 전자 수송 보조층이 포함될 수 있다. 이때 상기 화학식 1 또는 화학식 9로 표시되는 화합물은 수명 개선층 또는 전자 수송 보조층으로도 이용될 수 있다.

[380] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입된 구조일 수 있다.

[381] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1 또는 화학식 9로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는, 당업계에 공지된 재료 및 방법으로 유기물층 및 전극을 형성하여 제조할 수 있다.

[382] 상기 유기물층은 진공 증착법이나 용액 도포법에 의하여 형성될 수 있다. 상기 용액 도포법의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열전사법 등이 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[383] 본 발명의 유기 전계 발광 소자 제조 시 사용되는 기판은 특별히 한정되지 않으나, 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름 및 시트 등을 사용할 수 있다.

[384] 또, 양극 물질로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐 주석 산화물(ITO), 인듐 아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO_2:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리티오펜, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 또는 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자; 및 카본블랙 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[385] 또, 음극 물질로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 또는 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; 및 LiF/Al 또는 LiO_2/Al과 같은 다층 구조 물질 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[386] 또한, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송층은 특별히 한정되는 것은 아니며, 당 업계에 알려진 통상의 물질을 사용할 수 있다.

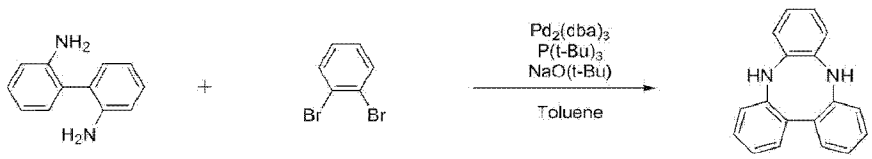
[387]

[388] 이하 본 발명을 실시예를 통하여 상세히 설명하면 다음과 같다. 단, 하기 실시예는 본 발명을 예시하는 것일 뿐, 본 발명이 하기 실시예에 의해 한정되는 것은 아니다.

[389]

[390] [준비예 1] 5,10-디하이드로트리벤조[b,e,g][1,4]디아조신의 합성

[391]



[392] 질소 기류 하에서 50 g (271.39 mmol)의 [1,1'-비페닐]-2,2'-디아민, 64.02 g (271.39 mmol)의 1,2-디브로모벤젠, 14.91 g (16.28 mmol)의 $Pd_2(dba)_3$, 21.97 g

(108.55 mmol)의 $P(t\text{-}bu)_3$, 78.24 g (814.16 mmol)의 NaO(t-bu) 및 톨루엔 1000 ml를 혼합하고 110℃에서 5시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 21.73 g (yield: 31 %)을 획득하였다.

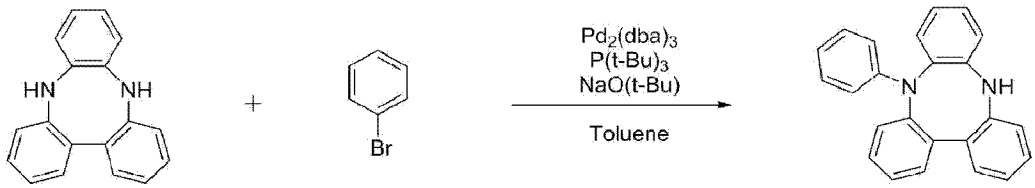
[393] GC-Mass (이론치: 258.32 g/mol, 측정치: 258 g/mol)

[394] ^{1}H-NMR: δ 6.65 (m, 2H), 6.76 (s, 2H), 6.92 (m, 2H), 7.14 (d, 2H), 7.19 (t, 2H), 7.23 (d, 2H), 7.31 (t, 2H)

[395]

[396] [준비예 2] 중간체-2의 합성

[397]



[398] 질소 기류 하에서 10 g (38.71 mmol)의 5,10-디하이드로트리벤조[b,e,g][1,4]디아조신, 6.08 g (38.71 mmol)의 브로모벤젠, 1.06 g (1.16 mmol)의 $Pd_2(dba)_3$, 1.57 g (7.74 mmol)의 $P(t\text{-}bu)_3$, 7.44 g (77.42 mmol)의 NaO(t-bu) 및 톨루엔 100 ml를 혼합하고 110℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 11.00 g (yield: 85 %)을 획득하였다.

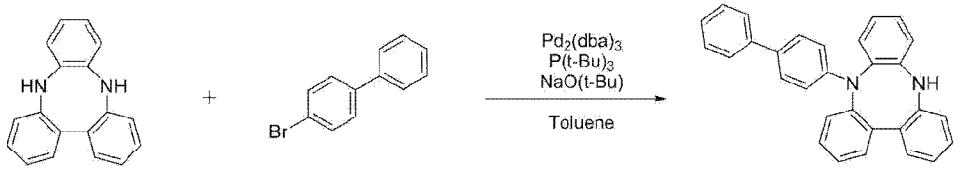
[399] GC-Mass (이론치: 334.42 g/mol, 측정치: 334 g/mol)

[400] ^{1}H-NMR: δ 6.65 (m, 2H), 6.76 (s, 1H), 6.92 (m, 2H), 7.14 (d, 2H), 7.20 (m, 7H), 7.28 (d, 2H), 7.31 (t, 2H)

[401]

[402] [준비예 3] 중간체-3의 합성

[403]



[404] 브로모벤젠 대신 4-브로모-1,1'-비페닐 (9.02 g, 38.71 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 2와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 12.87 g (yield: 81 %)을 획득하였다.

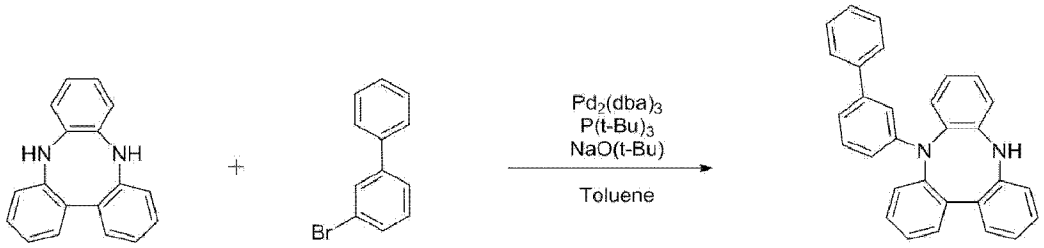
[405] GC-Mass (이론치: 410.52 g/mol, 측정치: 410 g/mol)

[406] ^{1}H-NMR: δ 6.65 (m, 2H), 6.76 (s, 1H), 6.92 (m, 2H), 7.14 (d, 2H), 7.30 (m, 6H), 7.23 (m, 7H), 7.31 (t, 2H)

[407]

[408] [준비예 4] 중간체-4의 합성

[409]



[410] 브로모벤젠 대신 3-브로모-1,1'-비페닐 (9.02 g, 38.71 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 2와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 12.55 g (yield: 79 %)을 획득하였다.

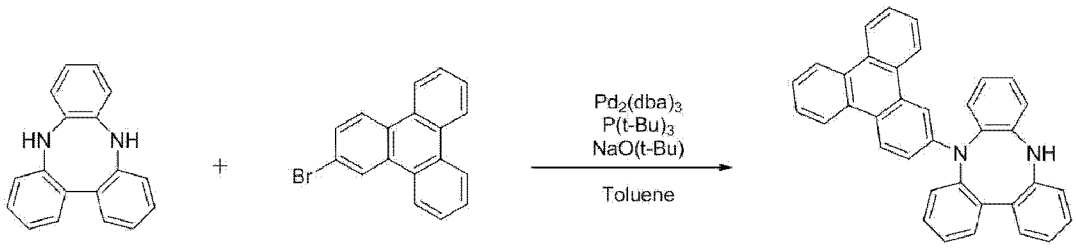
[411] GC-Mass (이론치: 410.52 g/mol, 측정치: 410 g/mol)

[412] ^{1}H-NMR: δ 6.65 (m, 2H), 6.76 (s, 1H), 6.92 (m, 2H), 7.14 (d, 2H), 7.30 (m, 6H), 7.23 (m, 7H), 7.31 (t, 2H)

[413]

[414] [준비예 5] 중간체-5의 합성

[415]



[416] 브로모벤젠 대신 2-브로모트리페닐렌 (11.89 g, 38.71 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 2와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 15.95 g (yield: 85 %)을 획득하였다.

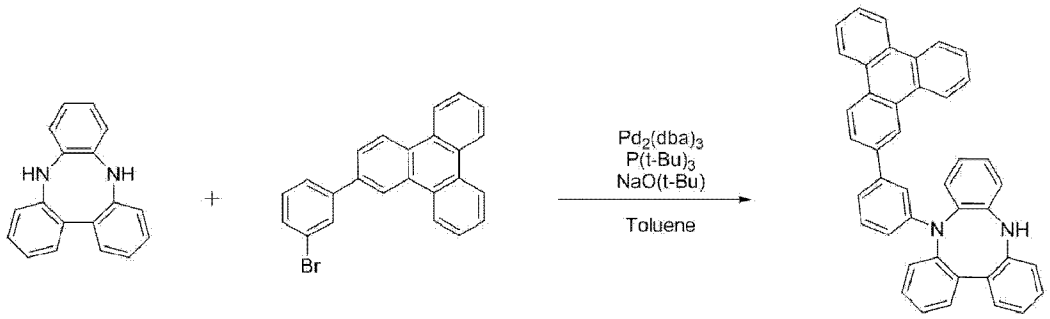
[417] GC-Mass (이론치: 484.60 g/mol, 측정치: 484 g/mol)

[418] ^{1}H-NMR : δ 6.95 (t, 2H), 7.14 (m, 5H), 7.26 (m, 4H), 7.64 (m, 7H), 8.07 (m, 3H), 8.33 (d, 1H), 8.40 (s, 1H), 8.60 (d, 1H)

[419]

[420] [준비예 6] 중간체-6의 합성

[421]



[422] 브로모벤젠 대신 2-(3-브로모페닐)트리페닐렌 (14.84 g, 38.71 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 2와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 17.36 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

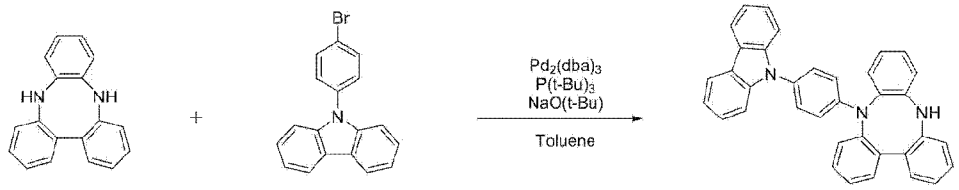
[423] GC-Mass (이론치: 560.70 g/mol, 측정치: 560 g/mol)

[424] ^{1}H-NMR : δ 6.95 (t, 2H), 7.14 (m, 5H), 7.26 (m, 8H), 7.64 (m, 7H), 8.07 (m, 3H), 8.33 (d, 1H), 8.40 (s, 1H), 8.60 (d, 1H)

[425]

[426] [준비예 7] 중간체-7의 합성

[427]



[428] 브로모벤젠 대신 9-(4-브로모페닐)-9H-카바졸 (12.47 g, 38.71 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 2와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 16.05 g (yield: 83 %)을 획득하였다.

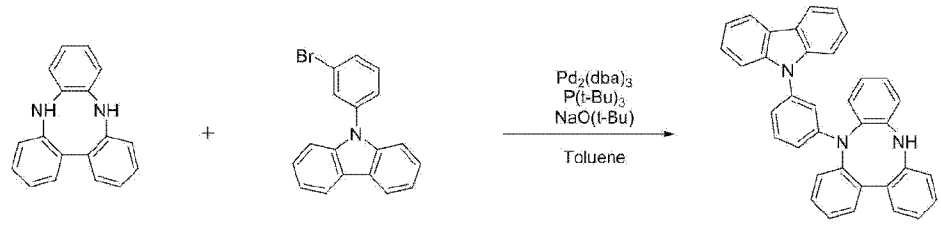
[429] GC-Mass (이론치: 499.62 g/mol, 측정치: 499 g/mol)

[430] ^{1}H-NMR: δ 6.65 (m, 2H), 6.76 (s, 1H), 6.92 (m, 7H), 7.14 (d, 4H), 7.20 (m, 7H), 7.28 (d, 2H), 7.31 (t, 2H)

[431]

[432] [준비예 8] 중간체-8의 합성

[433]



[434] 브로모벤젠 대신 9-(3-브로모페닐)-9H-카바졸 (12.47 g, 38.71 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 2와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 14.51 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

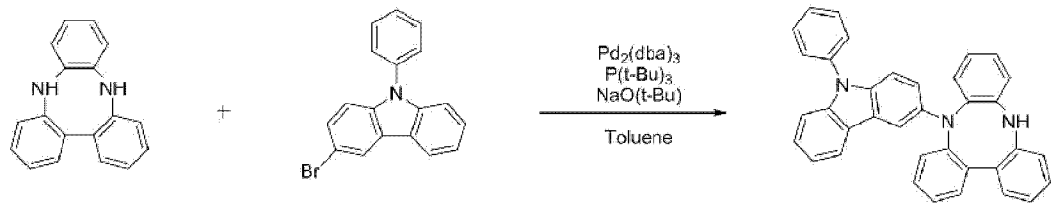
[435] GC-Mass (이론치: 499.62 g/mol, 측정치: 499 g/mol)

[436] ^{1}H-NMR: δ 6.65 (m, 2H), 6.76 (s, 1H), 6.92 (m, 7H), 7.14 (d, 4H), 7.20 (m, 7H), 7.28 (d, 2H), 7.31 (t, 2H)

[437]

[438] [준비예 9] 중간체-9의 합성

[439]



[440] 브로모벤젠 대신 3-브로모-9-페닐-9H-카바졸 (12.47 g, 38.71 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 2와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 14.12 g (yield: 73 %)을 획득하였다.

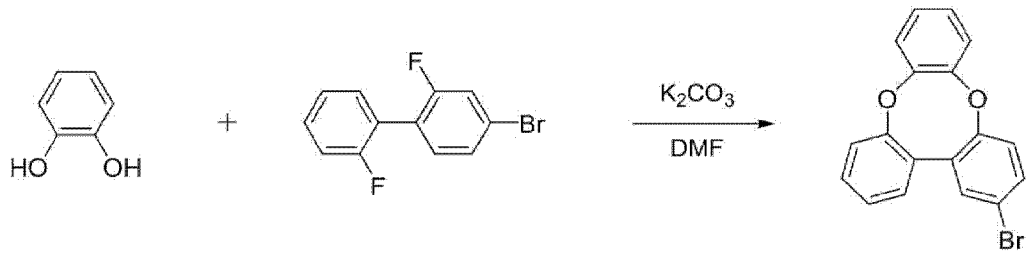
[441] GC-Mass (이론치: 499.62 g/mol, 측정치: 499 g/mol)

[442] ^{1}H-NMR: δ 6.65 (m, 2H), 6.76 (s, 1H), 6.92 (m, 4H), 7.14 (d, 4H), 7.20 (m, 10H), 7.28 (d, 2H), 7.31 (t, 2H)

[443]

[444] [준비예 10] 중간체-10의 합성

[445]



[446] 질소 기류 하에서 20 g (181.63 mmol)의 카테콜, 48.87 g (181.63 mmol)의 4-브로모-2,2'-디플루오로-1,1'-비페닐, 75.30 g (544.89 mmol)의 탄산칼륨 및 DMF 600 ml와 톨루엔 200 ml를 혼합하고 130℃에서 5시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 40 g (yield: 65 %)을 획득하였다.

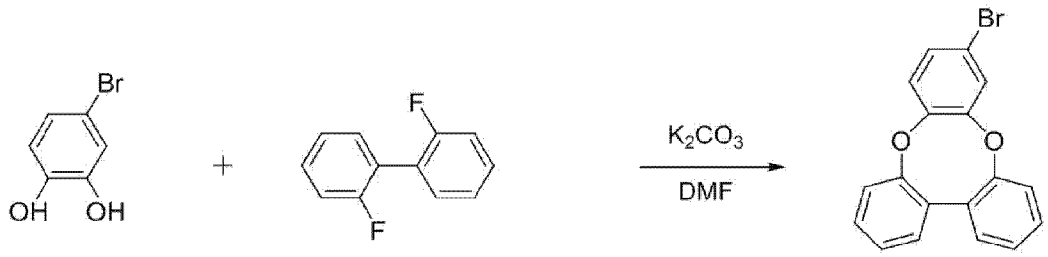
[447] GC-Mass (이론치: 339.19 g/mol, 측정치: 339 g/mol)

[448] ^{1}H-NMR: δ 6.65 (m, 2H), 6.76 (s, 2H), 6.92 (m, 2H), 7.14 (d, 2H), 7.19 (t, 2H), 7.23 (d, 2H), 7.31 (t, 2H)

[449]

[450] [준비예 11] 중간체-11의 합성

[451]



[452] 질소 기류 하에서 20 g (105.81 mmol)의 4-브로모카테콜, 20.12 g (105.81 mmol)의 2,2'-디플루오로-1,1'-비페닐, 43.87 g (317.43 mmol)의 탄산칼륨 및 DMF

600 ml와 톨루엔 200 ml를 혼합하고 130℃에서 5시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 21 g (yield: 60 %)을 획득하였다.

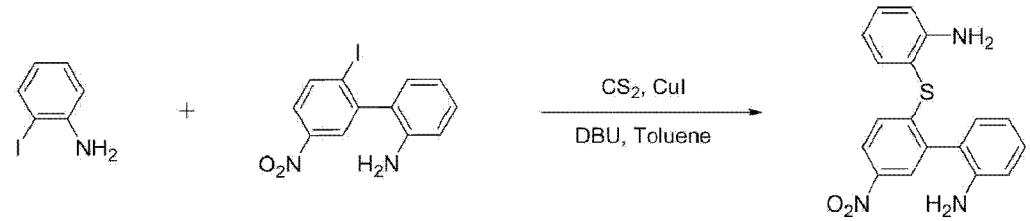
[453] GC-Mass (이론치: 339.19 g/mol, 측정치: 339 g/mol)

[454] ^{1}H-NMR: δ 6.65 (m, 2H), 6.76 (s, 2H), 6.92 (m, 2H), 7.14 (d, 2H), 7.19 (t, 2H), 7.23 (d, 2H), 7.31 (t, 2H)

[455]

[456] [준비예 12] 2'-((2-아미노페닐)티오)-5'-니트로-[1,1'-비페닐]-2-아민의 합성

[457]



[458] 질소 기류 하에서 10 g (45.65 mmol)의 2-요오드아닐린, 15.52 g (45.65 mmol)의 2'-요오드-5'-니트로-[1,1'-비페닐]-2-아민, 6.95 g (91.30 mmol)의 이황화탄소, 0.86 g (4.56 mmol)의 요오드화구리, 27.79 g (182.6 mmol)의 1,8-디아자비사이클로[5.4.0]운데크-7-엔 및 톨루엔 200 ml를 혼합하고 100℃에서 10시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 6.9 g (yield: 45 %)을 획득하였다.

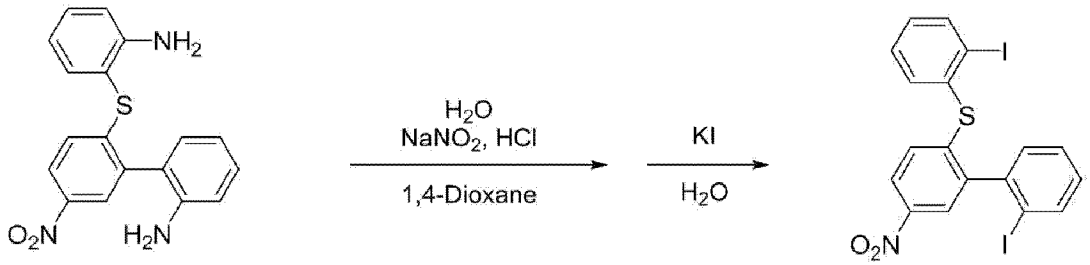
[459] GC-Mass (이론치: 337.40 g/mol, 측정치: 337 g/mol)

[460] ^{1}H-NMR: δ 6.65 (m, 2H), 6.76 (s, 2H), 6.92 (m, 2H), 7.14 (d, 2H), 7.19 (t, 2H), 7.23 (d, 2H), 7.31 (t, 2H)

[461]

[462] [준비예 13] (2'-요오드-5-니트로-[1,1'-비페닐]-2-일)(2-요오드페닐)설판의 합성

[463]



[464] 질소 기류 하에서 10 g (29.63 mmol)의 2'-((2-아미노페닐)티오)-5'-니트로-[1,1'-비페닐]-2-아민, 100ml의 1,4-디옥산, 12.5 ml의 35wt% 염산, 150 ml의 증류수를 넣고 3~5℃으로 냉각한 후 5.11 g (74.09 mmol)의 $NaNO_2$ 수용액(12.5 ml)을 넣고 30분 동안 교반하고 냉각기 제거 후 30분 동안 교반하였다. 19.67 g (118.52 mmol)의 KI 수용액(25 ml)을 넣고 80℃에서

30분 동안 교반하였다. 상온에서 4g의 Na_2CO_3 수용액을 넣어 반응을 종결한 후 생성된 고체를 여과하고 증류수로 염산을 제거 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 10.76 g (yield: 65 %)을 획득하였다.

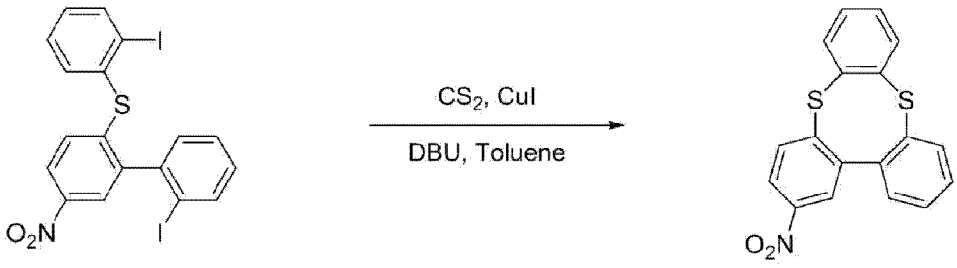
[465] GC-Mass (이론치: 559.16 g/mol, 측정치: 559 g/mol)

[466] ^{1}H-NMR: δ 6.65 (m, 2H), 6.76 (s, 2H), 6.92 (m, 2H), 7.14 (d, 2H), 7.19 (t, 2H), 7.23 (d, 2H), 7.31 (t, 2H)

[467]

[468] [준비예 14] 2-니트로벤조[b,e,g][1,4]디티오신의 합성

[469]



[470] 질소 기류 하에서 10 g (17.88 mmol)의 (2'-요오드-5-니트로-[1,1'-비페닐]-2-일)(2-요오드페닐)설판, 2.72 g (35.76 mmol)의 이황화탄소, 0.34 g (1.78 mmol)의 요오드화구리, 10.89 g (71.53 mmol)의 1,8-디아자비사이클로[5.4.0]운데크-7-엔 및 톨루엔 100 ml를 혼합하고 100℃에서 10시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 3.9 g (yield: 65 %)을 획득하였다.

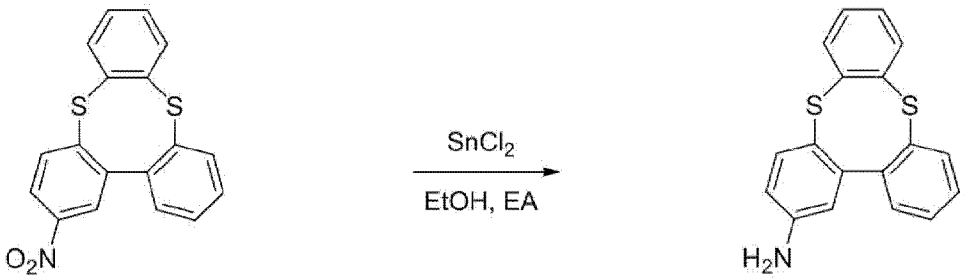
[471] GC-Mass (이론치: 337.41 g/mol, 측정치: 337 g/mol)

[472] ^{1}H-NMR: δ 6.65 (m, 2H), 6.76 (s, 2H), 6.92 (m, 2H), 7.14 (d, 2H), 7.19 (t, 2H), 7.23 (d, 2H), 7.31 (t, 2H)

[473]

[474] [준비예 15] 트리벤조[b,e,g][1,4]디티오신-2-아민의 합성

[475]



[476] 질소 기류 하에서 10 g (29.63 mmol)의 2-니트로벤조[b,e,g][1,4]디티오신, 23.39 g (103.70 mmol)의 염화주석(II) 수화물, 에틸 아세테이트 (120 ml) 및 에탄올 (60 ml)을 혼합하고 80℃에서 12시간 동안 교반하였다. 탄산수소나트륨 수용액으로 pH 7-8수준으로 중화시킨 후 고체를 여과하여 제거하고 다이클로로메탄으로 씻어준다. 여과액을 농축하고 소금물로 교반한 후 다이클로로메탄으로

추출하고 $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 여과된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 7.2 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

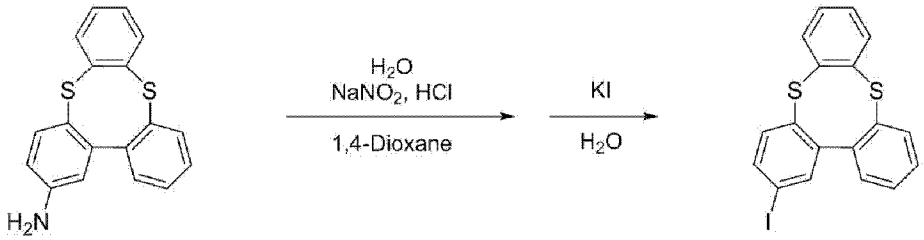
[477] GC-Mass (이론치: 307.43 g/mol, 측정치: 307 g/mol)

[478] ^{1}H-NMR: δ 6.65 (m, 2H), 6.76 (s, 2H), 6.92 (m, 2H), 7.14 (d, 2H), 7.19 (t, 2H), 7.23 (d, 2H), 7.31 (t, 2H)

[479]

[480] [준비예 16] 중간체 12의 합성

[481]



[482] 질소 기류 하에서 10 g (32.52 mmol)의 트리벤조[b,e,g][1,4]디티오신-2-아민, 100ml의 1,4-디옥산, 12.5 ml의 35wt% 염산, 150 ml의 증류수를 넣고 3~5℃ 으로 냉각한 후 2.69 g (39.02 mmol)의 $NaNO_2$ 수용액(12.5 ml)을 넣고 30분 동안 교반하고 냉각기 제거 후 30분동안 교반하였다. 10.79 g (65.04 mmol)의 KI 수용액(25 ml)을 넣고 80℃에서 30분 동안 교반하였다. 상온에서 4g의 Na_2CO_3 수용액을 넣어 반응을 종결한 후 생성된 고체를 여과하고 증류수로 염산을 제거 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 10.20 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

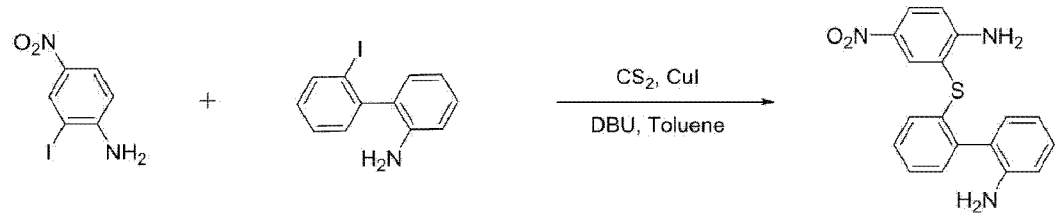
[483] GC-Mass (이론치: 418.31 g/mol, 측정치: 418 g/mol)

[484] ^{1}H-NMR: δ 6.65 (m, 2H), 6.76 (s, 2H), 6.92 (m, 2H), 7.14 (d, 2H), 7.19 (t, 2H), 7.23 (d, 2H), 7.31 (t, 2H)

[485]

[486] [준비예 17] 2'-((2-아미노-5-니트로페닐)티오)-[1,1'-비페닐]-2-아민의 합성

[487]



[488] 질소 기류 하에서 10 g (37.87 mmol)의 2-요오드-4-니트로아닐린, 11.17 g (37.87 mmol)의 2'-요오드-[1,1'-비페닐]-2-아민, 5.76 g (75.75 mmol)의 이황화탄소, 0.72 g (3.78 mmol)의 요오드화구리, 23.06 g (151.5 mmol)의 1,8-디아자비사이클로[5.4.0]운데크-7-엔 및 톨루엔 200 ml를 혼합하고 100℃에서 10시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 8.3 g (yield: 65 %)을 획득하였다.

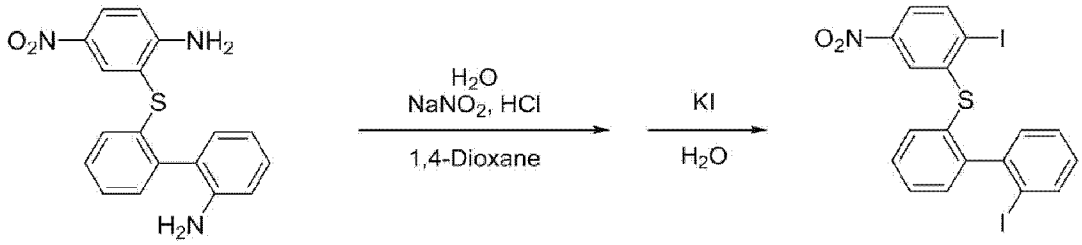
[489] GC-Mass (이론치: 337.40 g/mol, 측정치: 337 g/mol)

[490] ^{1}H-NMR: δ 6.65 (m, 2H), 6.76 (s, 2H), 6.92 (m, 2H), 7.14 (d, 2H), 7.19 (t, 2H), 7.23 (d, 2H), 7.31 (t, 2H)

[491]

[492] [준비예 18] (2-요오드-5-니트로페닐)(2'-요오드-[1,1'-비페닐]-2-일)설판의 합성

[493]



[494] 질소 기류 하에서 10 g (29.63 mmol)의 2'-((2-아미노-5-니틀로페닐)티오)-[1,1'-비페닐]-2-아민, 100ml의 1,4-디옥산, 12.5 ml의 35wt% 염산, 150 ml의 증류수를 넣고 3~5℃으로 냉각한 후 5.11 g (74.09 mmol)의 $NaNO_2$ 수용액(12.5 ml)을 넣고 30분 동안 교반하고 냉각기 제거 후 30분동안 교반하였다. 19.67 g (118.52 mmol)의 KI 수용액(25 ml)을 넣고 80℃에서 30분 동안 교반하였다. 상온에서 4g의 Na_2CO_3 수용액을 넣어 반응을 종결한 후 생성된 고체를 여과하고 증류수로 염산을 제거 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 10.76 g (yield: 65 %)을 획득하였다.

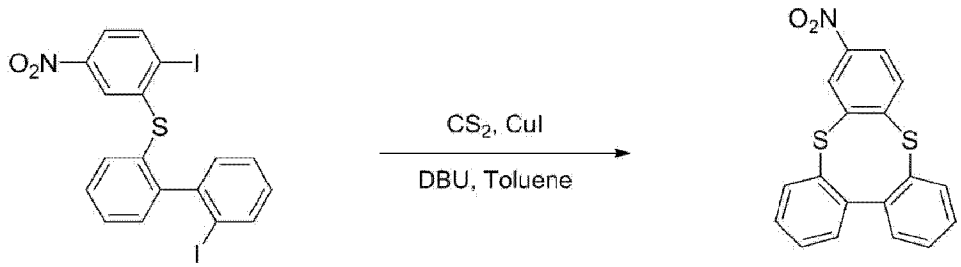
[495] GC-Mass (이론치: 559.16 g/mol, 측정치: 559 g/mol)

[496] ^{1}H-NMR: δ 6.65 (m, 2H), 6.76 (s, 2H), 6.92 (m, 2H), 7.14 (d, 2H), 7.19 (t, 2H), 7.23 (d, 2H), 7.31 (t, 2H)

[497]

[498] [준비예 19] 7-니트로벤조[b,e,g][1,4]디티오신의 합성

[499]



[500] 질소 기류 하에서 10 g (17.88 mmol)의 (2-요오드-5-니트로페닐)(2'-요오드-[1,1'-비페닐]-2-일)설판, 2.72 g (35.76 mmol)의 이황화탄소, 0.34 g (1.78 mmol)의 요오드화구리, 10.89 g (71.53 mmol)의 1,8-디아자비사이클로[5.4.0]운데크-7-엔 및 톨루엔 100 ml를 혼합하고 100℃에서 10시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 3.9 g (yield: 65 %)을 획득하였다.

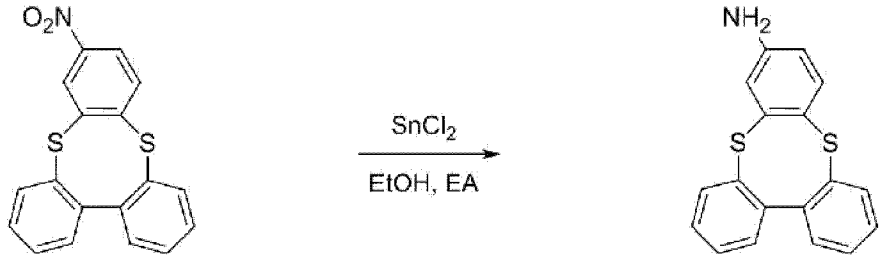
[501] GC-Mass (이론치: 337.41 g/mol, 측정치: 337 g/mol)

[502] ^{1}H-NMR: δ 6.65 (m, 2H), 6.76 (s, 2H), 6.92 (m, 2H), 7.14 (d, 2H), 7.19 (t, 2H), 7.23 (d, 2H), 7.31 (t, 2H)

[503]

[504] [준비예 20] 트리벤조[b,e,g][1,4]디티오신-7-아민의 합성

[505]



[506] 질소 기류 하에서 10 g (29.63 mmol)의 7-니트로벤조[b,e,g][1,4]디티오신, 23.39 g (103.70 mmol)의 염화주석(II) 수화물, 에틸 아세테이트 (120 ml) 및 에탄올 (60 ml)을 혼합하고 80℃ 에서 12시간 동안 교반하였다. 탄화수소나트륨 수용액으로 pH 7-8수준으로 중화시킨 후 고체를 여과하여 제거하고 다이클로로메탄으로 씻어준다. 여과액을 농축하고 소금물로 교반한 후 다이클로로메탄으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 여과하였다. 여과된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 7.2 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

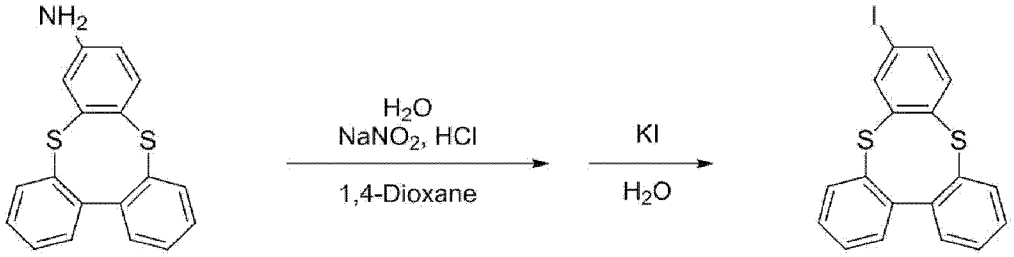
[507] GC-Mass (이론치: 307.43 g/mol, 측정치: 307 g/mol)

[508] ^{1}H-NMR: δ 6.65 (m, 2H), 6.76 (s, 2H), 6.92 (m, 2H), 7.14 (d, 2H), 7.19 (t, 2H), 7.23 (d, 2H), 7.31 (t, 2H)

[509]

[510] [준비예 21] 중간체 13의 합성

[511]



[512] 질소 기류 하에서 10 g (32.52 mmol)의 트리벤조[b,e,g][1,4]디티오신-7-아민, 100ml의 1,4-디옥산, 12.5 ml의 35wt% 염산, 150 ml의 증류수를 넣고 3~5℃으로 냉각한 후 2.69 g (39.02 mmol)의 $NaNO_2$ 수용액(12.5 ml)을 넣고 30분 동안 교반하고 냉각기 제거 후 30분동안 교반하였다. 10.79 g (65.04 mmol)의 KI 수용액(25 ml)을 넣고 80℃ 에서 30분 동안 교반하였다. 상온에서 4g의 Na_2CO_3 수용액을 넣어 반응을 종결한 후 생성된 고체를 여과하고 증류수로 염산을 제거 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 10.20 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

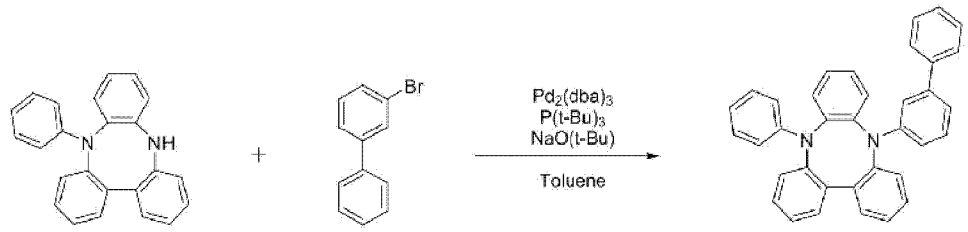
[513] GC-Mass (이론치: 418.31 g/mol, 측정치: 418 g/mol)

[514] ^{1}H-NMR: δ 6.65 (m, 2H), 6.76 (s, 2H), 6.92 (m, 2H), 7.14 (d, 2H), 7.19 (t, 2H), 7.23 (d, 2H), 7.31 (t, 2H)

[515]

[516] [합성예 1] A-4의 합성

[517]



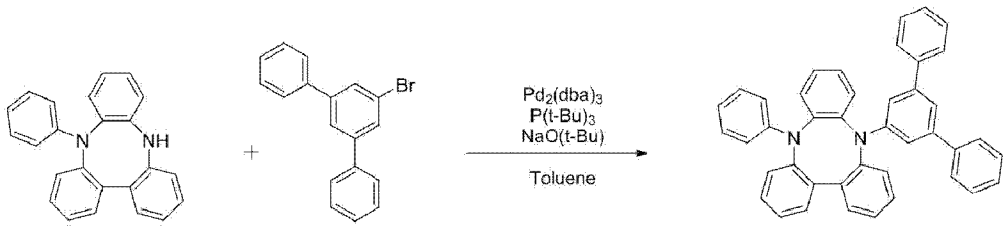
[518] 질소 기류 하에서 중간체-2 (5.0 g, 14.95 mmol), 3-브로모-1,1'-비페닐 (3.49 g, 14.95 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.41 g, 0.41 mmol), $P(t\text{-}bu)_3$ (0.61 g, 2.99 mmol), NaO(t-bu) (2.87 g, 29.90 mmol) 및 톨루엔 100 ml를 혼합하고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄 으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 6.18 g (yield: 85 %)을 획득하였다.

[519] GC-Mass (이론치: 486.62 g/mol, 측정치: 486 g/mol)

[520]

[521] [합성예 2] A-7의 합성

[522]



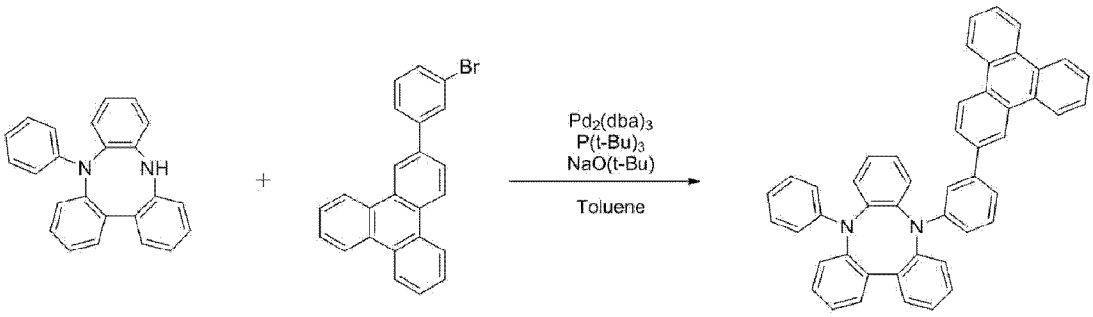
[523] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 5'-브로모-1,1':3',1''-터페닐 (4.62 g, 14.95 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 6.81 g (yield: 81 %)을 획득하였다.

[524] GC-Mass (이론치: 562.72 g/mol, 측정치: 562 g/mol)

[525]

[526] [합성예 3] A-49의 합성

[527]



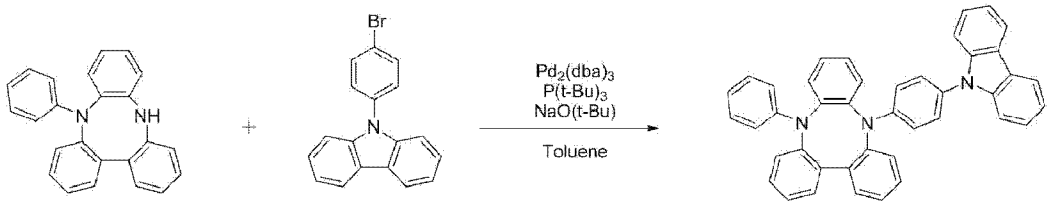
[528] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 2-(3-브로모페닐)트리페닐렌 (5.73 g, 14.95 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 7.05 g (yield: 74 %)을 획득하였다.

[529] GC-Mass (이론치: 636.80 g/mol, 측정치: 636 g/mol)

[530]

[531] [합성예 4] A-54의 합성

[532]



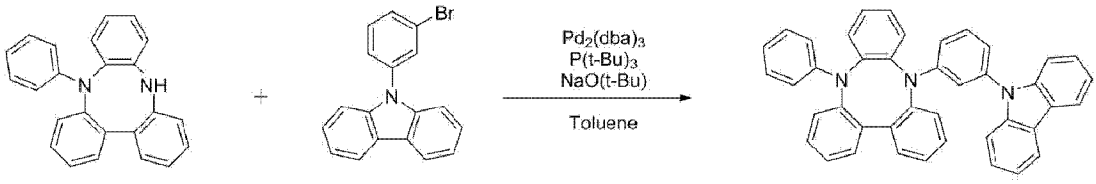
[533] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 9-(4-브로모페닐)-9H-카바졸 (4.82 g, 14.95 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 6.71 g (yield: 78 %)을 획득하였다.

[534] GC-Mass (이론치: 575.72 g/mol, 측정치: 575 g/mol)

[535]

[536] [합성예 5] A-65의 합성

[537]



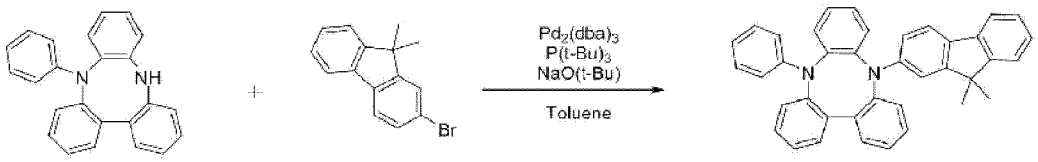
[538] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 9-(3-브로모페닐)-9H-카바졸 (4.82 g, 14.95 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 7.23 g (yield: 84 %)을 획득하였다.

[539] GC-Mass (이론치: 575.72 g/mol, 측정치: 575 g/mol)

[540]

[541] [합성예 6] A-84의 합성

[542]



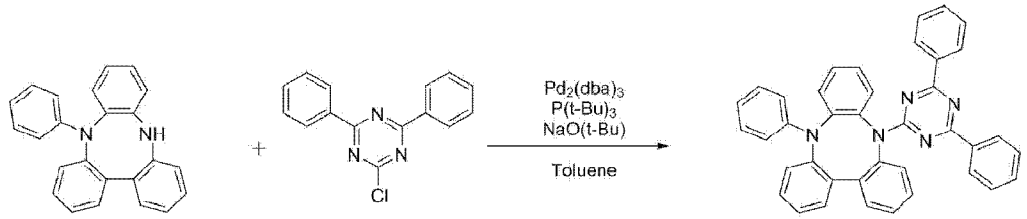
[543] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌 (4.08 g, 14.95 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 6.85 g (yield: 87 %)을 획득하였다.

[544] GC-Mass (이론치: 528.68 g/mol, 측정치: 528 g/mol)

[545]

[546] [합성예 7] B-5의 합성

[547]



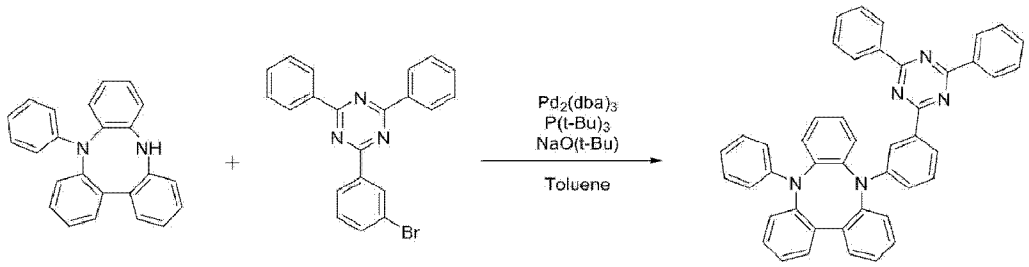
[548] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (4.14 g, 14.95 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 6.85 g (yield: 81 %)을 획득하였다.

[549] GC-Mass (이론치: 565.68 g/mol, 측정치: 565 g/mol)

[550]

[551] [합성예 8] B-15의 합성

[552]



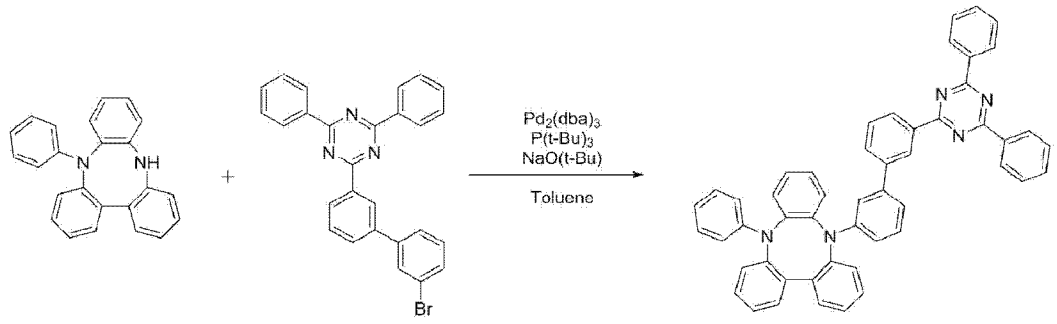
[553] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (5.81 g, 14.95 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 8.16 g (yield: 85 %)을 획득하였다.

[554] GC-Mass (이론치: 641.78 g/mol, 측정치: 641 g/mol)

[555]

[556] [합성예 9] B-20의 합성

[557]



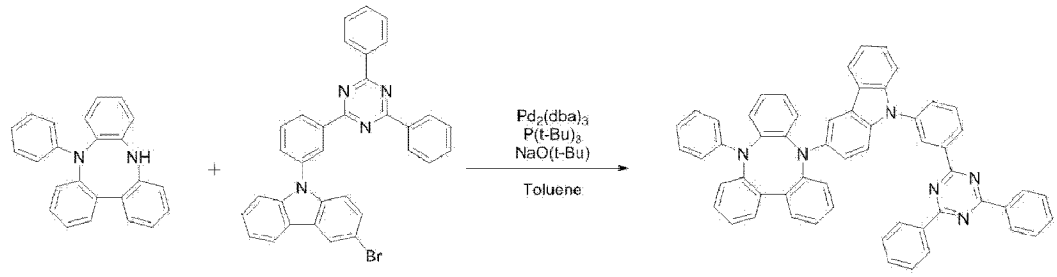
[558] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 2-(3'-브로모-[1,1'-비페닐]-3-일)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (6.94 g, 14.95 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 8.05 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

[559] GC-Mass (이론치: 717.88 g/mol, 측정치: 717 g/mol)

[560]

[561] [합성예 10] C-109의 합성

[562]



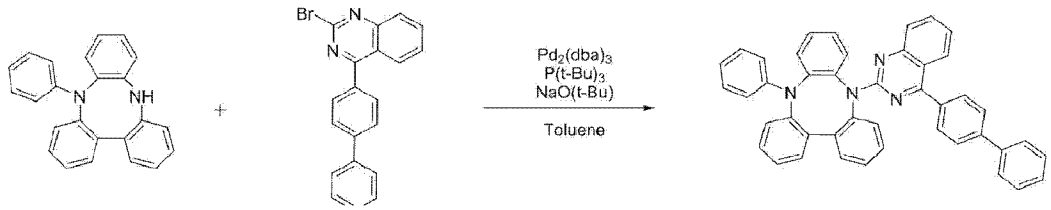
[563] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 3-브로모-9-(3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)-9H-카바졸 (8.27 g, 14.95 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 8.57 g (yield: 71 %)을 획득하였다.

[564] GC-Mass (이론치: 806.97 g/mol, 측정치: 806 g/mol)

[565]

[566] [합성예 11] E-3의 합성

[567]



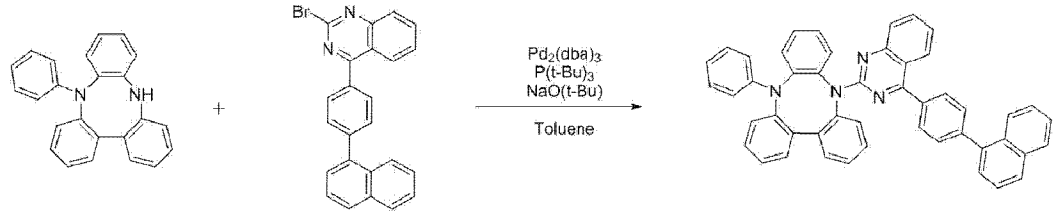
[568] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 4-([1,1'-비페닐]-4-일)-2-브로모퀴나졸린 (5.40 g, 14.95 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 6.34 g (yield: 69 %)을 획득하였다.

[569] GC-Mass (이론치: 614.75 g/mol, 측정치: 614 g/mol)

[570]

[571] [합성예 12] E-4의 합성

[572]



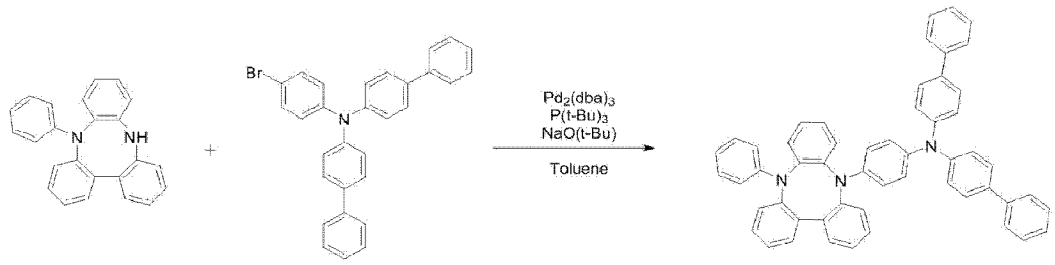
[573] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 2-브로모-4-(4-(나프탈렌-1-일)페닐)퀴나졸린 (4.14 g, 6.15 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 7.45 g (yield: 81 %)을 획득하였다.

[574] GC-Mass (이론치: 664.81 g/mol, 측정치: 664 g/mol)

[575]

[576] [합성예 13] E-53의 합성

[577]



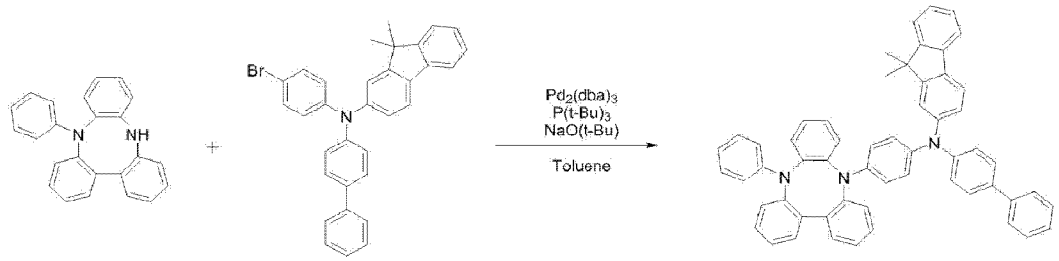
[578] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 N-([1,1'-비페닐]-4-일)-N-(4-브로모페닐)-[1,1'-비페닐]-4-아민 (7.12 g, 14.95 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 7.75 g (yield: 71 %)을 획득하였다.

[579] GC-Mass (이론치: 729.93 g/mol, 측정치: 729 g/mol)

[580]

[581] [합성예 14] E-54의 합성

[582]



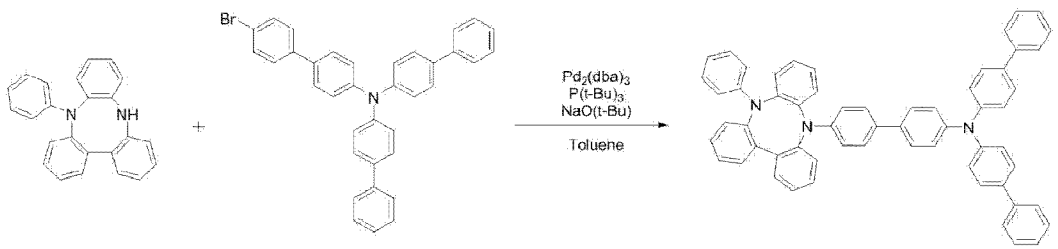
[583] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 N-([1,1'-비페닐]-4-일)-N-(4-브로모페닐)-9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-아민 (7.72 g, 14.95 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 9.67 g (yield: 84 %)을 획득하였다.

[584] GC-Mass (이론치: 769.99 g/mol, 측정치: 769 g/mol)

[585]

[586] [합성예 15] E-57의 합성

[587]



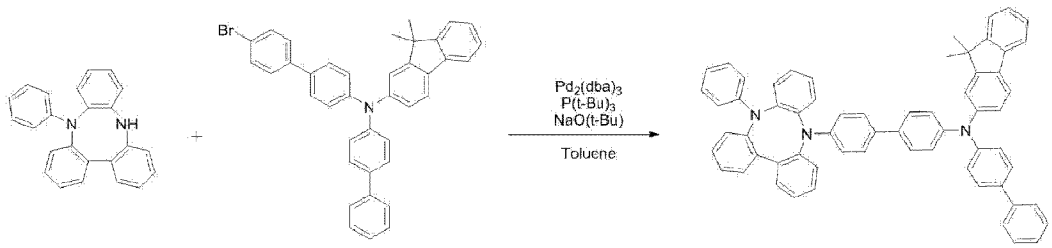
[588] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 N,N-디([1,1'-비페닐]-4-일)-4'-브로모-[1,1'-비페닐]-4-아민 (8.26 g, 14.95 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 9.76 g (yield: 81 %)을 획득하였다.

[589] GC-Mass (이론치: 806.03 g/mol, 측정치: 806 g/mol)

[590]

[591] [합성예 16] E-58의 합성

[592]



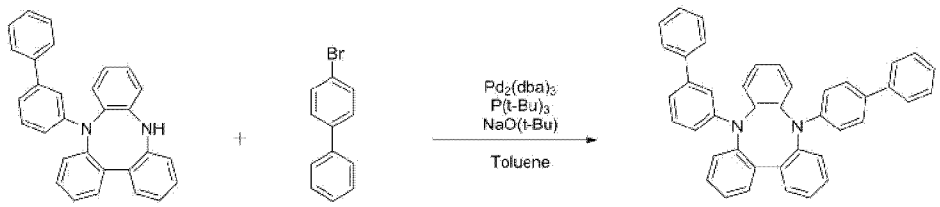
[593] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 N-([1,1'-비페닐]-4-일)-N-(4'-브로모-[1,1'-비페닐]-4-일)-9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-아민 (8.86 g, 14.95 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 8.22 g (yield: 65 %)을 획득하였다.

[594] GC-Mass (이론치: 846.09 g/mol, 측정치: 846 g/mol)

[595]

[596] [합성예 17] A-6의 합성

[597]



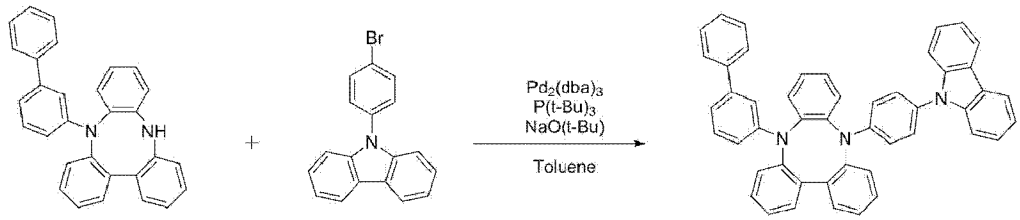
[598] 질소 기류 하에서 중간체-4 (5.0 g, 12.18 mmol), 4-브로모-1,1'-비페닐 (2.84 g, 12.18 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.33 g, 0.37 mmol), $P(t\text{-}bu)_3$ (0.49 g, 2.44 mmol), NaO(t-bu) (2.34 g, 24.36 mmol) 및 톨루엔 100 ml를 혼합하고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄 으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 4.59 g (yield: 67 %)을 획득하였다.

[599] GC-Mass (이론치: 562.72 g/mol, 측정치: 562 g/mol)

[600]

[601] [합성예 18] A-56의 합성

[602]



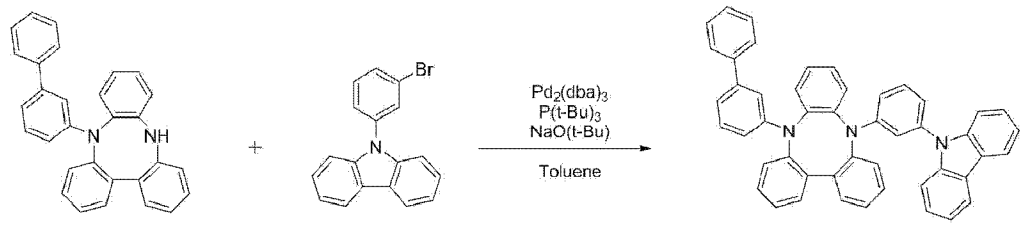
[603] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 9-(4-브로모페닐)-9H-카바졸 (3.92 g, 12.18 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 17과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.24 g (yield: 66 %)을 획득하였다.

[604] GC-Mass (이론치: 651.81 g/mol, 측정치: 651 g/mol)

[605]

[606] [합성예 19] A-67의 합성

[607]



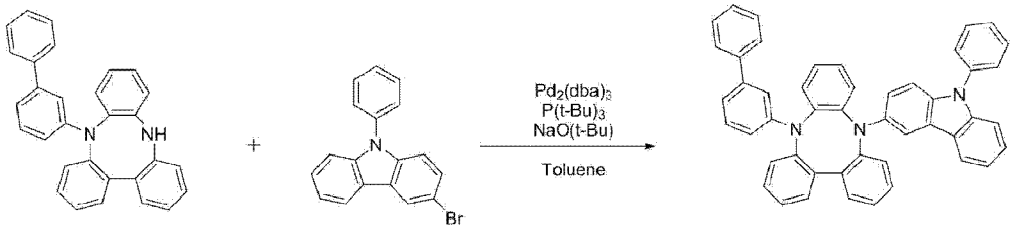
[608] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 9-(3-브로모페닐)-9H-카바졸 (3.92 g, 12.18 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 17과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.40 g (yield: 68 %)을 획득하였다.

[609] GC-Mass (이론치: 651.81 g/mol, 측정치: 651 g/mol)

[610]

[611] [합성예 20] A-77의 합성

[612]



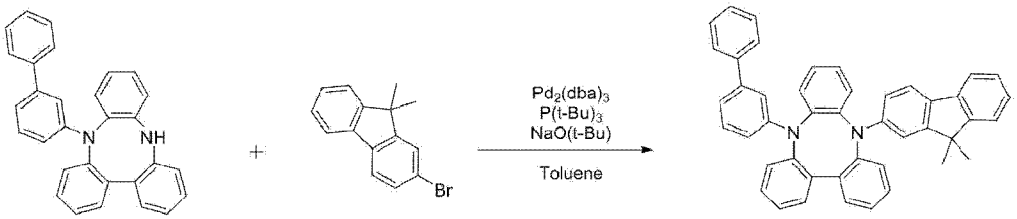
[613] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 3-브로모-9-페닐-9H-카바졸 (3.92 g, 12.18 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 17과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.95 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

[614] GC-Mass (이론치: 651.81 g/mol, 측정치: 651 g/mol)

[615]

[616] [합성예 21] A-95의 합성

[617]



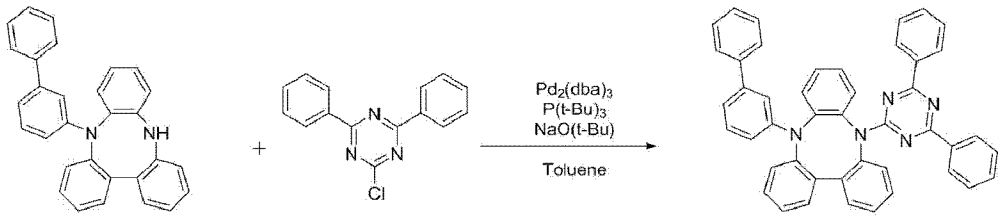
[618] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌 (3.33 g, 12.18 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 17과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.65 g (yield: 77 %)을 획득하였다.

[619] GC-Mass (이론치: 602.78 g/mol, 측정치: 602 g/mol)

[620]

[621] [합성예 22] B-85의 합성

[622]



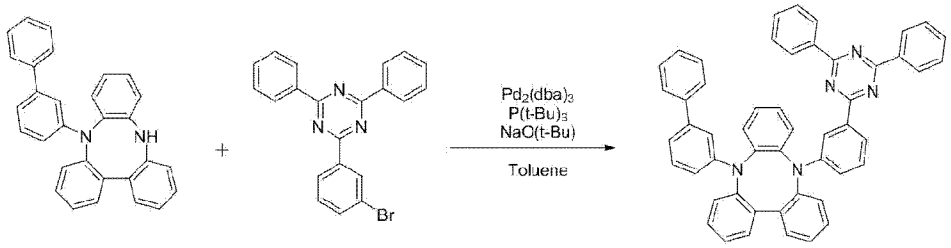
[623] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.26 g, 12.18 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 17과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 8.22 g (yield: 65 %)을 획득하였다.

[624] GC-Mass (이론치: 846.09 g/mol, 측정치: 846 g/mol)

[625]

[626] [합성예 23] B-95의 합성

[627]



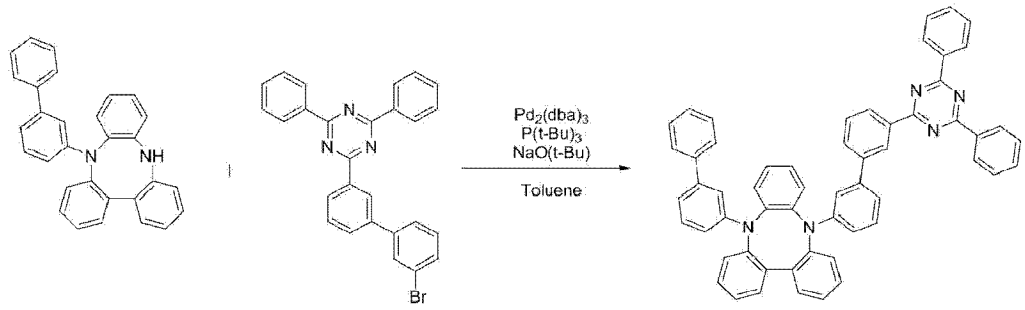
[628] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (4.73 g, 12.18 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 17과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 6.99 g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[629] GC-Mass (이론치: 717.88 g/mol, 측정치: 717 g/mol)

[630]

[631] [합성예 24] B-101의 합성

[632]



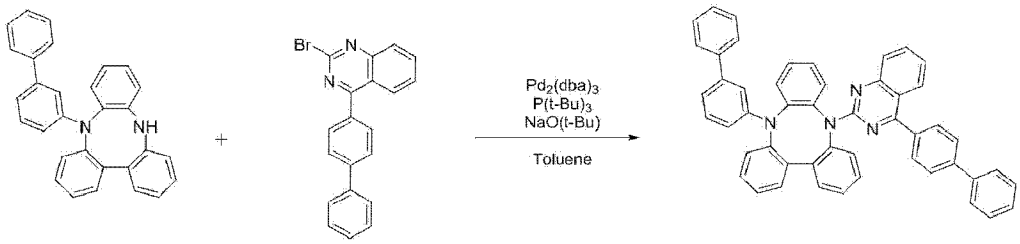
[633] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 2-(3'-브로모-[1,1'-비페닐]-3-일)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (5.66 g, 12.18 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 17과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 7.16 g (yield: 74 %)을 획득하였다.

[634] GC-Mass (이론치: 793.97 g/mol, 측정치: 793 g/mol)

[635]

[636] [합성예 25] E-11의 합성

[637]



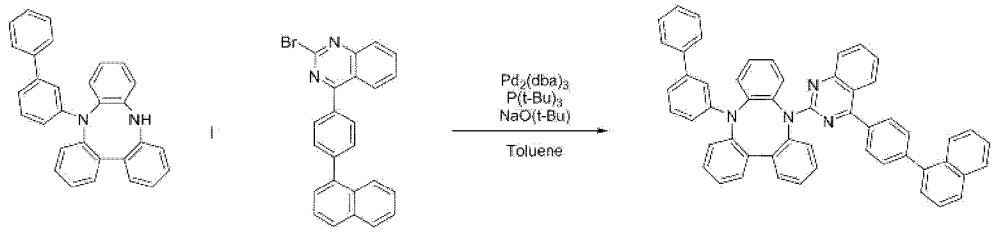
[638] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 4-([1,1'-비페닐]-4-일)-2-브로모퀴나졸린 (4.40 g, 12.18 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 17과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.97 g (yield: 71 %)을 획득하였다.

[639] GC-Mass (이론치: 690.85 g/mol, 측정치: 690 g/mol)

[640]

[641] [합성예 26] E-12의 합성

[642]



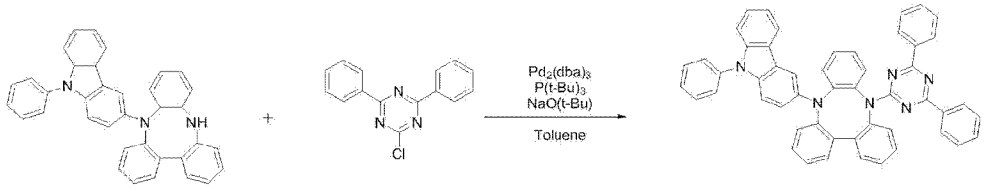
[643] 3-브로모-1,1'-비페닐 대신 2-브로모-4-(4-(나프탈렌-1-일)페닐)퀴나졸린 (5.01 g, 12.18 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 17과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.87 g (yield: 65 %)을 획득하였다.

[644] GC-Mass (이론치: 740.91 g/mol, 측정치: 740 g/mol)

[645]

[646] [합성예 27] C-5의 합성

[647]



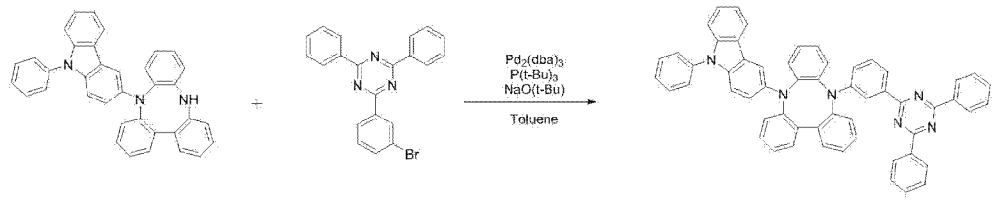
[648] 질소 기류 하에서 중간체-9 (5.0 g, 10.01 mmol), 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2.68 g, 10.01 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.27 g, 0.30 mmol), $P(t\text{-}bu)_3$ (0.41 g, 2.00 mmol), NaO(t-bu) (1.92 g, 20.02 mmol) 및 톨루엔 100 ml를 혼합하고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 4.90 g (yield: 67 %)을 획득하였다.

[649] GC-Mass (이론치: 730.88 g/mol, 측정치: 730 g/mol)

[650]

[651] [합성예 28] C-15의 합성

[652]



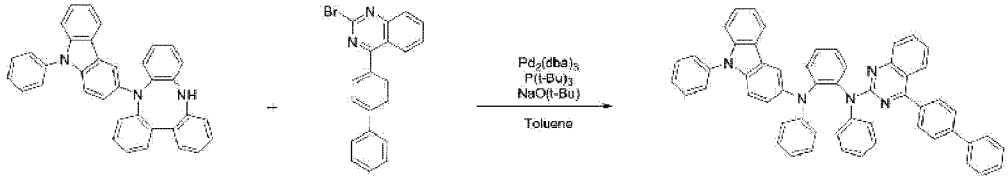
[653] 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 대신 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.89 g, 10.01 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 27과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.65 g (yield: 70 %)을 획득하였다.

[654] GC-Mass (이론치: 806.97 g/mol, 측정치: 806 g/mol)

[655]

[656] [합성예 29] E-31의 합성

[657]



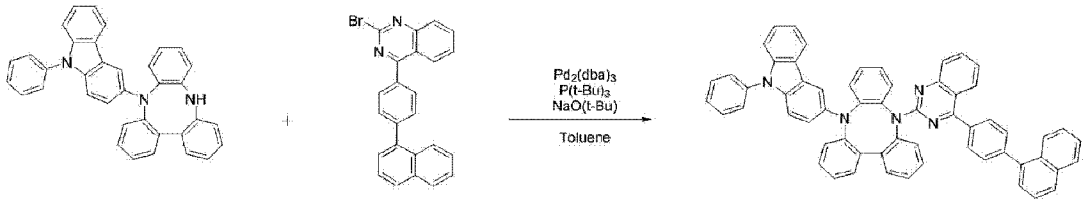
[658] 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 대신 4-([1,1'-비페닐]-4-일)-2-브로모퀴나졸린 (3.862g, 10.01 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 27과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.31 g (yield: 68 %)을 획득하였다.

[659] GC-Mass (이론치: 779.95 g/mol, 측정치: 779 g/mol)

[660]

[661] [합성예 30] E-32의 합성

[662]



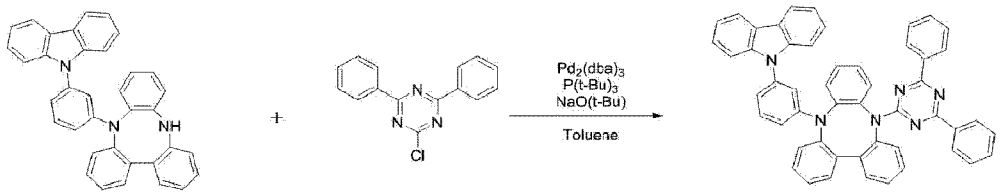
[663] 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 대신 2-브로모-4-(4-(나프탈렌-1-일)페닐)퀴나졸린 (4.12 g, 10.01 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 27과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.81 g (yield: 70 %)을 획득하였다.

[664] GC-Mass (이론치: 830.01 g/mol, 측정치: 830 g/mol)

[665]

[666] [합성예 31] C-77의 합성

[667]



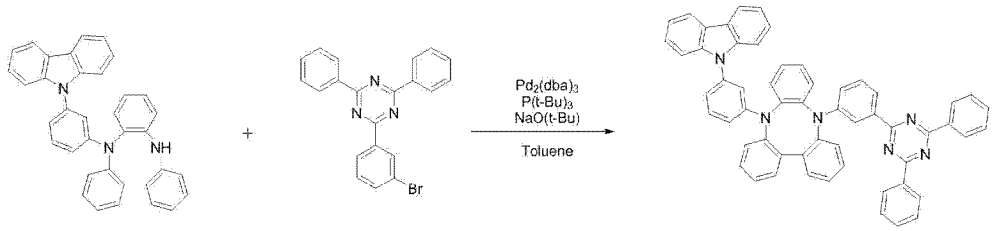
[668] 질소 기류 하에서 중간체-8 (5.0 g, 10.01 mmol), 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2.68 g, 10.01 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.27 g, 0.30 mmol), $P(t\text{-}bu)_3$ (0.41 g, 2.00 mmol), NaO(t-bu) (1.92 g, 20.02 mmol) 및 톨루엔 100 ml를 혼합하고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 4.90 g (yield: 67 %)을 획득하였다.

[669] GC-Mass (이론치: 730.88 g/mol, 측정치: 730 g/mol)

[670]

[671] [합성예 32] C-93의 합성

[672]



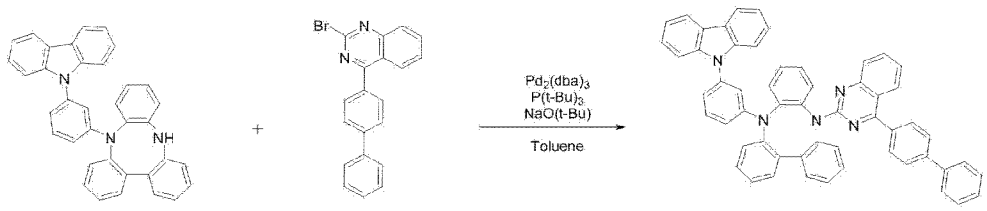
[673] 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 대신 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.89 g, 10.01 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.65 g (yield: 70 %)을 획득하였다.

[674] GC-Mass (이론치: 806.97 g/mol, 측정치: 806 g/mol)

[675]

[676] [합성예 33] E-47의 합성

[677]



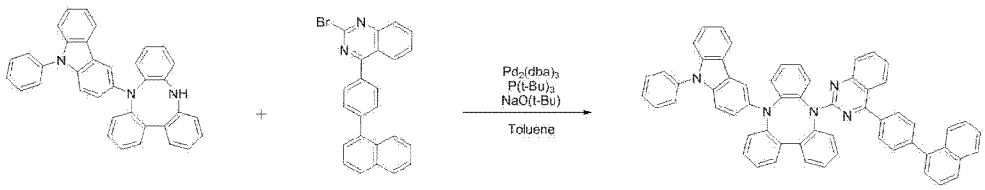
[678] 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 대신 4-([1,1'-비페닐]-4-일)-2-브로모퀴나졸린 (3.862g, 10.01 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.31 g (yield: 68 %)을 획득하였다.

[679] GC-Mass (이론치: 779.95 g/mol, 측정치: 779 g/mol)

[680]

[681] [합성예 34] E-48의 합성

[682]



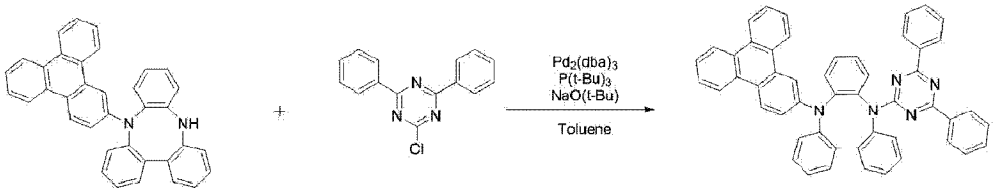
[683] 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 대신 2-브로모-4-(4-(나프탈렌-1-일)페닐)퀴나졸린 (4.12 g, 10.01 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 31과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.81 g (yield: 70 %)을 획득하였다.

[684] GC-Mass (이론치: 830.01 g/mol, 측정치: 830 g/mol)

[685]

[686] [합성예 35] C-141의 합성

[687]



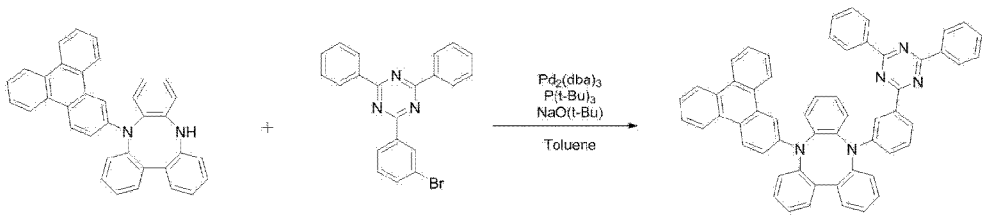
[688] 질소 기류 하에서 중간체-5 (5.0 g, 10.32 mmol), 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2.76 g, 10.32 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.28 g, 0.31 mmol), $P(t\text{-}bu)_3$ (0.42 g, 2.06 mmol), NaO(t-bu) (1.98 g, 20.64 mmol) 및 톨루엔 100 ml를 혼합하고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 5.17 g (yield: 70 %)을 획득하였다.

[689] GC-Mass (이론치: 715.86 g/mol, 측정치: 715 g/mol)

[690]

[691] [합성예 36] C-142의 합성

[692]



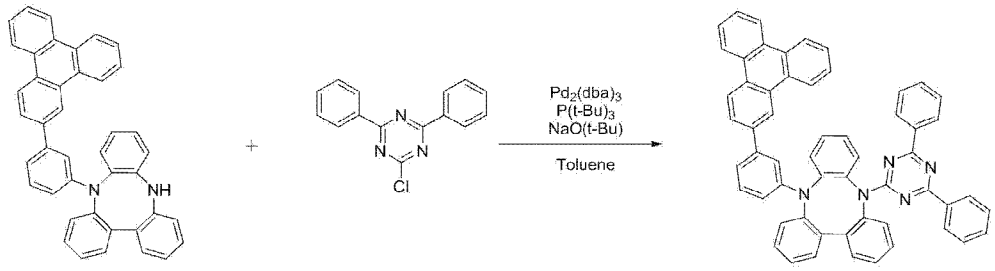
[693] 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 대신 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (4.01 g, 10.32 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 35와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.80 g (yield: 71 %)을 획득하였다.

[694] GC-Mass (이론치: 791.96 g/mol, 측정치: 791 g/mol)

[695]

[696] [합성예 37] C-145의 합성

[697]



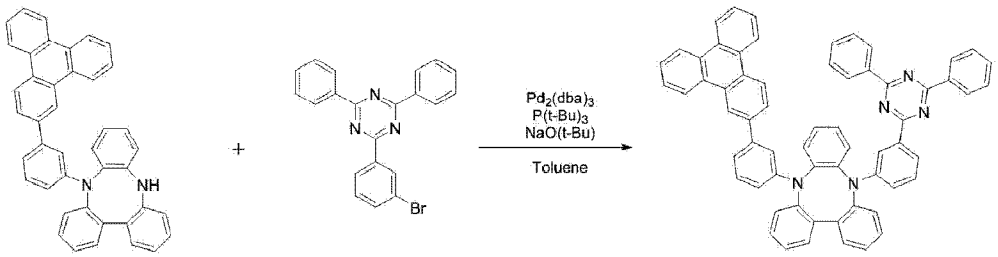
[698] 질소 기류 하에서 중간체-6 (5.0 g, 8.92 mmol), 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2.39 g, 8.92 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.24 g, 0.27 mmol), $P(t\text{-}bu)_3$ (0.36 g, 1.78 mmol), NaO(t-bu) (1.71 g, 17.83 mmol) 및 톨루엔 100 ml를 혼합하고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 4.5 g (yield: 65 %)을 획득하였다.

[699] GC-Mass (이론치: 791.96 g/mol, 측정치: 791 g/mol)

[700]

[701] [합성예 38] C-146의 합성

[702]



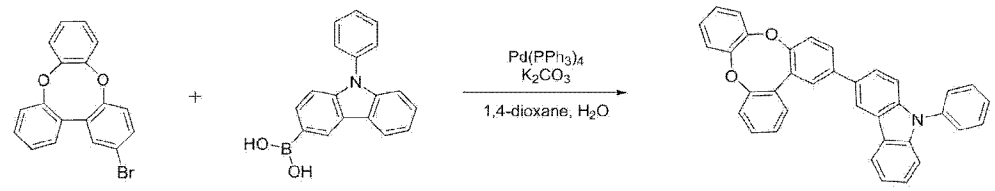
[703] 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 대신 2-(3-브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.46 g, 8.92 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 37과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.5 g (yield: 70 %)을 획득하였다.

[704] GC-Mass (이론치: 888.06 g/mol, 측정치: 888 g/mol)

[705]

[706] [합성예 39] F-1의 합성

[707]



[708] 질소 기류 하에서 중간체-10 (5.0 g, 14.74 mmol), (9-페닐-9H-카바졸-3-일)보론산 (4.23 g, 14.74 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (0.85 g, 074 mmol), K_2CO_3 (6.11 g, 44.22 mmol) 및 톨루엔 100 ml를 혼합하고 100℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄 으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고

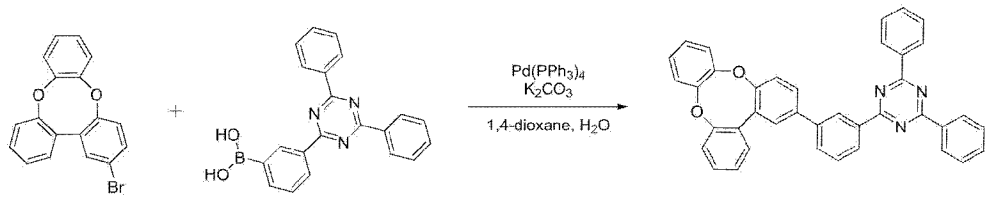
필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 5.5 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

[709] GC-Mass (이론치: 501.59 g/mol, 측정치: 501 g/mol)

[710]

[711] [합성예 40] F-10의 합성

[712]



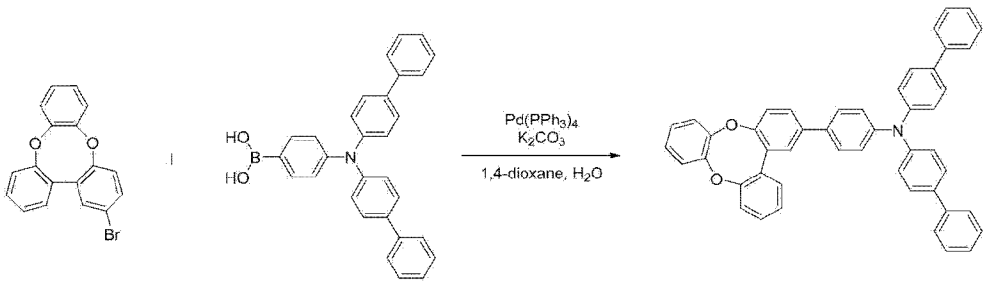
[713] (9-페닐-9H-카바졸-3-일)보론산 대신 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보론산 (5.21 g, 14.74 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 39과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.8 g (yield: 70 %)을 획득하였다.

[714] GC-Mass (이론치: 567.65 g/mol, 측정치: 567 g/mol)

[715]

[716] [합성예 41] F-24의 합성

[717]



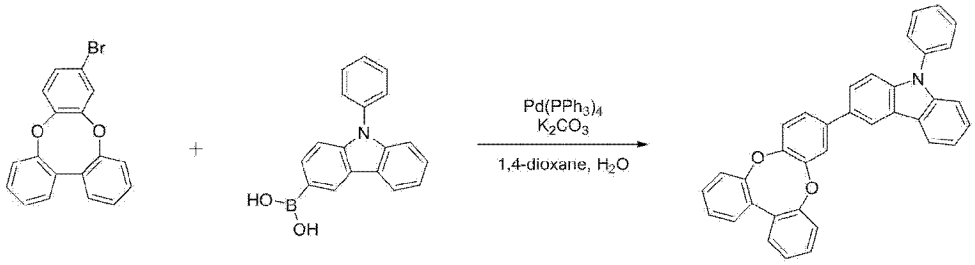
[718] (9-페닐-9H-카바졸-3-일)보론산 대신 (4-(디([1,1'-비페닐]-4-일)아미노)페닐)보론산 (6.51 g, 14.74 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 39과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 7.54g (yield: 78 %)을 획득하였다.

[719] GC-Mass (이론치: 655.80 g/mol, 측정치: 655 g/mol)

[720]

[721] [합성예 42] F-25의 합성

[722]



[723] 질소 기류 하에서 중간체-11 (5.0 g, 14.74 mmol),

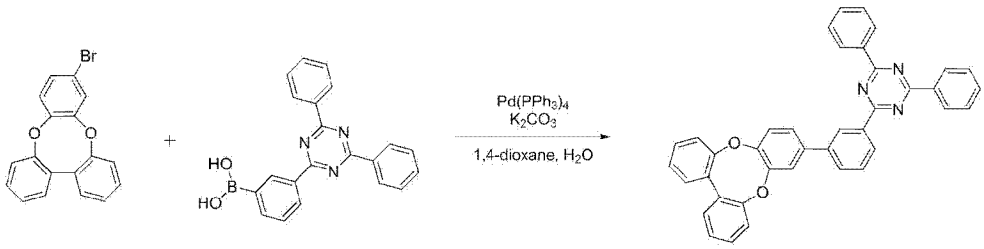
(9-페닐-9H-카바졸-3-일)보론산 (4.23 g, 14.74 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (0.85 g, 074 mmol), K_2CO_3 (6.11 g, 44.22 mmol) 및 톨루엔 100 ml를 혼합하고 100℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄 으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 5.5 g (yield: 75 %)을 획득하였다.

[724] GC-Mass (이론치: 501.59 g/mol, 측정치: 501 g/mol)

[725]

[726] [합성예 43] F-34의 합성

[727]



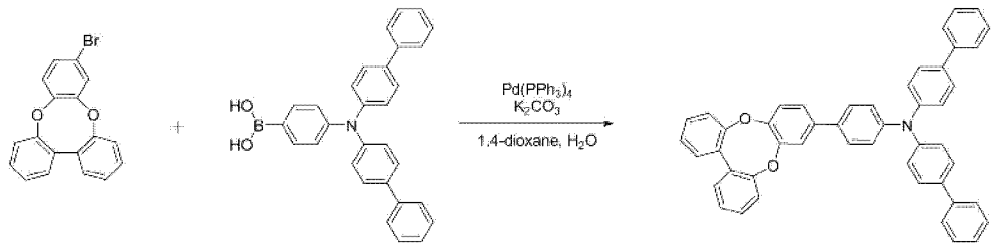
[728] (9-페닐-9H-카바졸-3-일)보론산 대신 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보론산 (5.21 g, 14.74 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 39과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.8 g (yield: 70 %)을 획득하였다.

[729] GC-Mass (이론치: 567.65 g/mol, 측정치: 567 g/mol)

[730]

[731] [합성예 44] F-48의 합성

[732]



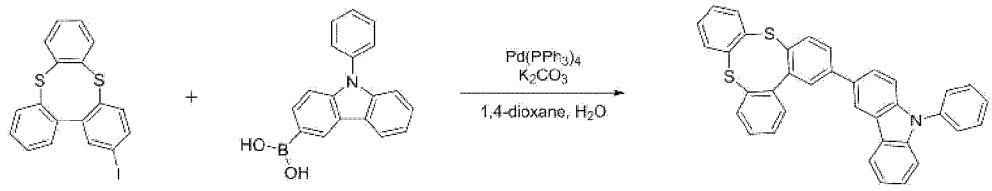
[733] (9-페닐-9H-카바졸-3-일)보론산 대신 (4-(디([1,1'-비페닐]-4-일)아미노)페닐)보론산 (6.51 g, 14.74 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 39과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 7.54g (yield: 78 %)을 획득하였다.

[734] GC-Mass (이론치: 655.80 g/mol, 측정치: 655 g/mol)

[735]

[736] [합성예 45] G-1의 합성

[737]



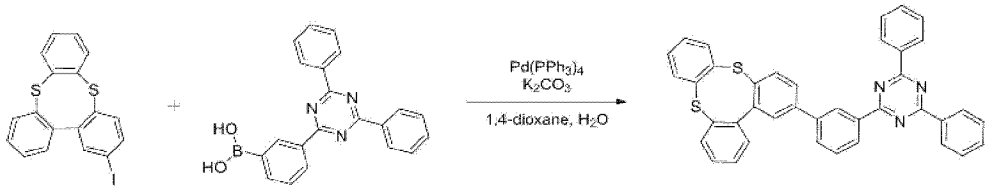
[738] 질소 기류 하에서 중간체-12 (5.0 g, 11.95 mmol), (9-페닐-9H-카바졸-3-일)보론산 (4.23 g, 11.95 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (0.69 g, 060 mmol), K_2CO_3 (4.96 g, 35.86 mmol) 및 톨루엔 100 ml를 혼합하고 100℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄 으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 4.47 g (yield: 70 %)을 획득하였다.

[739] GC-Mass (이론치: 533.71 g/mol, 측정치: 533 g/mol)

[740]

[741] [합성예 46] G-10의 합성

[742]



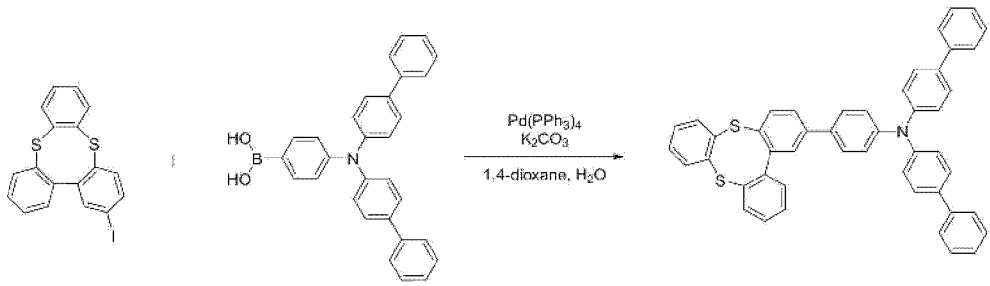
[743] (9-페닐-9H-카바졸-3-일)보론산 대신 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보론산 (4.22 g, 11.95 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 45와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.0 g (yield: 70 %)을 획득하였다.

[744] GC-Mass (이론치: 599.77 g/mol, 측정치: 599 g/mol)

[745]

[746] [합성예 47] G-24의 합성

[747]



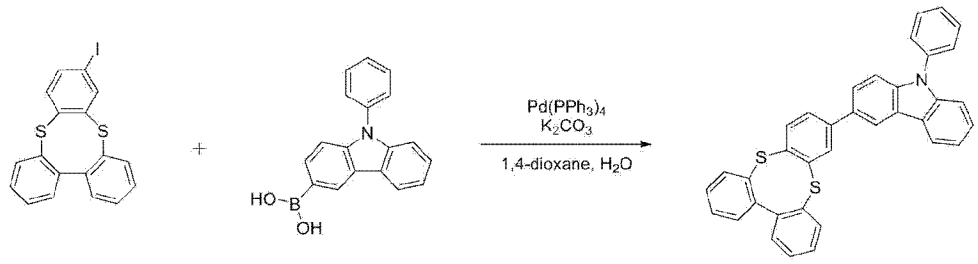
[748] (9-페닐-9H-카바졸-3-일)보론산 대신 (4-(디([1,1'-비페닐]-4-일)아미노)페닐)보론산 (5.28 g, 11.95 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 45과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 6.5g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[749] GC-Mass (이론치: 687.92 g/mol, 측정치: 687 g/mol)

[750]

[751] [합성예 48] G-25의 합성

[752]



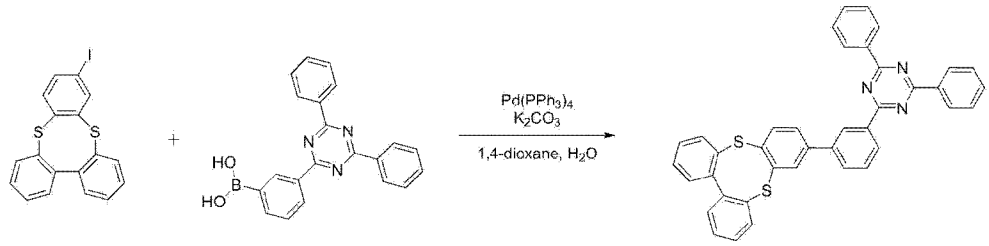
[753] 질소 기류 하에서 중간체-13 (5.0 g, 11.95 mmol), (9-페닐-9H-카바졸-3-일)보론산 (4.23 g, 11.95 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (0.69 g, 060 mmol), K_2CO_3 (4.96 g, 35.86 mmol) 및 톨루엔 100 ml를 혼합하고 100℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 다이클로로메탄 으로 추출하고 $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 4.47 g (yield: 70 %)을 획득하였다.

[754] GC-Mass (이론치: 533.71 g/mol, 측정치: 533 g/mol)

[755]

[756] [합성예 49] G-34의 합성

[757]



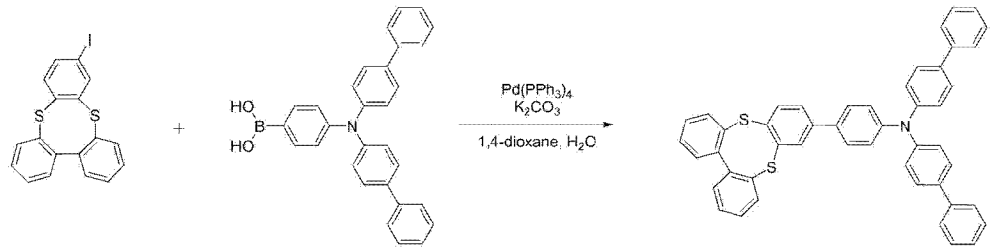
[758] (9-페닐-9H-카바졸-3-일)보론산 대신 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보론산 (4.22 g, 11.95 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 48과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 5.0 g (yield: 70 %)을 획득하였다.

[759] GC-Mass (이론치: 599.77 g/mol, 측정치: 599 g/mol)

[760]

[761] [합성예 50] G-48의 합성

[762]



[763] (9-페닐-9H-카바졸-3-일)보론산 대신 (4-(디([1,1'-비페닐]-4-일)아미노)페닐)보론산 (5.28 g, 11.95 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 48과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 6.5g (yield: 80 %)을 획득하였다.

[764] GC-Mass (이론치: 687.92 g/mol, 측정치: 687 g/mol)

[765]

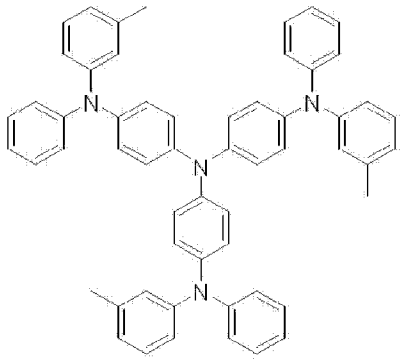
[766] [실시예 1] 유기 전계 발광 소자의 제조

[767] ITO (Indium tin oxide)가 1500 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후, UV OZONE 세정기(Power sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음, UV를 이용하여 상기 기판을 5 분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

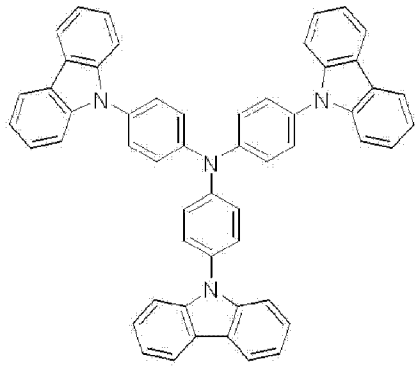
[768] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA(60nm)/E-49 의 화합물(80nm)/DS-H522 + 5% DS-501(300nm)/BCP(10nm)/Alq3(30 nm)/LiF(1nm)/Al(200nm) 순서로 유기 EL 소자를 제조하였다.

[769] 소자 제작에 사용된 DS-H522 및 DS-501은 ㈜두산 전자 BG의 제품이며, m-MTDATA, TCTA, CBP, $Ir(ppy)_3$, 및 BCP의 구조는 하기와 같다.

[770]

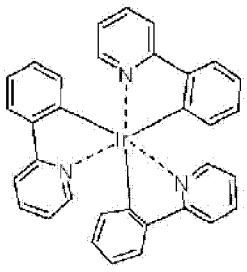


m-MTDATA

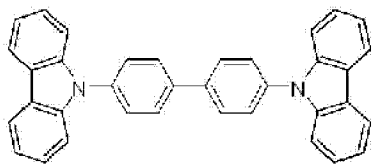


TCTA

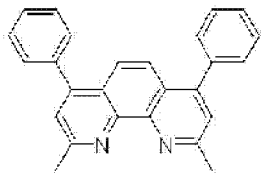
[771]



$Ir(ppy)_3$



CBP



BCP

[772]

[773] [실시예 2 내지 24] 유기 전계 발광 소자의 제조

[774] 실시예 1에서 정공 수송층 형성시 정공 수송층 물질로 사용된 화합물 E-49 대신 하기 표 1에 기재된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 수행하여 유기 EL 소자를 제조하였다.

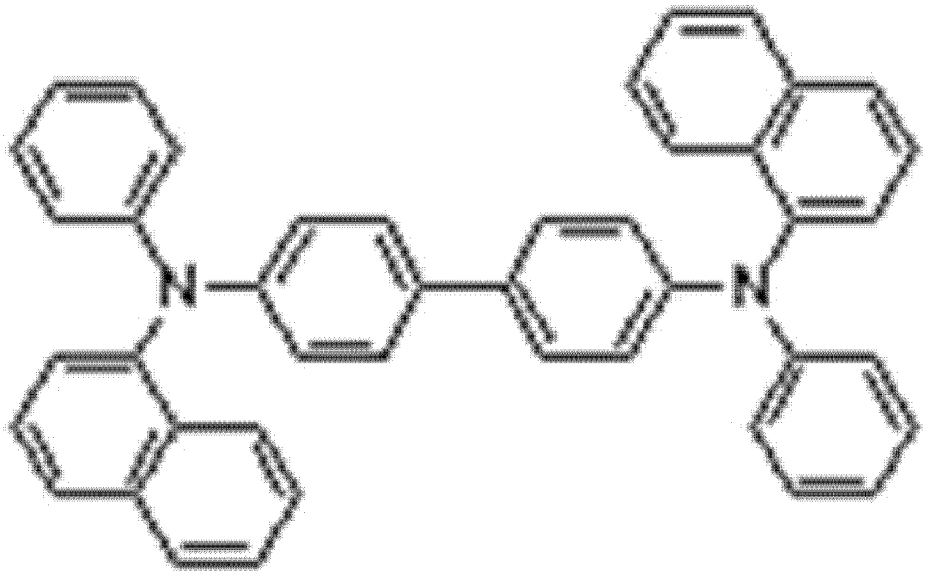
[775]

[776] [비교예 1] 유기 전계 발광 소자의 제작

[777] 실시예 1에서 정공 수송층 형성시 정공 수송층 물질로 사용된 화합물 E-49 대신

NPB를 정공수송층 물질로 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 EL 소자를 제조하였다. 사용된 NPB의 구조는 하기와 같다.

[778]



NPB

[779]

[780] [평가예 1]

[781] 실시예 1 내지 24, 및 비교예 1에서 각각 제조된 유기 EL 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/㎠에서의 구동전압 및 전류효율를 측정하였고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[782]

[783] [표1]

샘플	정공수송층	구동 전압 (V)	전류효율 (cd/A)
실시예 1	화합물 E-49	4.1	22.2
실시예 2	화합물 E-50	4.3	20.1
실시예 3	화합물 E-51	4.4	21.3
실시예 4	화합물 E-52	4	22.6
실시예 5	화합물 E-53	4.5	19.5
실시예 6	화합물 E-54	4.7	20.1
실시예 7	화합물 E-55	4.3	21.6
실시예 8	화합물 E-56	4.5	20.5
실시예 9	화합물 E-57	4.7	20.6
실시예 10	화합물 E-58	4.4	21.6
실시예 11	화합물 E-59	5	20.1
실시예 12	화합물 E-60	5.1	18.6
실시예 13	화합물 E-61	4.3	22
실시예 14	화합물 E-62	4.6	21.2
실시예 15	화합물 E-63	4.5	21.2
실시예 16	화합물 E-64	4.4	22.3
실시예 17	화합물 E-65	5.1	18.3
실시예 18	화합물 E-66	5	18.9
실시예 19	화합물 E-67	4.5	21.7
실시예 20	화합물 E-68	4.7	21.2
실시예 21	화합물 E-69	4.8	20.8
실시예 22	화합물 E-70	4.5	21.4
실시예 23	화합물 E-71	5.1	18.2
실시예 24	화합물 E-72	5.1	18.5
비교예 1	NPB	5.2	18.1

[784]

[785] 상기 표 1에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 정공 수송층으로 사용한 유기 전계 발광 소자(실시예 1 내지 24에서 각각 제조된 유기 전계 발광 소자)는, 종래 NPB를 사용한 유기 전계 발광 소자(비교예1의 유기 전계 발광

소자)에 비해 전류 효율 및 구동 전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있다.

[786]

[787] [실시예 25] 녹색 유기 전계 발광 소자의 제조

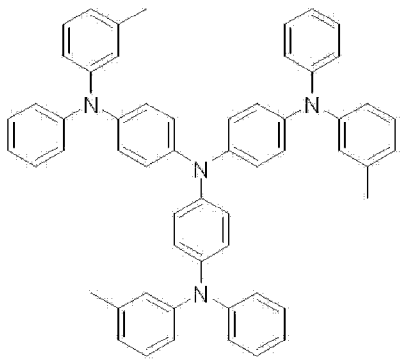
[788] 합성된 화합물 B-1을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화 정제를 한 후, 하기와 같이 녹색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[789] ITO (Indium tin oxide)가 1500 ÅÅ 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면, 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고, 건조시킨 후, UV OZONE 세정기(Power sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음, UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

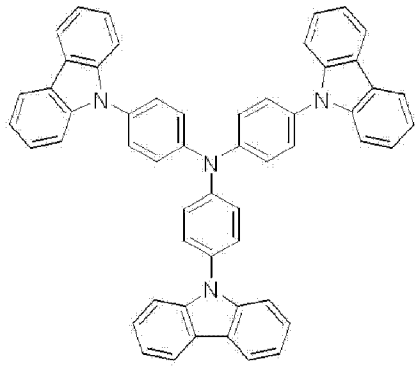
[790] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에, m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/B-1의 화합물(40nm)/CBP + 10 % $Ir(ppy)_3$ (300nm)/BCP (10 nm)/Alq3 (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[791] 사용된 m-MTDATA, TCTA, $Ir(ppy)_3$, CBP 및 BCP의 구조는 하기와 같다.

[792]

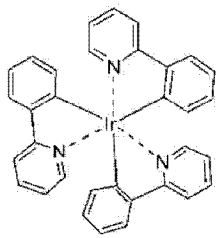


m-MTDATA

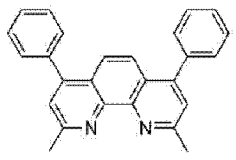


TCTA

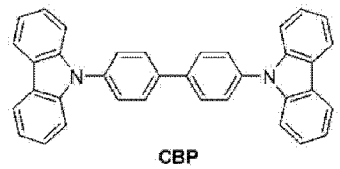
[793]



$Ir(ppy)_3$



BCP



CBP

[794]

[795] [실시예 26 ~ 52] 녹색 유기 전계 발광 소자의 제조

[796] 실시예 25에서 화합물 B-1 대신 하기 표 2에 기재된 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 25와 동일하게 수행하여 유기 EL 소자를 제조하였다.

[797]

[798] [비교예 2] 녹색 유기 전계 발광 소자의 제조

[799] 실시예 25에서 B-1 화합물을 사용하지 않은 것을 제외하고는, 실시예 25와

동일하게 수행하여 녹색 유기 EL 소자를 제조하였다.

[800]

[801] [평가예 2]

[802] 실시예 25 내지 52, 및 비교예 2에서 각각 제조된 유기 전계 발광 소자에 대하여, 전류밀도 10 mA/㎠에서의 구동 전압, 전류 효율 및 발광 피크를 측정하고, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[803]

[804] [표2]

샘플	정공수송층	구동 전압 (V)	전류효율 (cd/A)
실시예 25	화합물 B-1	6.7	41.9
실시예 26	화합물 B-2	6.85	42.1
실시예 27	화합물 B-3	6.8	44.8
실시예 28	화합물 B-4	6.8	47.5
실시예 29	화합물 B-5	6.85	41.5
실시예 30	화합물 B-6	6.9	41.9
실시예 31	화합물 B-7	6.95	42.4
실시예 32	화합물 B-8	6.8	42.3
실시예 33	화합물 B-9	6.9	45.2
실시예 34	화합물 B-10	6.8	44.6
실시예 35	화합물 B-11	6.7	44.1
실시예 36	화합물 B-12	6.65	43.6
실시예 37	화합물 B-13	6.7	42.6
실시예 38	화합물 B-14	6.9	44.1
실시예 39	화합물 B-15	6.8	42.8
실시예 40	화합물 B-16	6.7	41.4
실시예 41	화합물 B-17	6.7	41.8
실시예 42	화합물 B-18	6.65	45.3
실시예 43	화합물 B-19	6.7	45.1
실시예 44	화합물 B-20	6.65	42.6
실시예 45	화합물 B-21	6.6	41.3
실시예 46	화합물 B-22	6.6	42.1
실시예 47	화합물 B-23	6.7	41.9
실시예 48	화합물 B-24	6.9	42.1
실시예 49	화합물 B-25	6.8	44.8
실시예 50	화합물 B-26	6.8	47.5
실시예 51	화합물 B-27	6.85	41.5
실시예 52	화합물 B-28	6.85	41.9
비교예 2	-	6.93	38.2

[805]

[806] 상기 표 2에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 발광 재료로 사용한 녹색 유기 전계 발광 소자(실시예 25 내지 52에서 각각 제조된 녹색 유기 전계 발광 소자)는, 종래 CBP만을 발광층의 재료로 사용한 녹색 유기 전계 발광 소자(비교예 2의 유기 전계 발광 소자)에 비해 전류 효율 및 구동 전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있다.

[807]

[808] [실시예 53] 적색 유기 전계 발광 소자의 제조

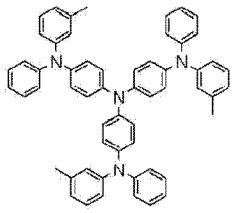
[809] 합성된 화합물을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 적색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[810] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500ÅÅ 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 UV OZONE 세정기 (Power sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음 UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

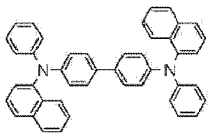
[811] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에, m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ E-1의 화합물(40nm)/CBP + 10 % (piq)2Ir(acac) (300nm)/BCP (10 nm)/Alq3 (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[812] 사용된 m-MTDATA, TCTA, (piq)2Ir(acac) 및 CBP의 구조는 하기와 같다.

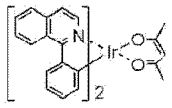
[813]



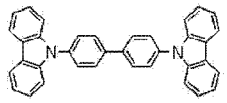
m-MTDATA



NPB



(piq)2Ir(acac)



CBP

[814]

[815] [실시예 54 ~ 100] 적색 유기 전계 발광 소자의 제조

[816] 실시예 53에서 E-1 화합물 대신 하기 표 3에 기재된 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 53과 동일하게 수행하여 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[817]

[818] [비교예 3] 적색 유기 전계 발광 소자의 제작

[819] 실시예 53 에서 E-1 화합물을 사용하지 않은 것을 제외하고는, 실시예 53과 동일하게 수행하여 적색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[820]

[821] [평가예 3]

[822] 실시예 53 내지 100 및 비교예 3에서 각각 제조된 유기 전계 발광 소자에 대하여, 전류밀도 10 mA/㎠에서의 구동 전압, 전류 효율 및 발광 피크를 측정하고, 그 결과를 하기 표 3에 나타내었다.

[823]

[824] [표3]

샘플	정공수송층	구동 전압 (V)	전류효율 (cd/A)
실시예 53	화합물 E-1	4.9	11.9
실시예 54	화합물 E-2	5.1	12.1
실시예 55	화합물 E-3	5	14.8
실시예 56	화합물 E-4	5	17.5
실시예 57	화합물 E-5	5.1	11.5
실시예 58	화합물 E-6	5.1	11.9
실시예 59	화합물 E-7	5.2	12.4
실시예 60	화합물 E-8	5	12.3
실시예 61	화합물 E-9	5.1	15.2
실시예 62	화합물 E-10	5	14.6
실시예 63	화합물 E-11	4.9	14.1
실시예 64	화합물 E-12	4.9	13.6
실시예 65	화합물 E-13	4.9	12.6
실시예 66	화합물 E-14	5.1	14.1
실시예 67	화합물 E-15	5	12.8
실시예 68	화합물 E-16	4.9	11.4
실시예 69	화합물 E-17	4.9	11.8
실시예 70	화합물 E-18	4.9	15.3
실시예 71	화합물 E-19	4.9	15.1
실시예 72	화합물 E-20	4.9	12.6
실시예 73	화합물 E-21	4.8	11.3
실시예 74	화합물 E-22	4.8	12.1
실시예 75	화합물 E-23	4.9	11.9
실시예 76	화합물 E-24	5.1	12.1
실시예 77	화합물 E-25	5	14.8
실시예 78	화합물 E-26	5	17.5
실시예 79	화합물 E-27	5.1	11.5
실시예 80	화합물 E-28	5.1	11.9
실시예 81	화합물 E-29	4.9	12.4

실시예 82	화합물 E-30	4.8	12.3
실시예 83	화합물 E-31	4.9	15.2
실시예 84	화합물 E-32	5.1	14.6
실시예 85	화합물 E-33	4.9	14.1
실시예 86	화합물 E-34	5	13.6
실시예 87	화합물 E-35	5	12.6
실시예 88	화합물 E-36	5	14.1
실시예 89	화합물 E-37	5	12.8
실시예 90	화합물 E-38	5.1	11.4
실시예 91	화합물 E-39	5.1	11.8
실시예 92	화합물 E-40	4.3	15.3
실시예 93	화합물 E-41	4.9	15.1
실시예 94	화합물 E-42	4.7	12.6
실시예 95	화합물 E-43	4.5	11.3
실시예 96	화합물 E-44	4.9	12.1
실시예 97	화합물 E-45	5	13.6
실시예 98	화합물 E-46	4.8	12.3
실시예 99	화합물 E-47	5	14.1
실시예 100	화합물 E-48	4.8	11.9
비교예 3	-	5.2	8.2

[825]

[826] 상기 표 3에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 발광 재료로 사용한 적색 유기 전계 발광 소자(실시예 53 내지 100에서 각각 제조된 적색 유기 전계 발광 소자)는, 종래 CBP만을 발광층의 재료로 사용한 적색 유기 전계 발광 소자(비교예 3의 유기 전계 발광 소자)에 비해 전류 효율 및 구동 전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있었다.

[827]

[828] [실시예 101] 청색 유기 전계 발광 소자의 제조

[829] 합성된 화합물을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 적색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

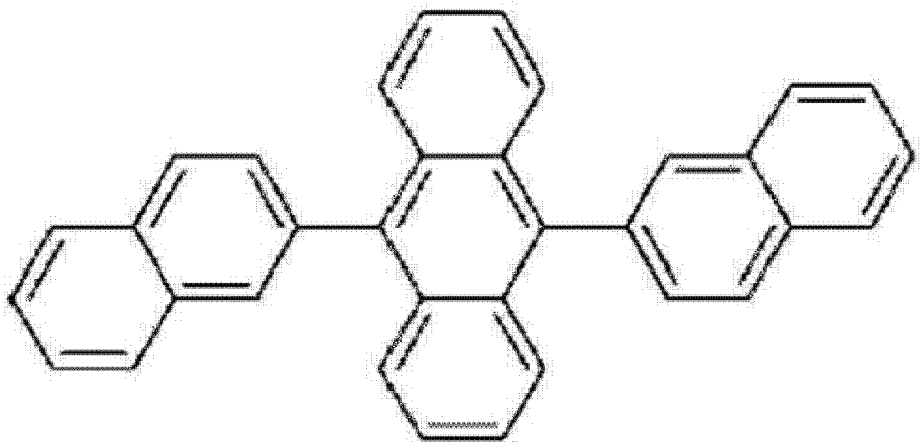
[830] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500ÅÅ 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 UV OZONE 세정기 (Power sonic

405, 화신테크)로 이송시킨 다음 UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[831] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에, DS-205 (두산社) (80 nm)/NPB (15 nm)/A-1의 화합물(15nm)/ADN + 5 % DS-405 (두산社) (300nm)/BCP (10 nm)/Alq3 (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[832] 사용된 ADN의 구조는 하기와 같다.

[833]



ADN

[834]

[835] [실시예 102 ~ 122] 청색 유기 전계 발광 소자의 제조

[836] 실시예 101에서 A-1 화합물 대신 하기 표 4에 기재된 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 101과 동일하게 수행하여 유기 EL 소자를 제조하였다.

[837]

[838] [비교예 4] 청색 유기 전계 발광 소자의 제작

[839] 실시예 101에서 A-1 화합물을 사용하지 않은 것을 제외하고는, 실시예 101과 동일하게 수행하여 청색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[840]

[841] [평가예 4]

[842] 실시예 101 ~ 122 및 비교예 4 에서 제작한 각각의 청색 유기 전계 발광 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/㎠에서의 구동 전압 및 전류 효율을 측정하고, 그 결과를 하기 표 4에 나타내었다.

[843]

[844] [표4]

샘플	정공수송층	구동 전압 (V)	전류효율 (cd/A)
실시예 101	화합물 A-1	4.3	9.2
실시예 102	화합물 A-2	4.5	7.1
실시예 103	화합물 A-3	4.6	8.3
실시예 104	화합물 A-4	4.2	9.6
실시예 105	화합물 A-5	4.7	6.5
실시예 106	화합물 A-6	4.9	7.1
실시예 107	화합물 A-7	4.5	8.6
실시예 108	화합물 A-8	4.7	7.5
실시예 109	화합물 A-9	4.9	7.6
실시예 110	화합물 A-10	4.6	8.6
실시예 111	화합물 A-11	5.2	7.1
실시예 112	화합물 A-12	5.3	5.6
실시예 113	화합물 A-13	4.5	9
실시예 114	화합물 A-14	4.8	8.2
실시예 115	화합물 A-15	4.7	8.2
실시예 116	화합물 A-16	4.6	9.3
실시예 117	화합물 A-17	5.3	5.3
실시예 118	화합물 A-18	5.2	5.9
실시예 119	화합물 A-19	4.7	8.7
실시예 120	화합물 A-20	4.9	8.2
실시예 121	화합물 A-21	5	7.8
실시예 122	화합물 A-22	4.7	8.4
비교예 4	-	5.6	4.8

[845] 상기 표 4에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 발광 재료로 사용한 청색 유기 전계 발광 소자(실시예 101 내지 122 에서 각각 제조된 청색 유기 전계 발광 소자)는, 종래의 청색 유기 전계 발광 소자(비교예 4의 유기 전계 발광 소자)에 비해 전류 효율 및 구동 전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있었다.

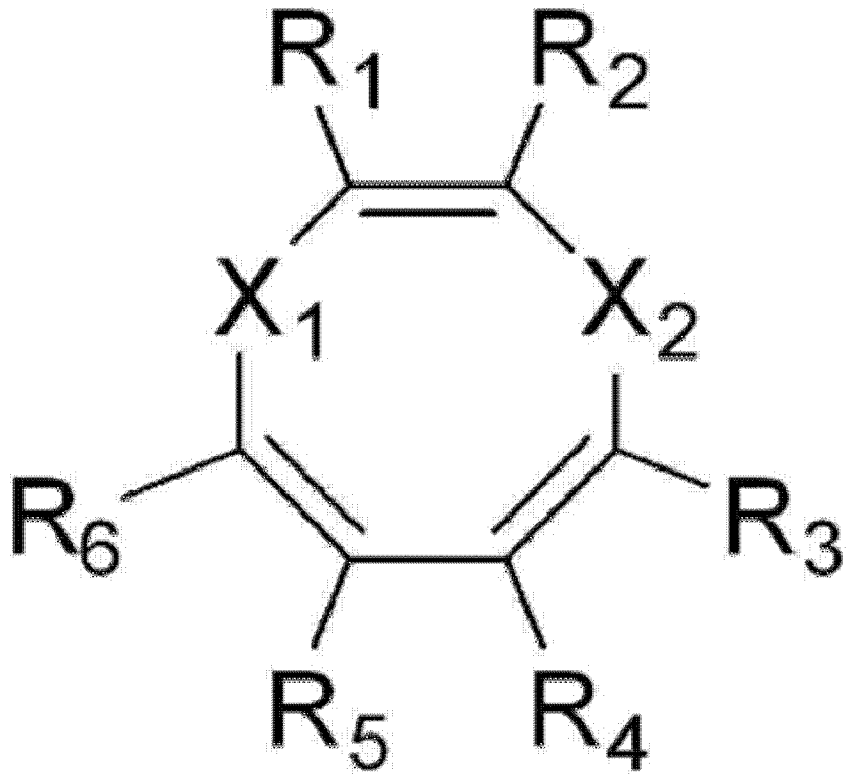
산업상 이용가능성

[846] 본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 전자 또는 정공 주입 및 수송능, 발광능 등이 우수한 신규한 디아조신계 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써 발광 효율, 구동 전압, 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

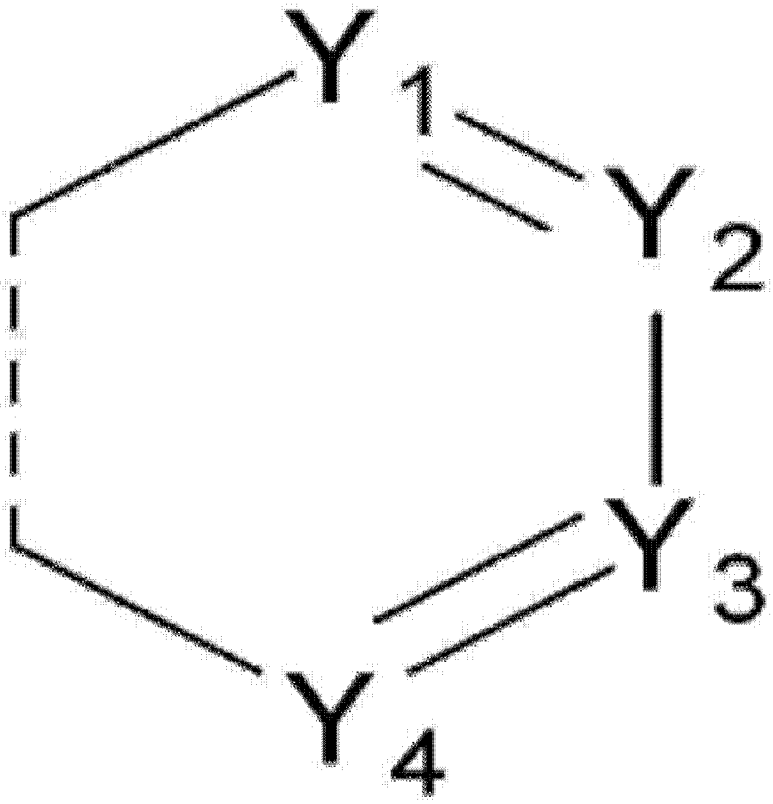
[화학식 1]



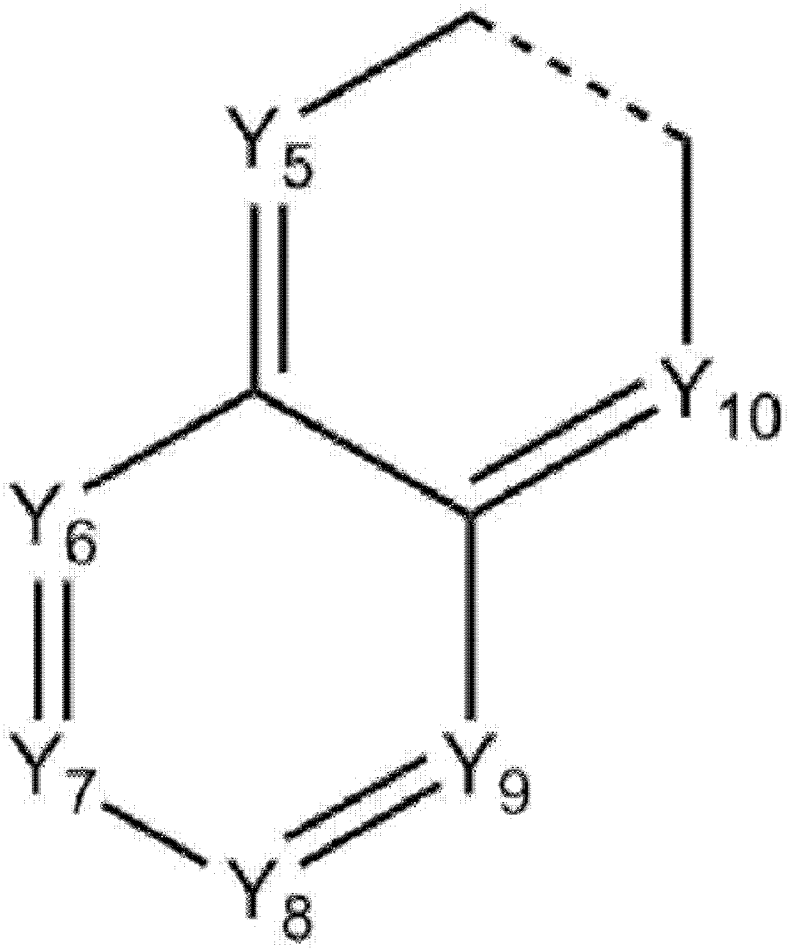
상기 화학식 1에서,

R_1과 R_2, R_3과 R_4 및 R_5과 R_6중 적어도 하나는 하기 화학식 2 내지 화학식 8 중 어느 하나로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하고;

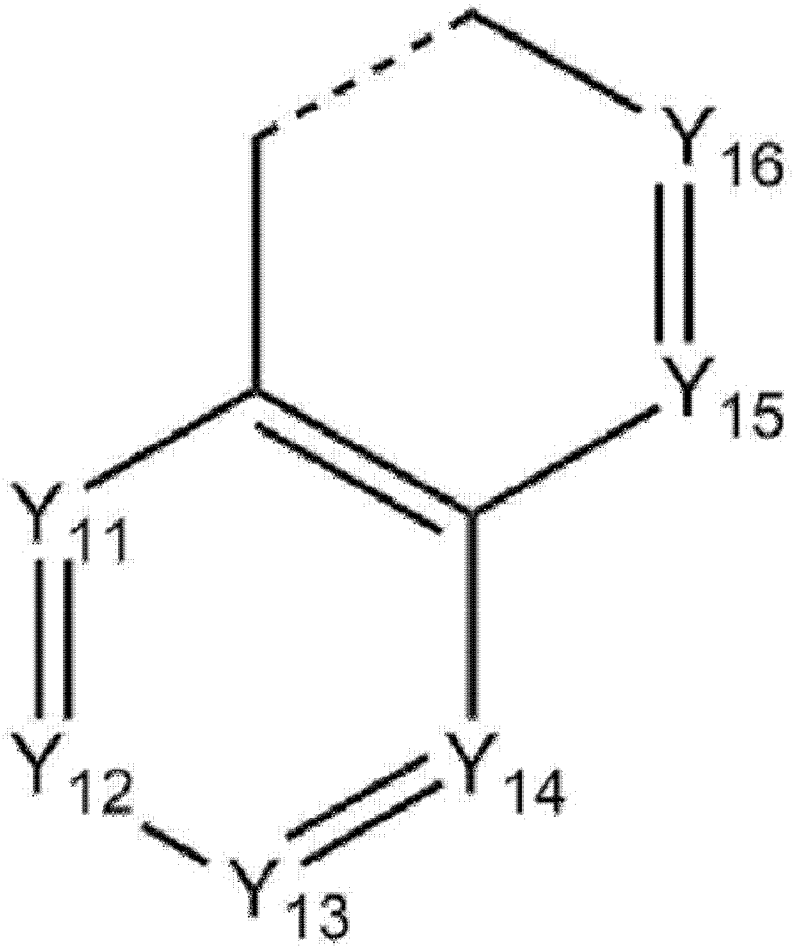
[화학식 2]



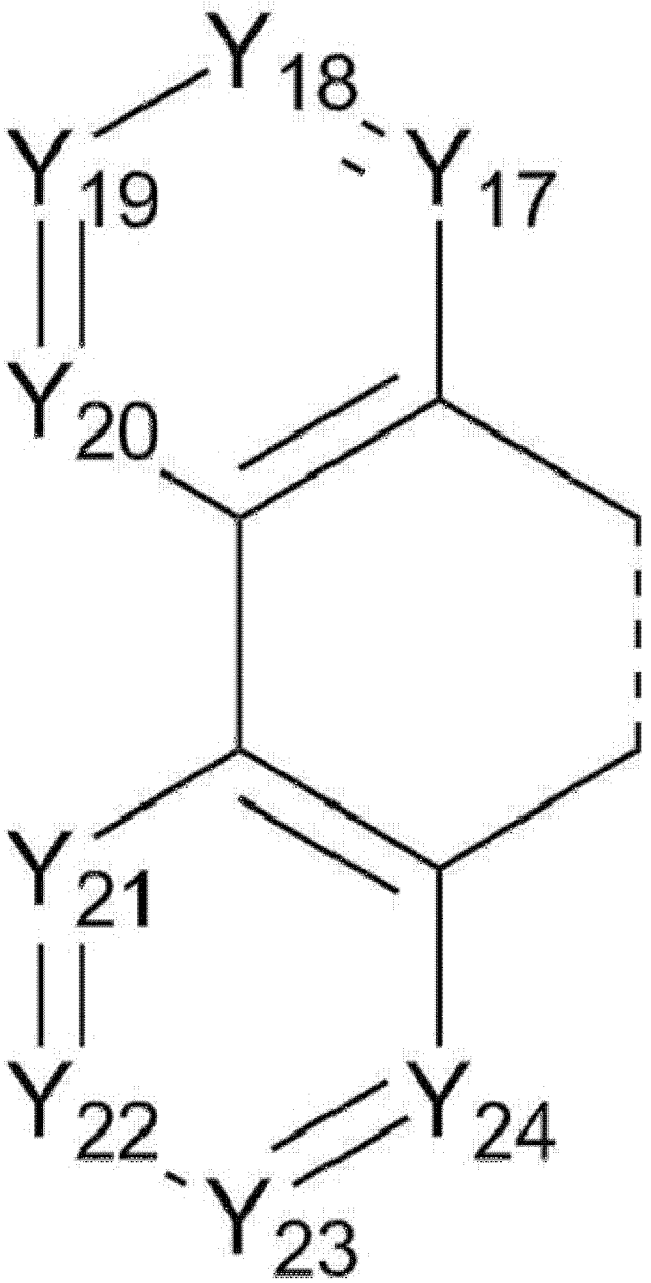
[화학식 3]



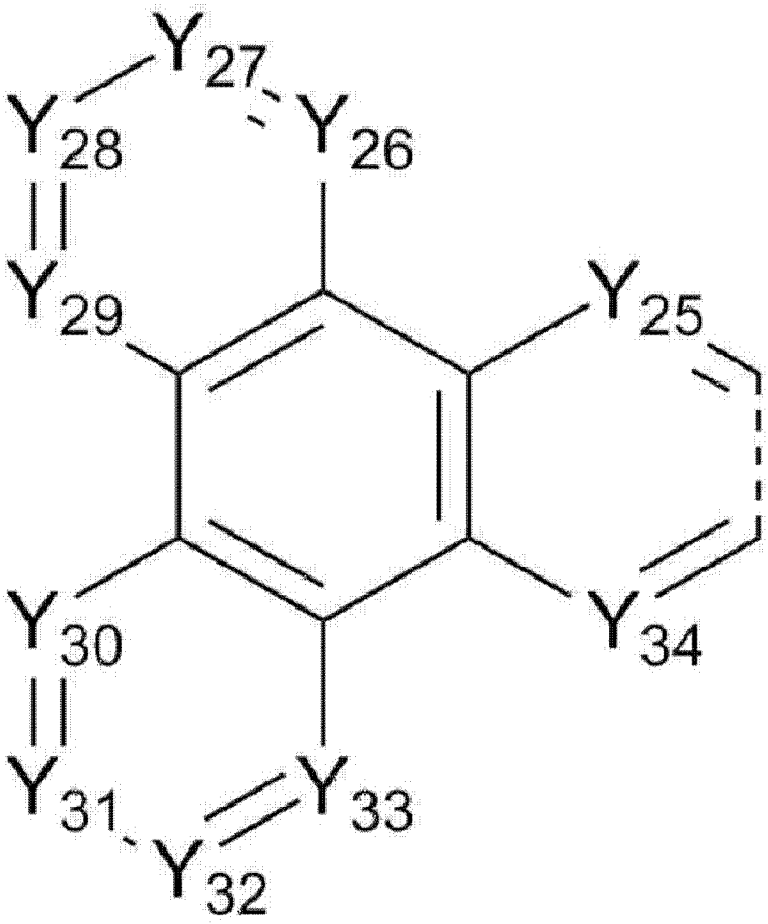
[화학식 4]



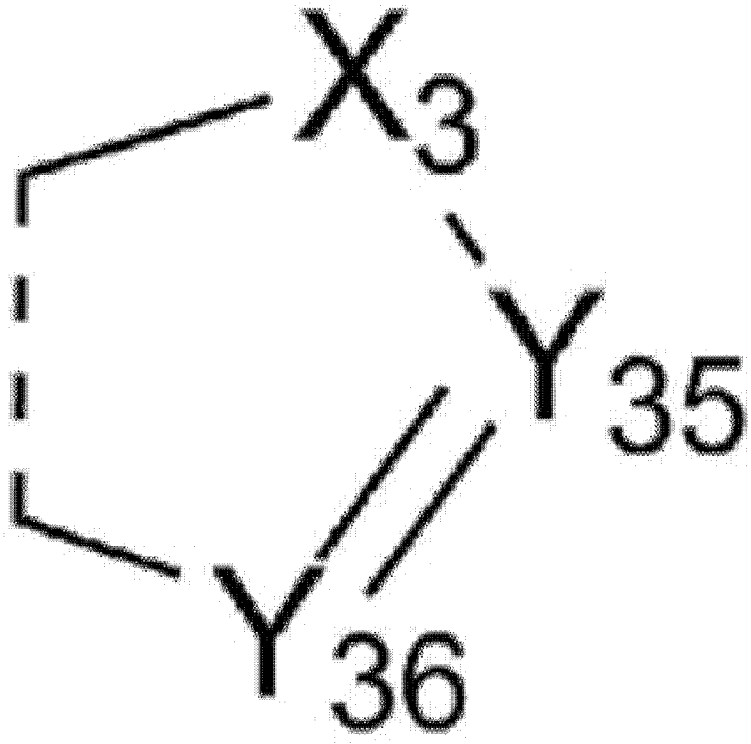
[화학식 5]



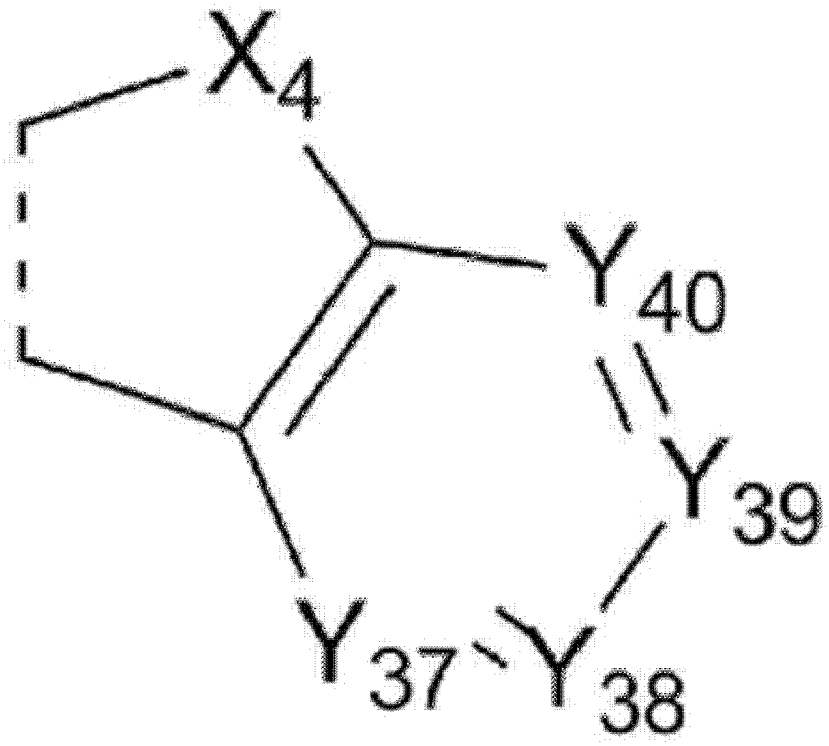
[화학식 6]



[화학식 7]



[화학식 8]



상기 화학식 1 내지 화학식 8에서,
점선은 축합이 이루어지는 부분이며;
X_1 내지 X_4는 각각 독립적으로 O, S, Se, P, $N(Ar_1)$, $C(Ar_2)(Ar_3)$ 및 $Si(Ar_4)(Ar_5)$ 으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 X_3 내지 X_4가 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;
Y_1 내지 Y_{40}은 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_7)$이고, 상기 Y_1 내지 Y_{40}이 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;
상기 화학식 2 내지 화학식 8로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하지 않는 R_1 내지 R_6은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며;
R_7은 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의

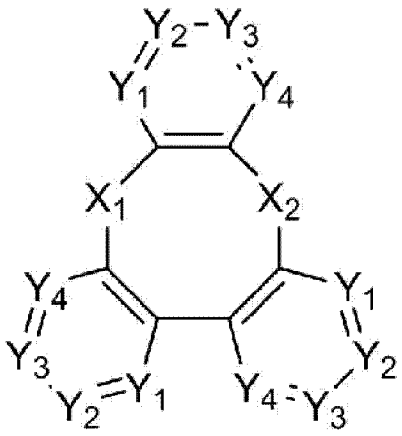
알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접한 각각의 R_7가 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R_7이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

Ar_1 내지 Ar_5는 각각 독립적으로 C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 상기 Ar_1 내지 Ar_5가 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

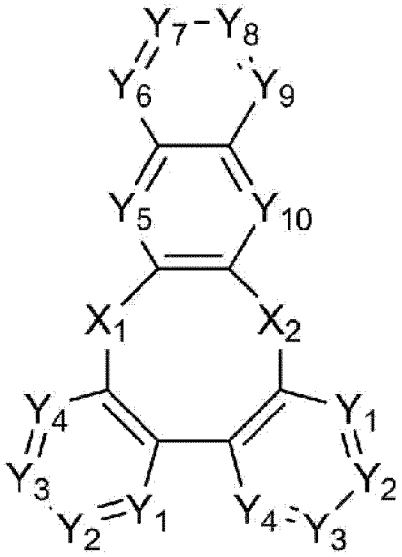
상기 R_1 내지 R_7 및 Ar_1 내지 Ar_5의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[청구항 2] 제1항에 있어서,

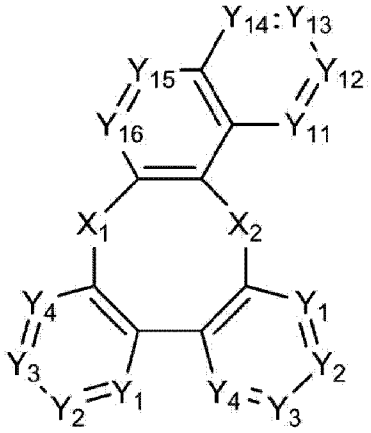
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 N-1 내지 화학식 N-31 중 어느 하나로 표시되는 화합물인 것을 특징으로 하는 화합물:



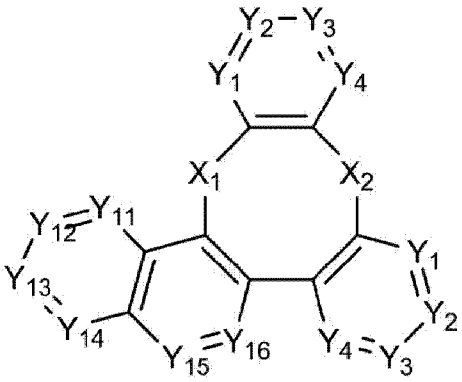
N-1



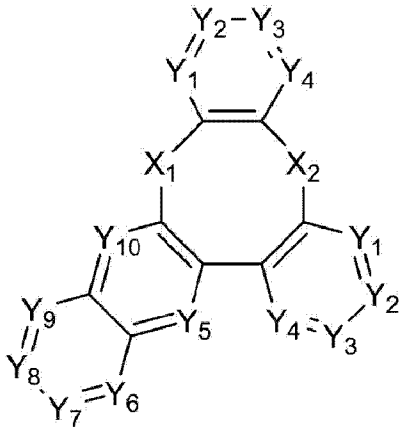
N-2



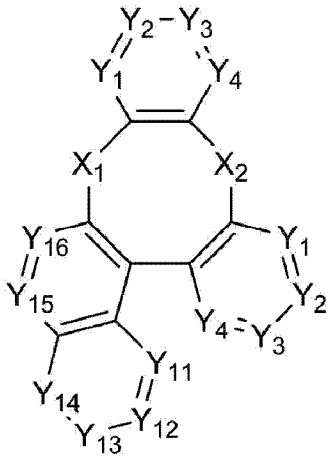
N-3



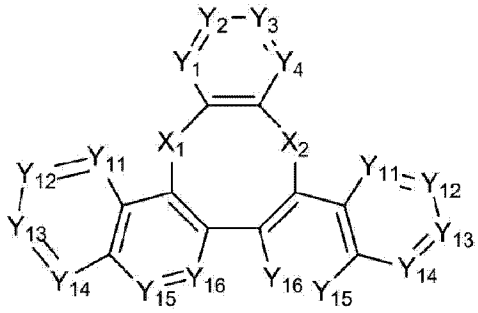
N-4



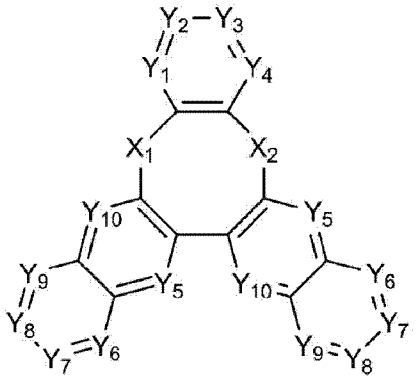
N-5



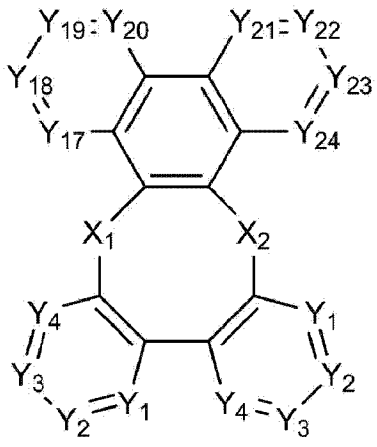
N-6



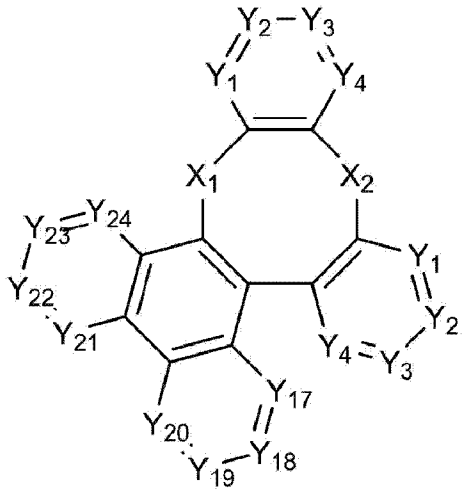
N-7



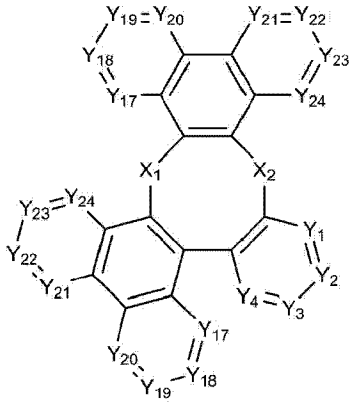
N-8



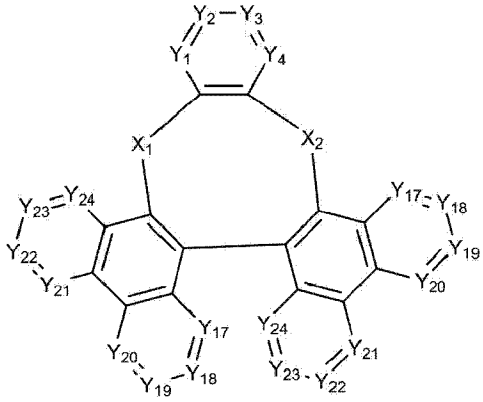
N-9



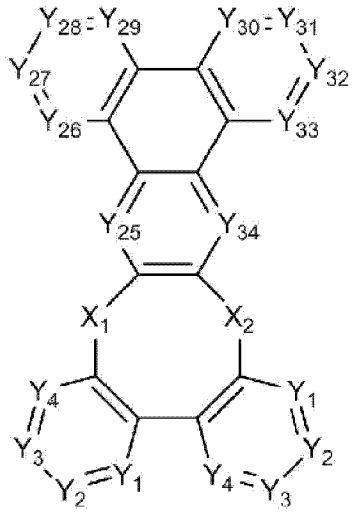
N-10



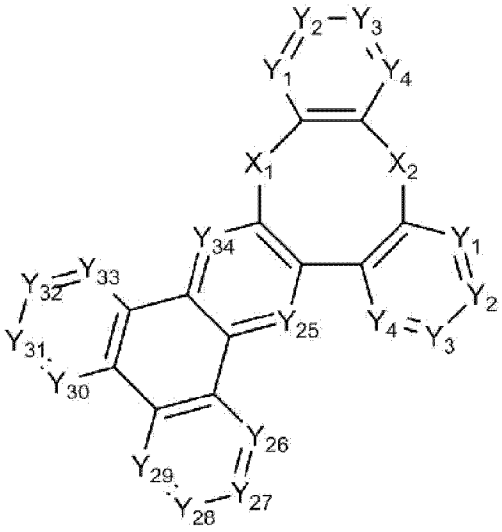
N-11



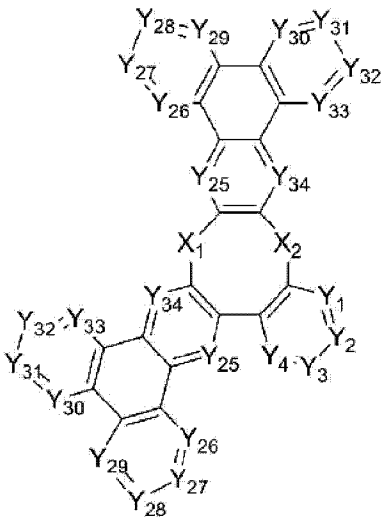
N-12



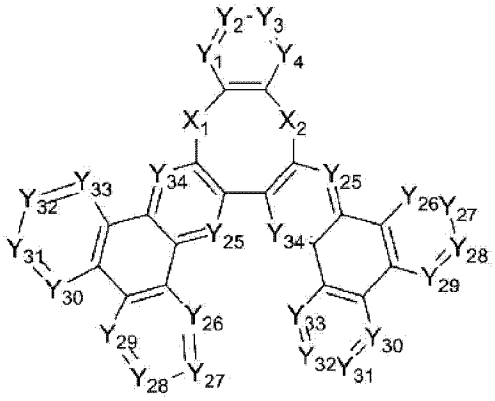
N-13



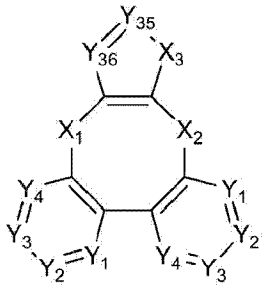
N-14



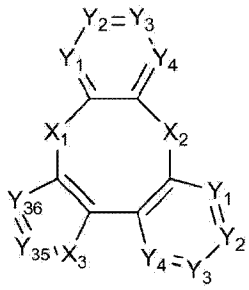
N-15



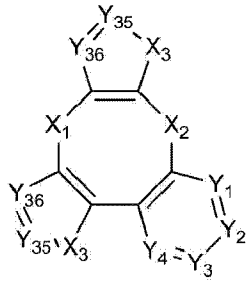
N-16



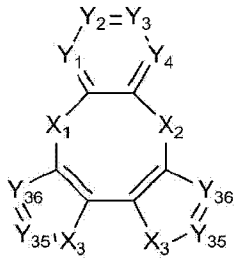
N-17



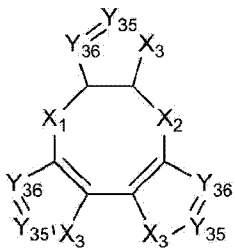
N-18



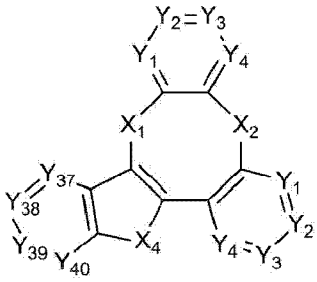
N-19



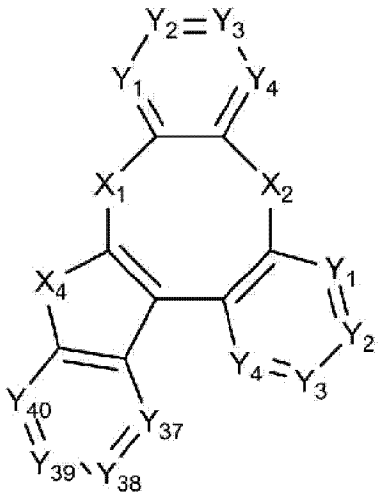
N-20



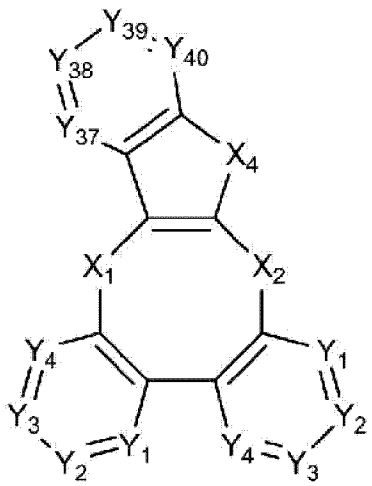
N-21



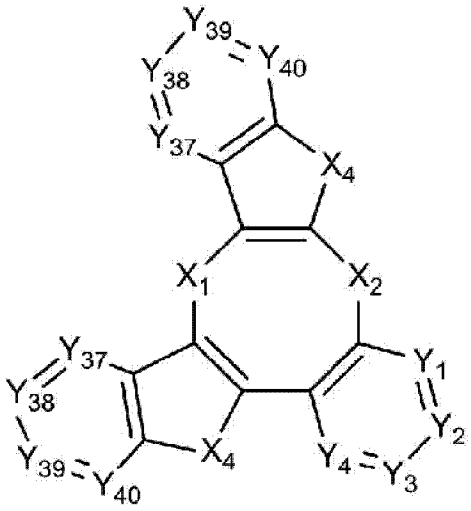
N-22



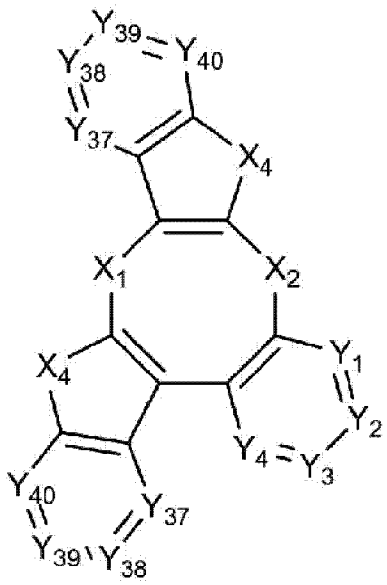
N-23



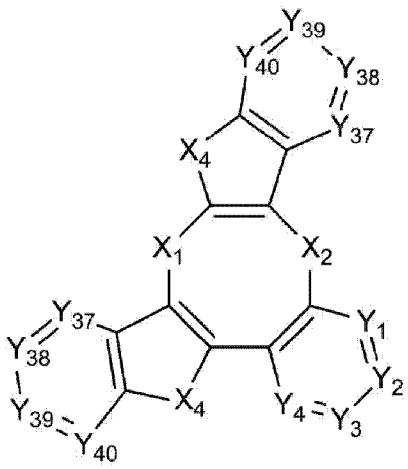
N-24



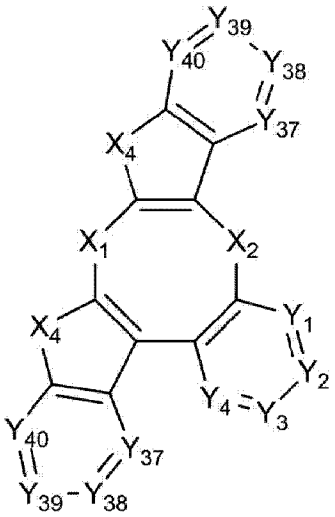
N-25



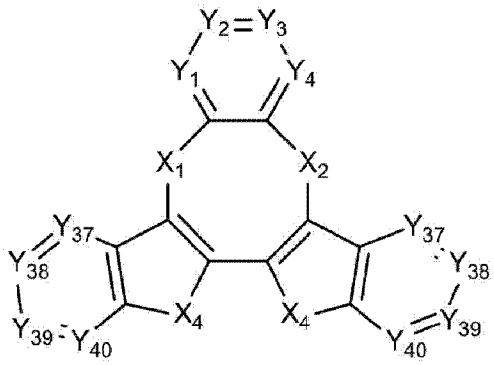
N-26



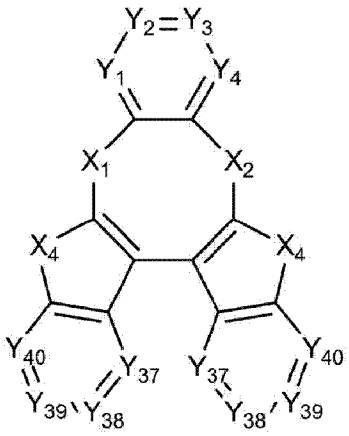
N-27



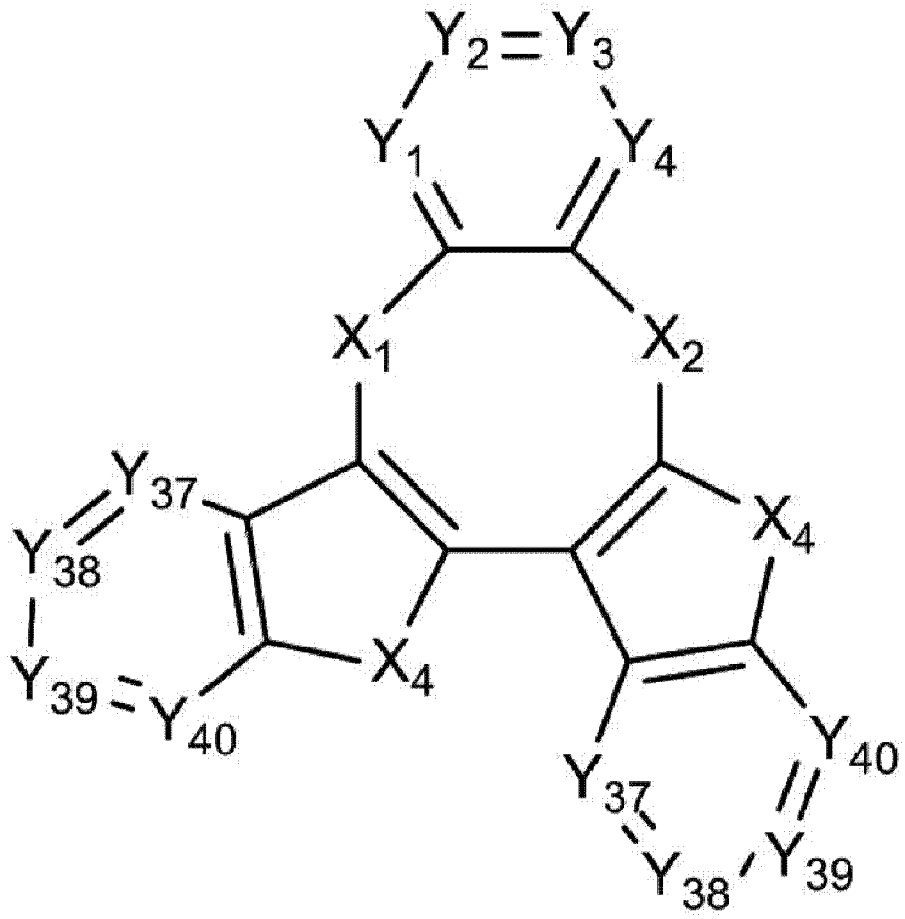
N-28



N-29



N-30



N-31

상기 화학식 N-1 내지 화학식 N-31에서,

X_1 내지 X_4 및 Y_1 내지 Y_{40}은 제1항에서 정의된 바와 같다.

[청구항 3] 제1항에 있어서,

상기 R_7은 C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기 및 C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기로 이루어진 군에서 선택되고, 상기 R_7이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며,

상기 R_7의 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴실릴기, 아릴포스파닐기 및 모노 또는 디아릴포스피닐기는 각각 독립적으로, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우 이들은 서로 동일하거나 상이한 화합물.

[청구항 4] 제3항에 있어서,

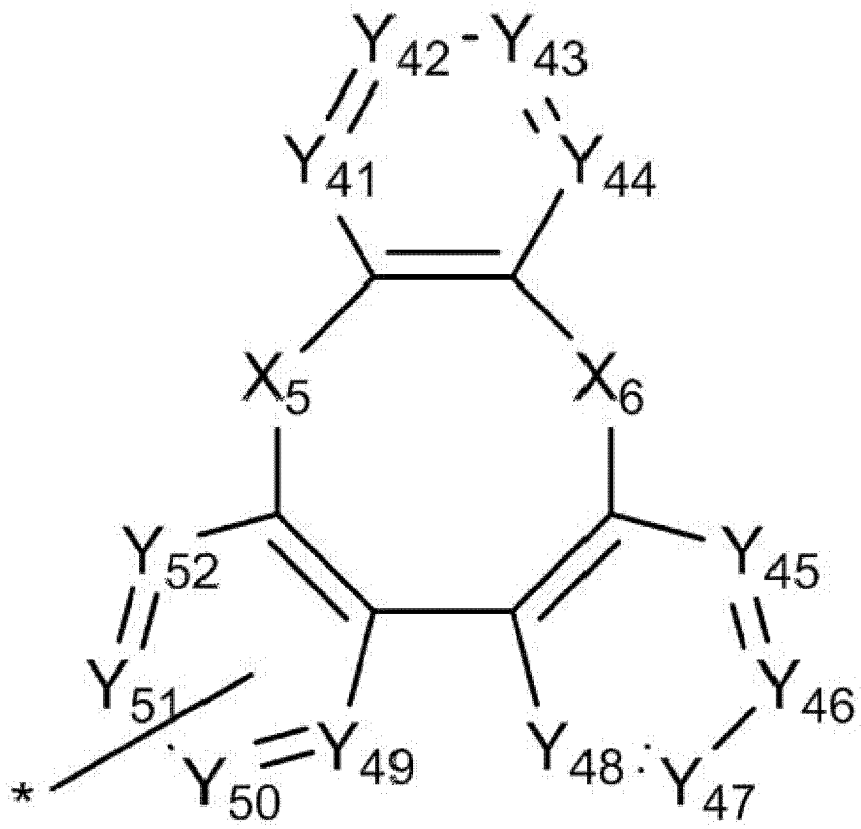
상기 R_7은 페닐기, 비페닐기, 트리페닐기, 나프탈렌, 트리페닐렌, 페난스렌, 카바졸, 디벤조[b,d]퓨란, 디벤조[b,d]티오펜, 플루오렌, 스피로비[플루오렌], 피리딘, 피리미딘, 트리아진, 디페닐포스피닐기, 트리페닐실릴기 및 퀴나졸린으로 이루어진 군으로부터 선택되고,

상기 R_7의 페닐기, 비페닐기, 트리페닐기, 나프탈렌, 트리페닐렌, 페난스렌, 카바졸, 디벤조[b,d]퓨란, 디벤조[b,d]티오펜, 플루오렌, 스피로비[플루오렌], 피리딘, 피리미딘, 트리아진, 디페닐포스피닐기, 트리페닐실릴기 및 퀴나졸린은 각각 독립적으로, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우 이들은 서로 동일하거나 상이한 화합물.

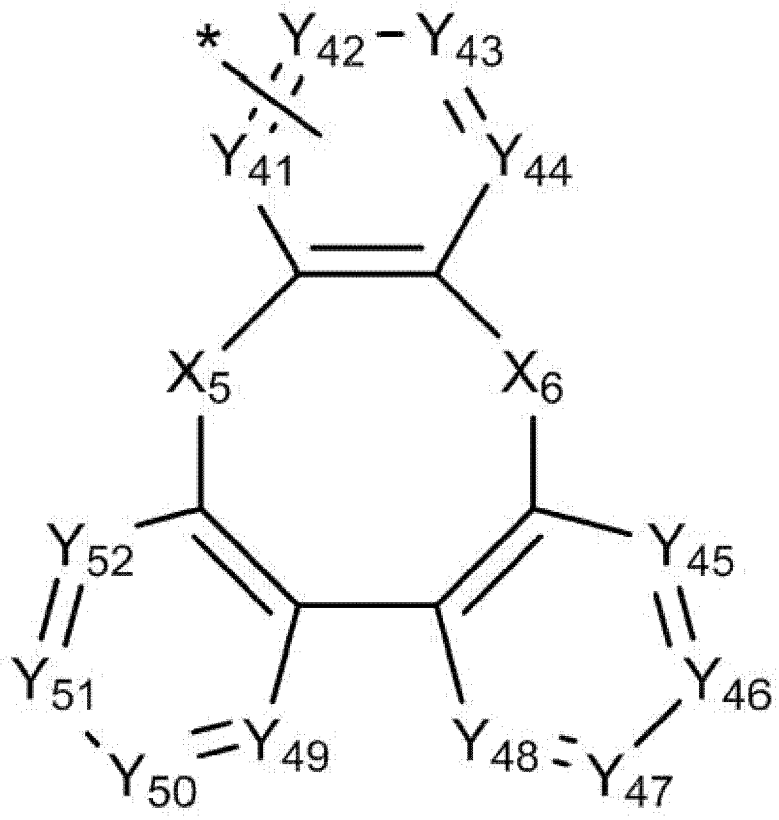
[청구항 5] 제1항에 있어서,

상기 R_7은 하기 화학식 10 또는 화학식 11로 표시되는 치환기인 것을 특징으로 하는 화합물:

[화학식 10]



[화학식 11]



상기 화학식 10 및 화학식 11에서,

*은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

X_5 및 X_6는 각각 독립적으로 O, S, Se, P, $N(Ar_6)$, $C(Ar_7)(Ar_8)$ 및 $Si(Ar_9)(Ar_{10})$으로 이루어진 군으로부터 선택되며;

Y_{41} 내지 Y_{52}는 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_8)$이며;

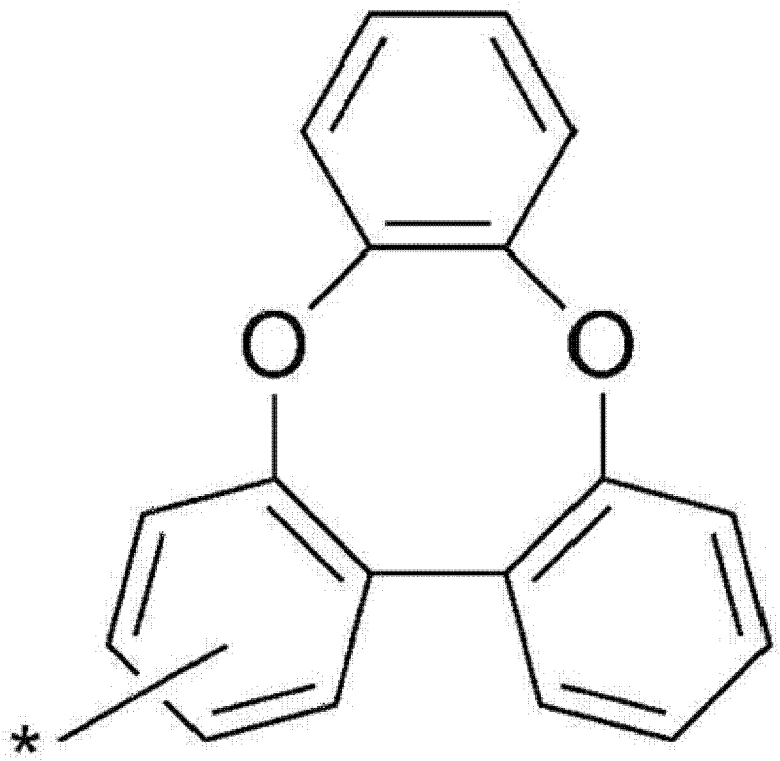
상기 화학식 10에서 화학식 1 내지 9에 결합되는 Y_{49} 내지 Y_{52} 중 어느 하나는 $C(R_8)$이고, 이때 상기 R_8은 부재이고, 상기 화학식 11에서 화학식 1 내지 9에 결합되는 Y_{41} 내지 Y_{44} 중 어느 하나는 $C(R_8)$이고, 이때 상기 R_8은 부재이며;

R_8은 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접한 각각의 R_8이 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R_8이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

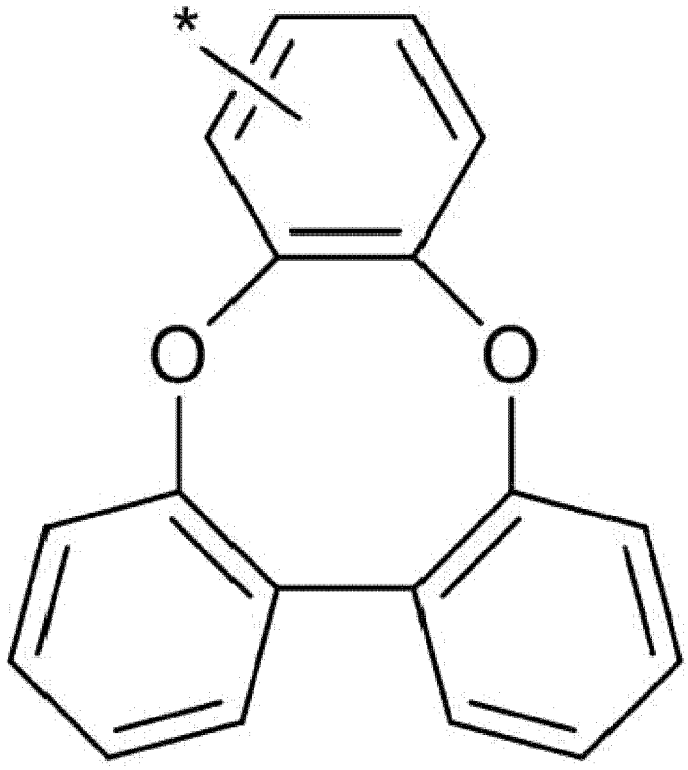
Ar_6 내지 Ar_{10}은 각각 독립적으로 C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 상기 Ar_6 내지 Ar_{10}이 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

상기 R_8 및 Ar_6 내지 Ar_{10}의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

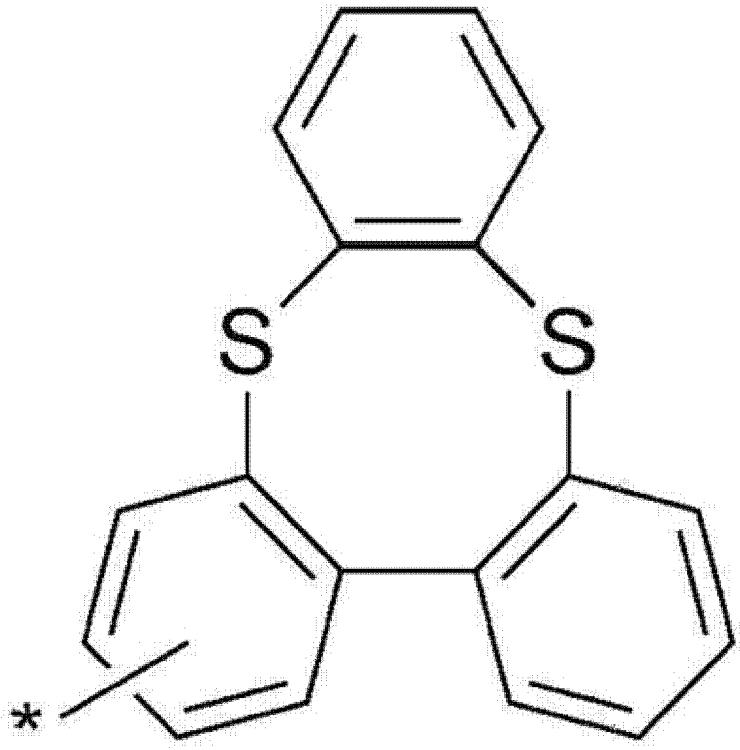
[청구항 6] 제1항에 있어서,
상기 R_7은 하기 화학식 12 내지 화학식 15 중 어느 하나로 표시되는 치환기인 것을 특징으로 하는 화합물:
[화학식 12]



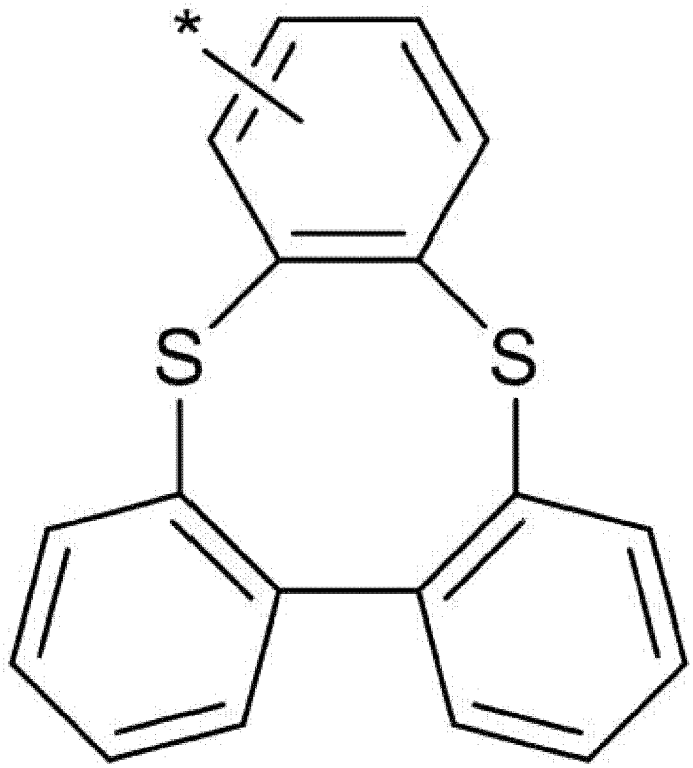
[화학식 13]



[화학식 14]



[화학식 15]



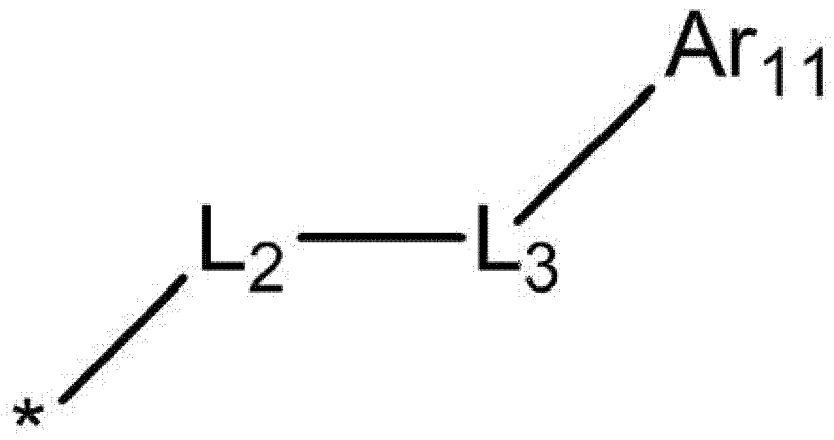
상기 화학식 12 내지 화학식 15에서,

*는 결합이 이루어지는 부분을 의미한다.

[청구항 7] 제1항에 있어서,

상기 R_7 및 내지 Ar_1 내지 Ar_5 중 적어도 하나는 하기 화학식 16으로 표시되는 치환기인 것을 특징으로 하는 화합물:

[화학식 16]



상기 화학식 16에서,

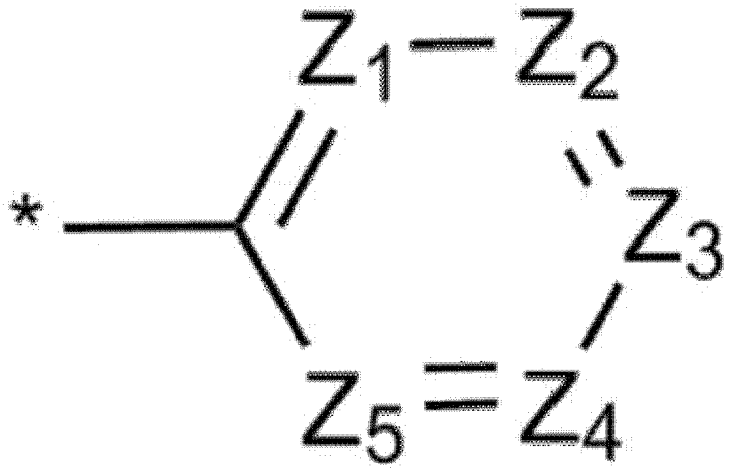
*는 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

L_2 및 L_3는 각각 독립적으로 단일결합, C_6~C_{18}의 아릴렌기 또는 핵원자수 5 내지 18개의 헤테로아릴렌기이며;

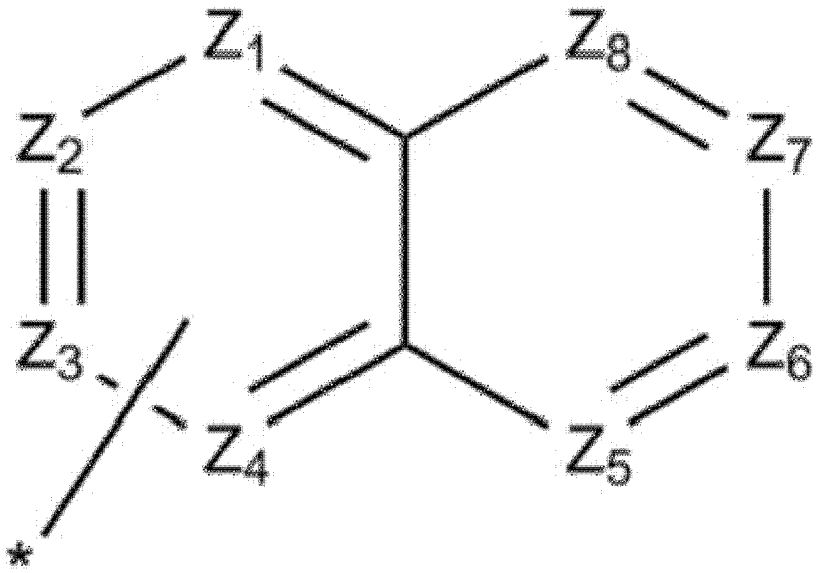
Ar_{11}은 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기 C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;
상기 L_2 및 L_3 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와, 상기 Ar_{11}의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[청구항 8] 제7항에 있어서,
상기 Ar_{11}은 하기 화학식 17 내지 화학식 24 중 어느 하나로 표시되는 치환기인 화합물:

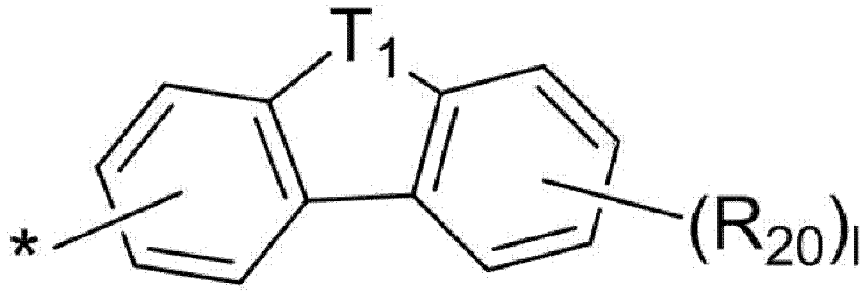
[화학식 17]



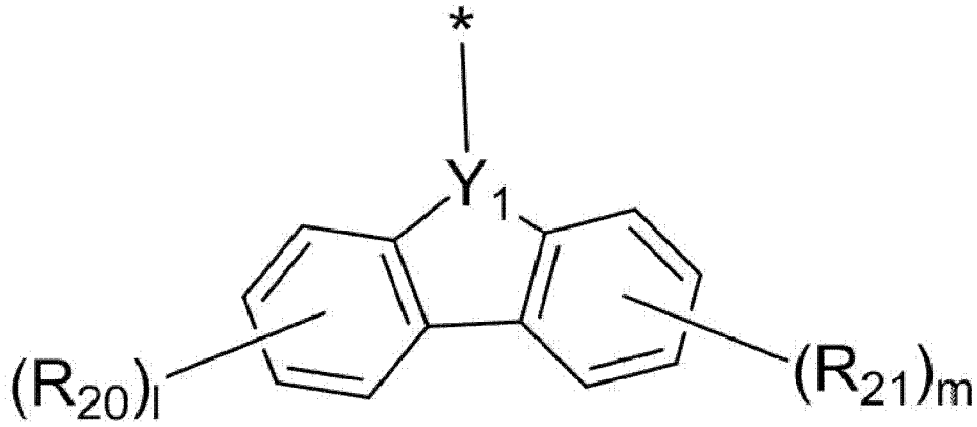
[화학식 18]



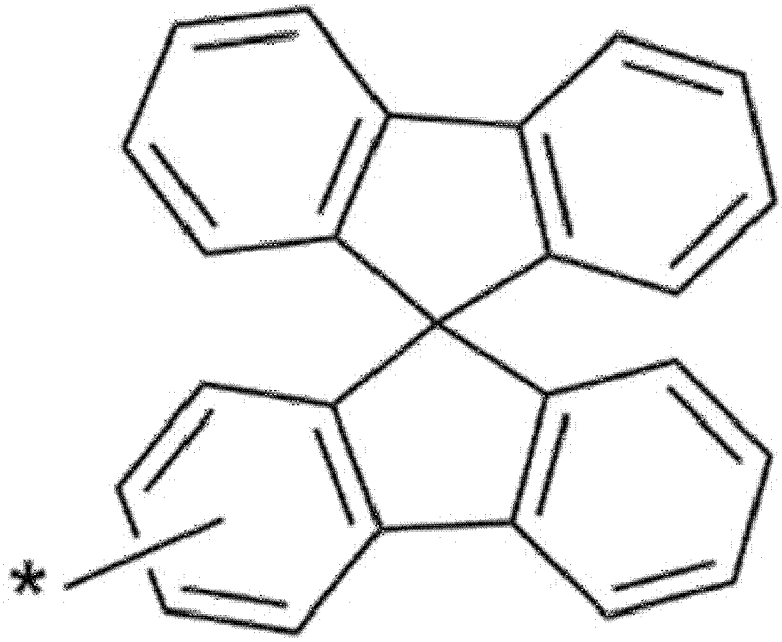
[화학식 19]



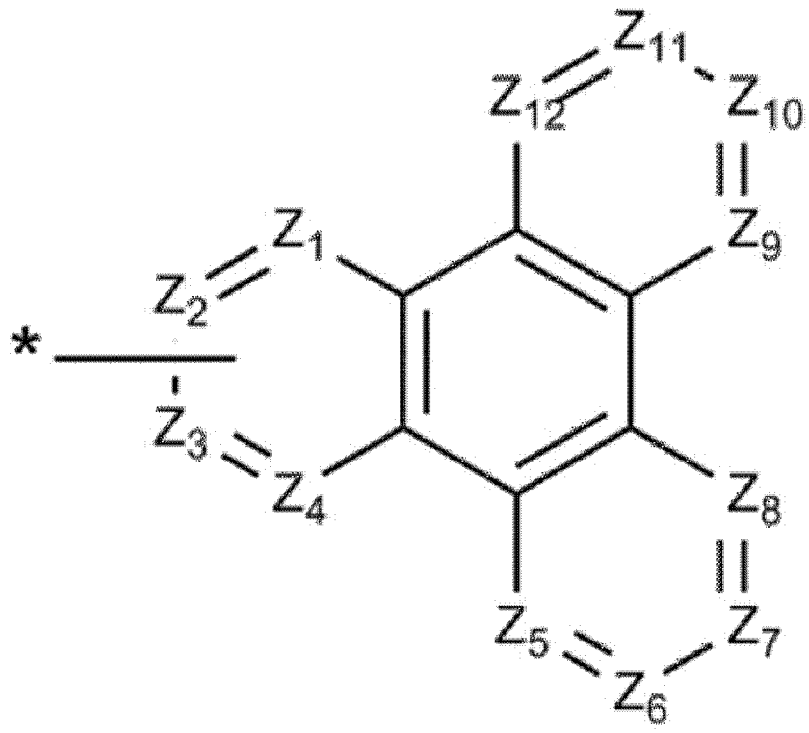
[화학식 20]



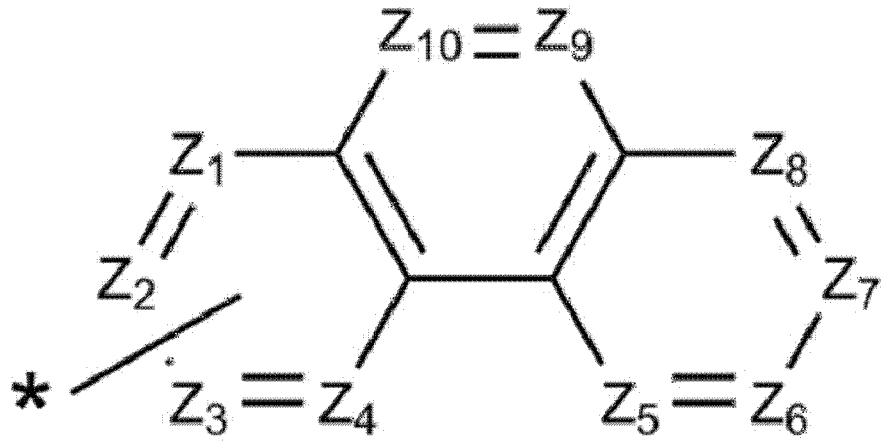
[화학식 21]



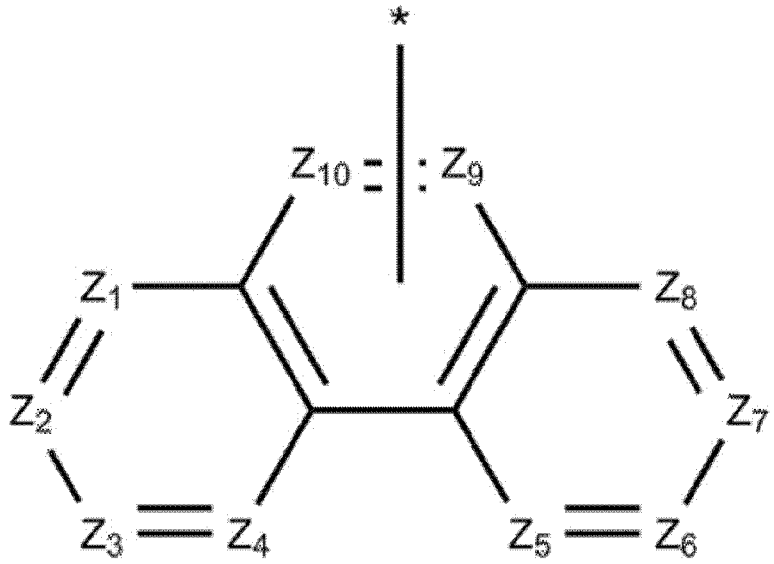
[화학식 22]



[화학식 23]



[화학식 24]



상기 화학식 17 내지 화학식 24에서,

*은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고:

l 및 m은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며;

R_{20} 및 R_{21}은 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R_{20} 및 R_{21} 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

Z_1 내지 Z_{12}는 각각 독립적으로 N 또는 C(R_{22})이며;

상기 화학식 22 및 23에서 L_3와 결합되는 Z_1 내지 Z_4 중 어느 하나는 $C(R_{22})$이나, 이때 상기 R_{22}는 부재이고, 상기 화학식 24에서 L_3와 결합되는 Z_9 또는 Z_{10}은 $C(R_{22})$이고, 이때 상기 R_{22}는 부재이며;

T_1은 O, S, $N(R_{23})$ 또는 $C(R_{24})(R_{25})$이며;

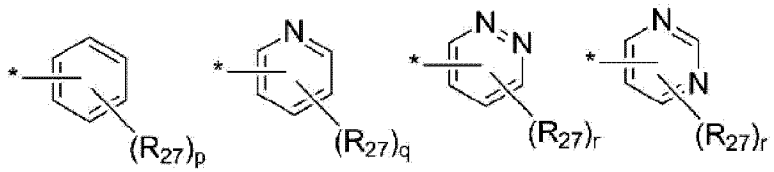
Y_1은 N 또는 $C(R_{26})$이며;

R_{22} 내지 R_{26}은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R_{22}가 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

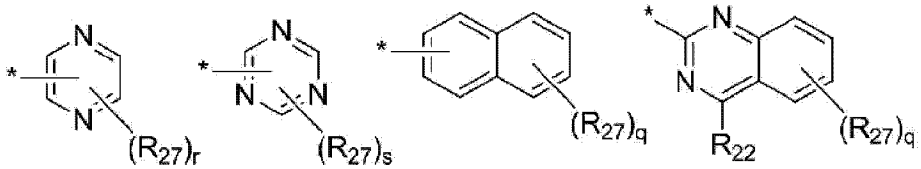
상기 R_{20} 내지 R_{26}의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[청구항 9] 제7항에 있어서,

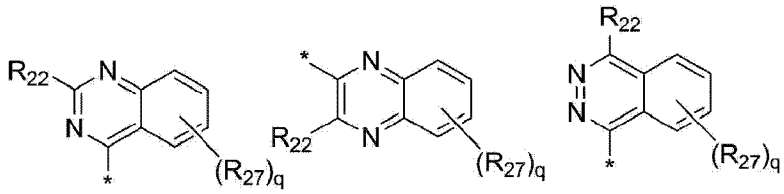
상기 Ar_{11}은 하기 화학식 F-1 내지 화학식 F-22 중 어느 하나로 표시되는 치환기인 화합물:



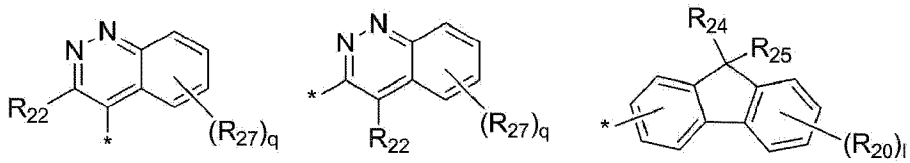
F-1 F-2 F-3 F-4



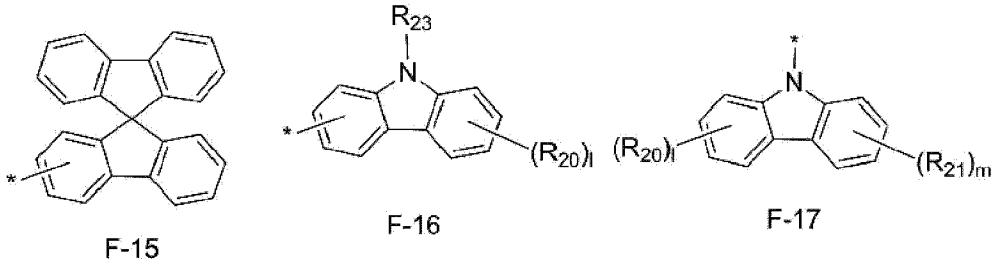
F-5 F-6 F-7 F-8



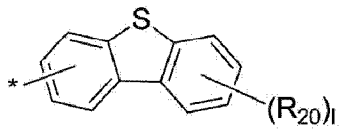
F-9 F-10 F-11



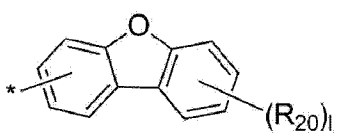
F-12 F-13 F-14



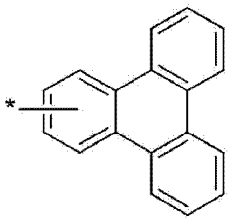
F-15 F-16 F-17



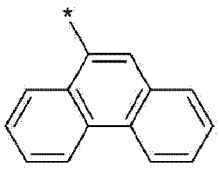
F-18



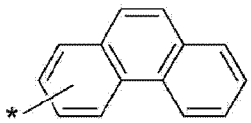
F-19



F-20



F-21



F-22

상기 화학식 F-1 내지 화학식 F-22에서,

*은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

p는 0 내지 5의 정수이고;

l, m 및 q는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며;

r은 0 내지 3의 정수이며;

s는 0 내지 2의 정수이며;

R_{20}, R_{21} 및 R_{27}은 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R_{20}, R_{21} 및 R_{27} 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

R_{22} 내지 R_{26}은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

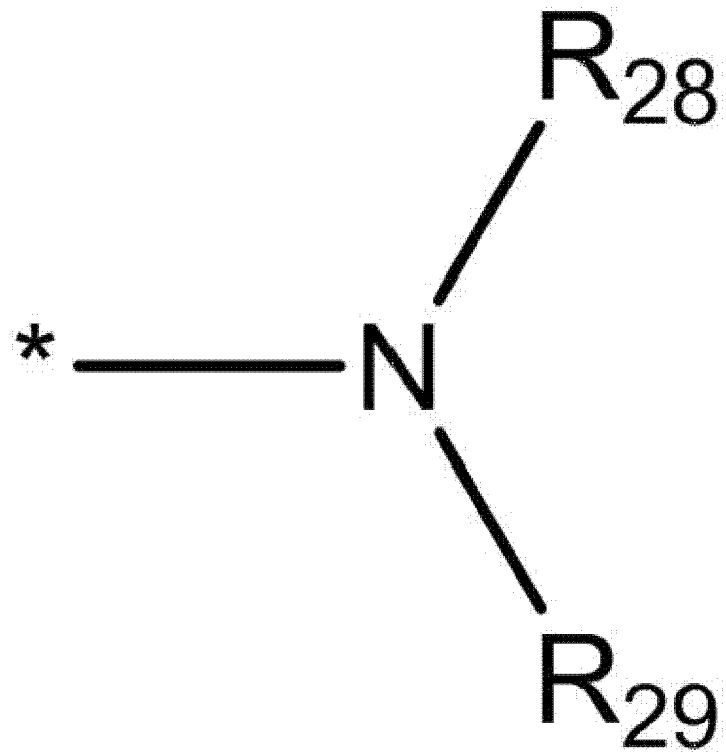
상기 R_{20} 내지 R_{27}의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기,

아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

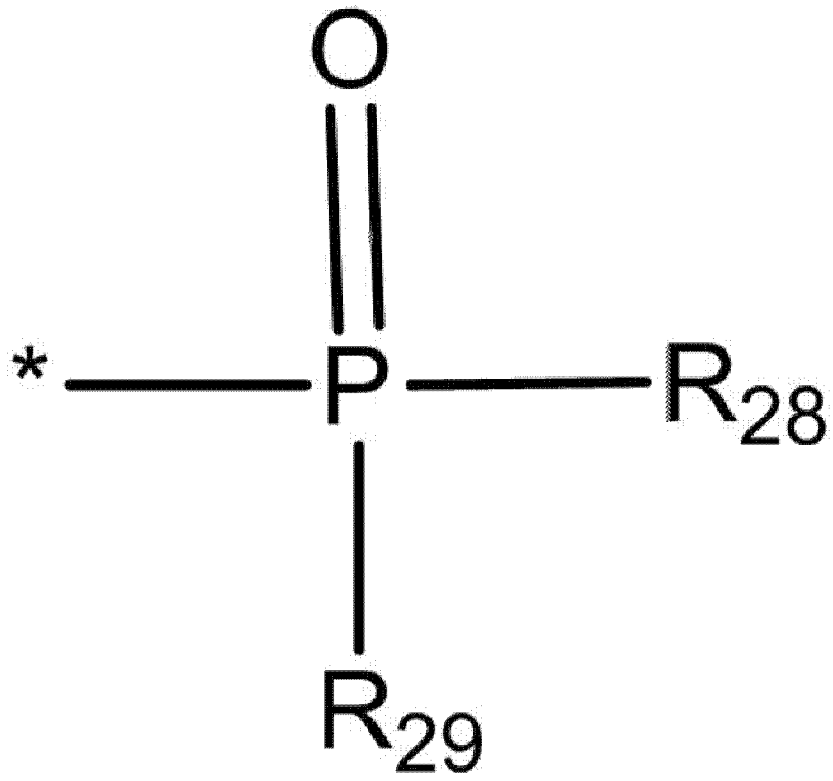
[청구항 10] 제7항에 있어서,

상기 Ar_{11}은 하기 화학식 25 내지 화학식 27 중 어느 하나로 표시되는 치환기인 화합물:

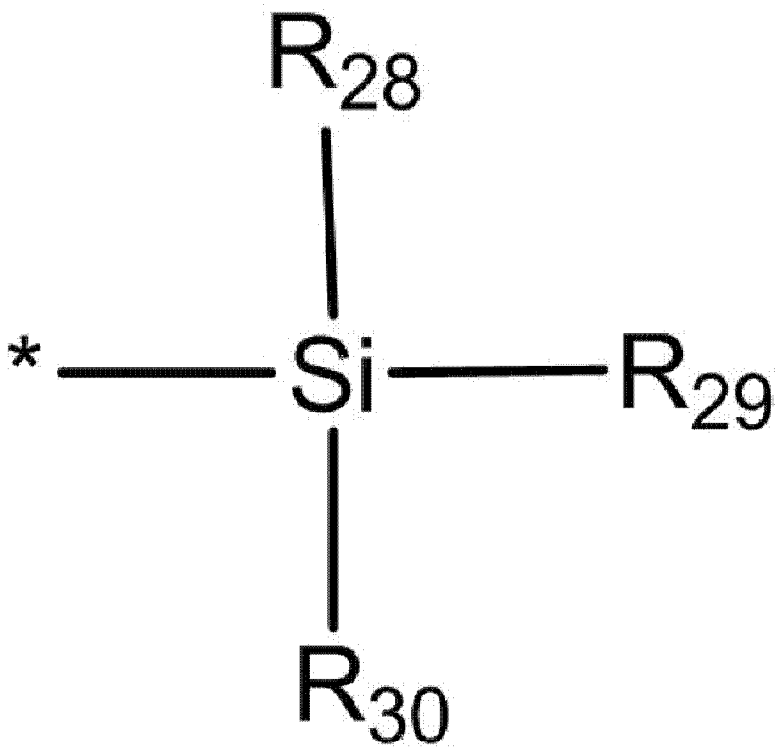
[화학식 25]



[화학식 26]



[화학식 27]



상기 화학식 25 내지 화학식 27에서,
*는 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

R_{28} 내지 R_{30}은 각각 독립적으로 C_1~C_{40}의 알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 상기 R_{28} 및 R_{29} 또는 R_{29} 및 R_{30}이 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

상기 R_{28} 내지 R_{30}의 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[청구항 11] 제7항에 있어서,

상기 L_2 및 L_3는 각각 독립적으로 단일결합, 페닐렌기, 비페닐렌기, 피리미디닐기 및 카바졸릴기로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.

[청구항 12] 제10항에 있어서,

상기 R_{28} 내지 R_{30}은 각각 독립적으로 C_6~C_{60}의 아릴기 또는 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기이고,

상기 R_{28} 내지 R_{30}의 아릴기 및 헤테로아릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이한 화합물.

[청구항 13] 제10항에 있어서,

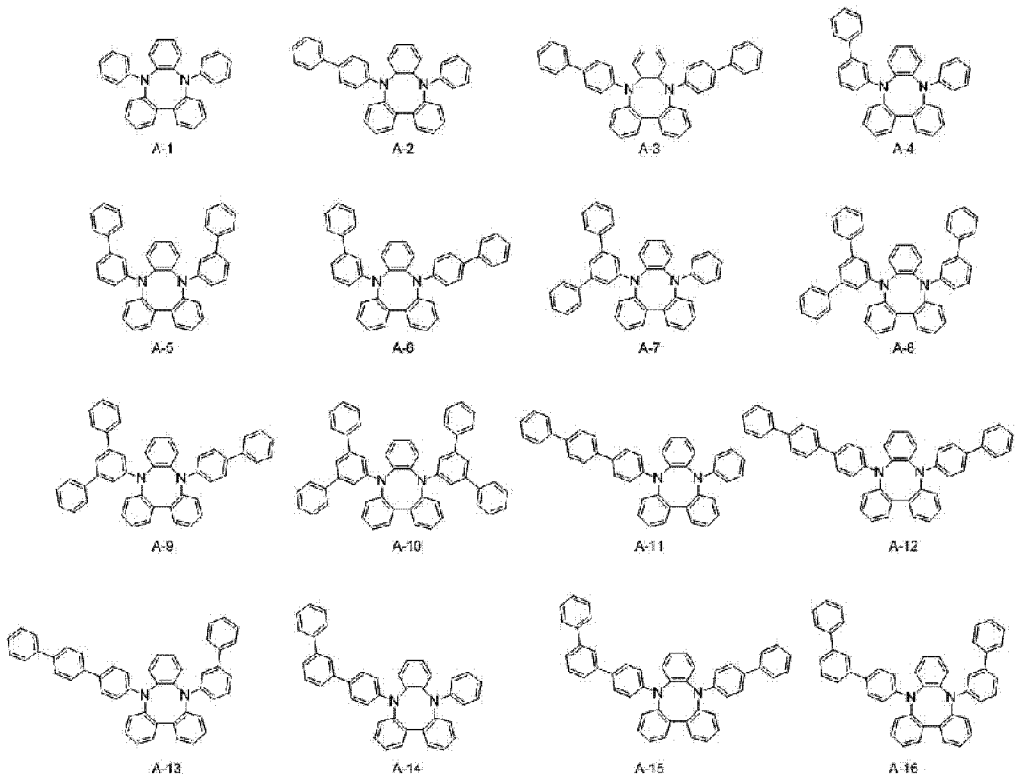
상기 R_{28} 내지 R_{30}은 각각 독립적으로 페닐기, 비페닐기, 플루오렌 및 나프탈렌으로 이루어진 군에서 선택되며,

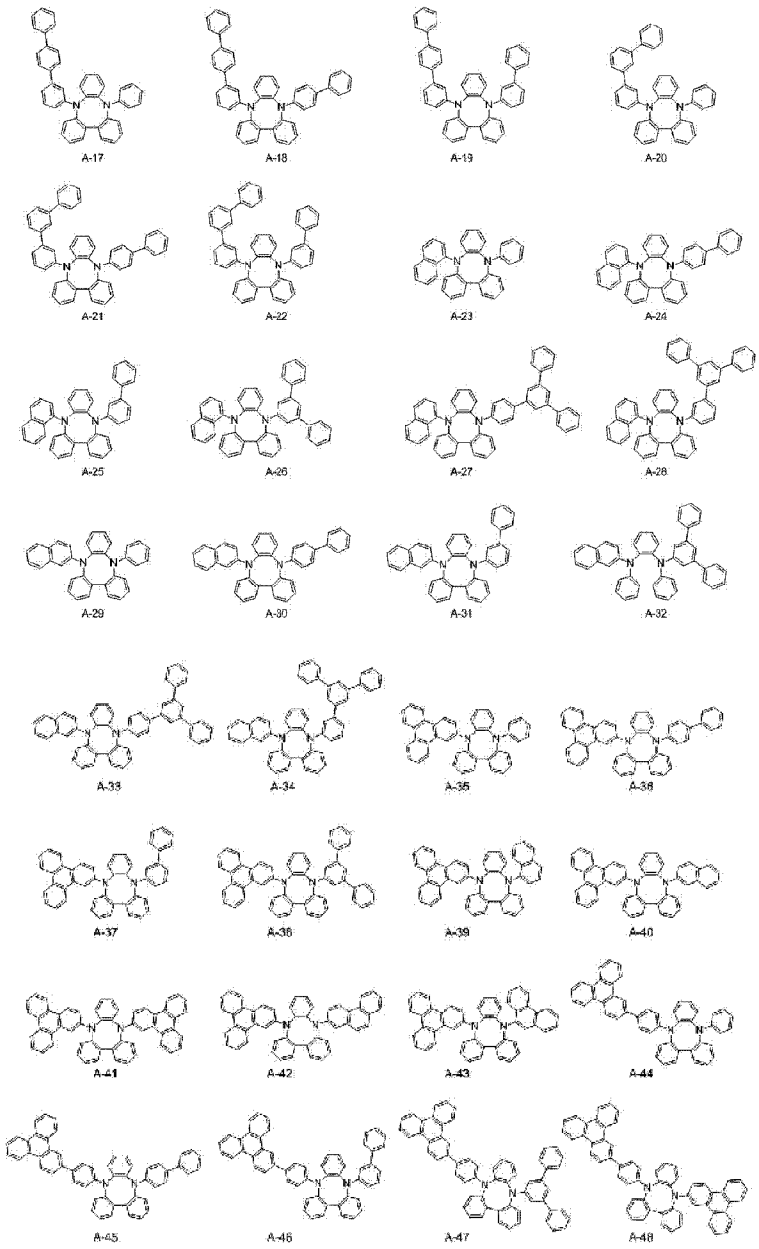
상기 R_{28} 내지 R_{30}의 페닐기, 비페닐기, 플루오렌기 및 나프탈렌은 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}

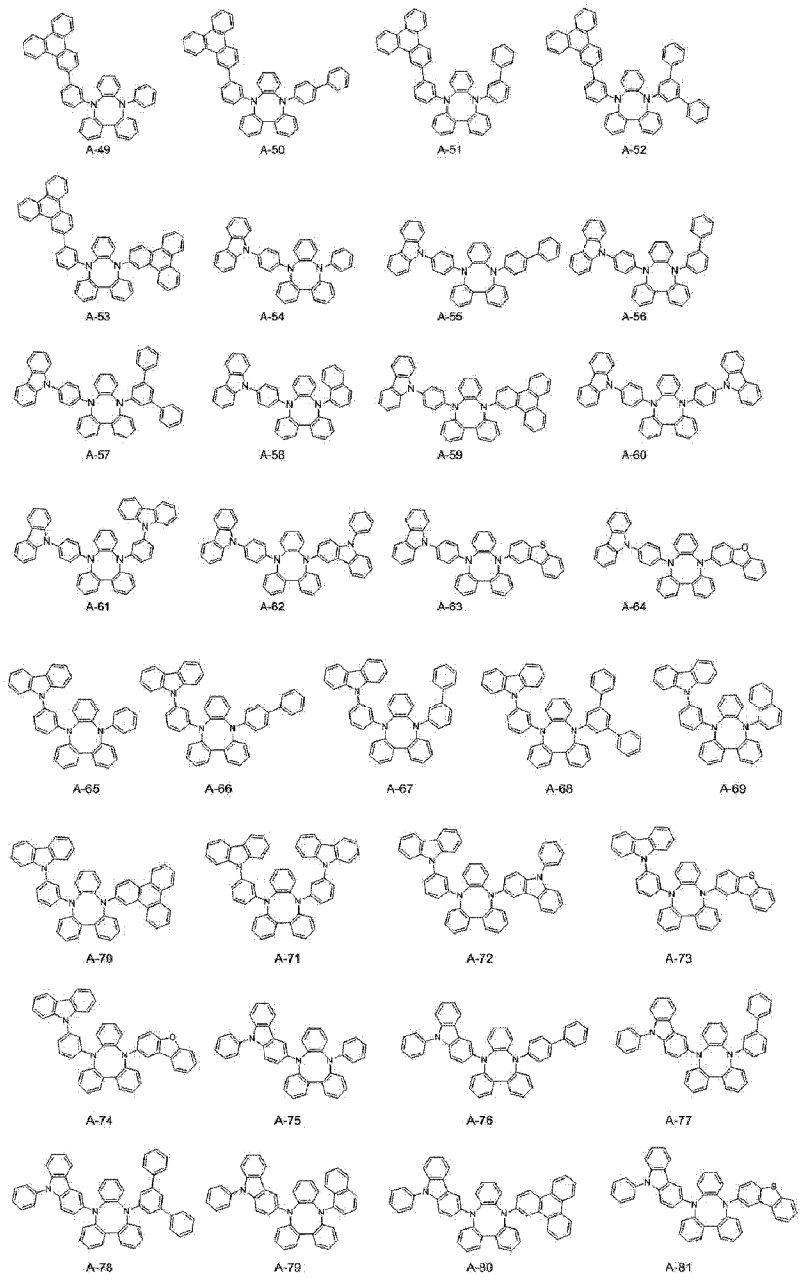
의 아릴아민기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이한 화합물.

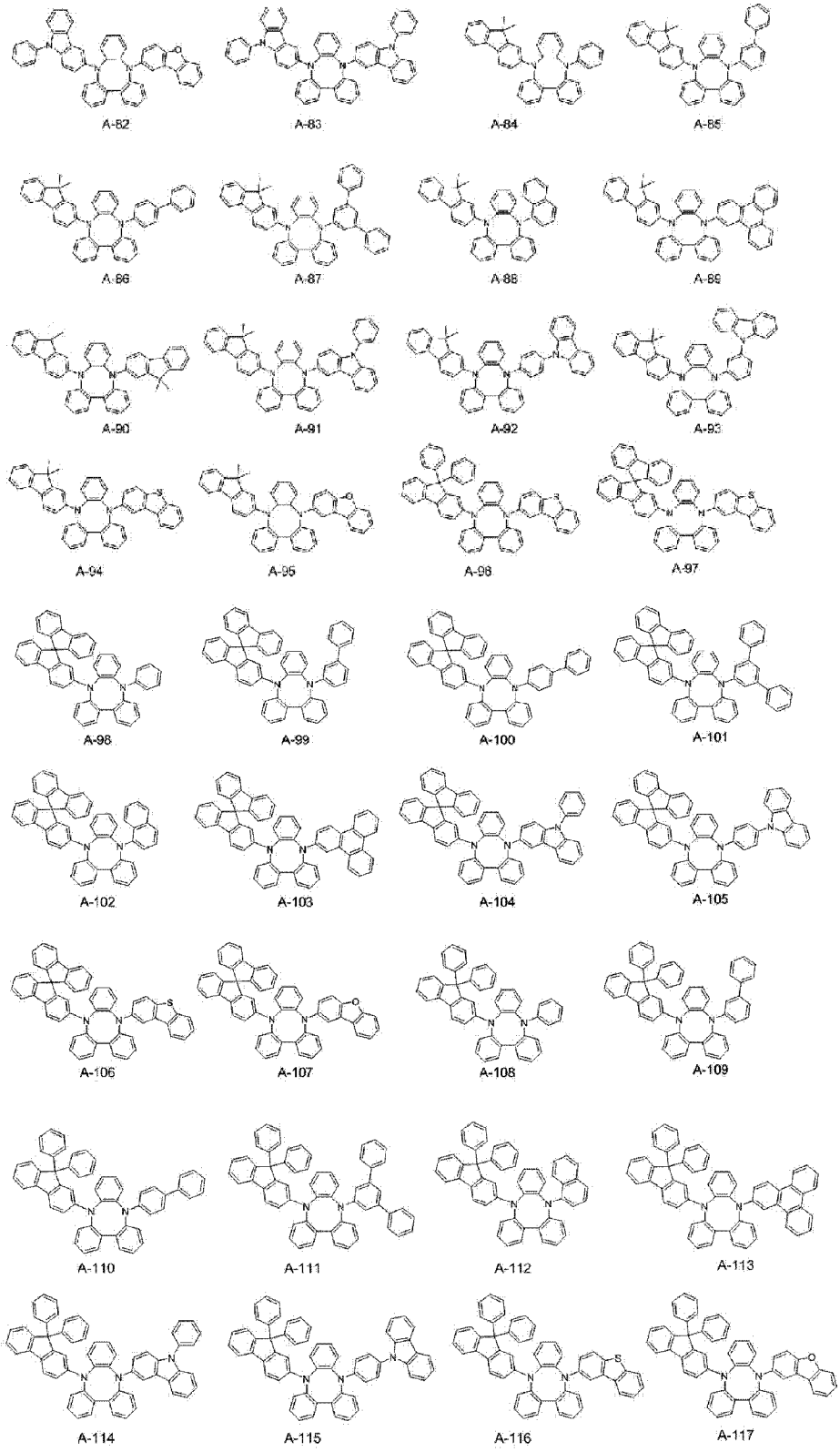
[청구항 14] 제1항에 있어서,

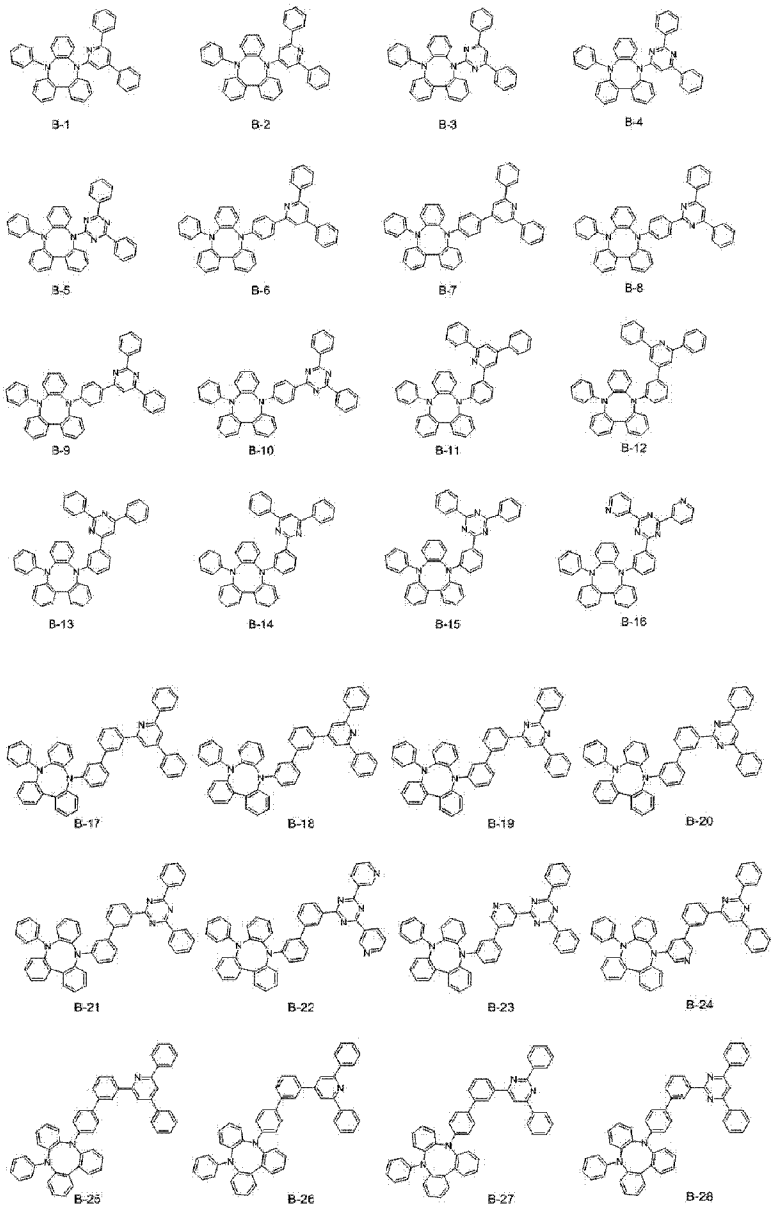
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 아래의 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:

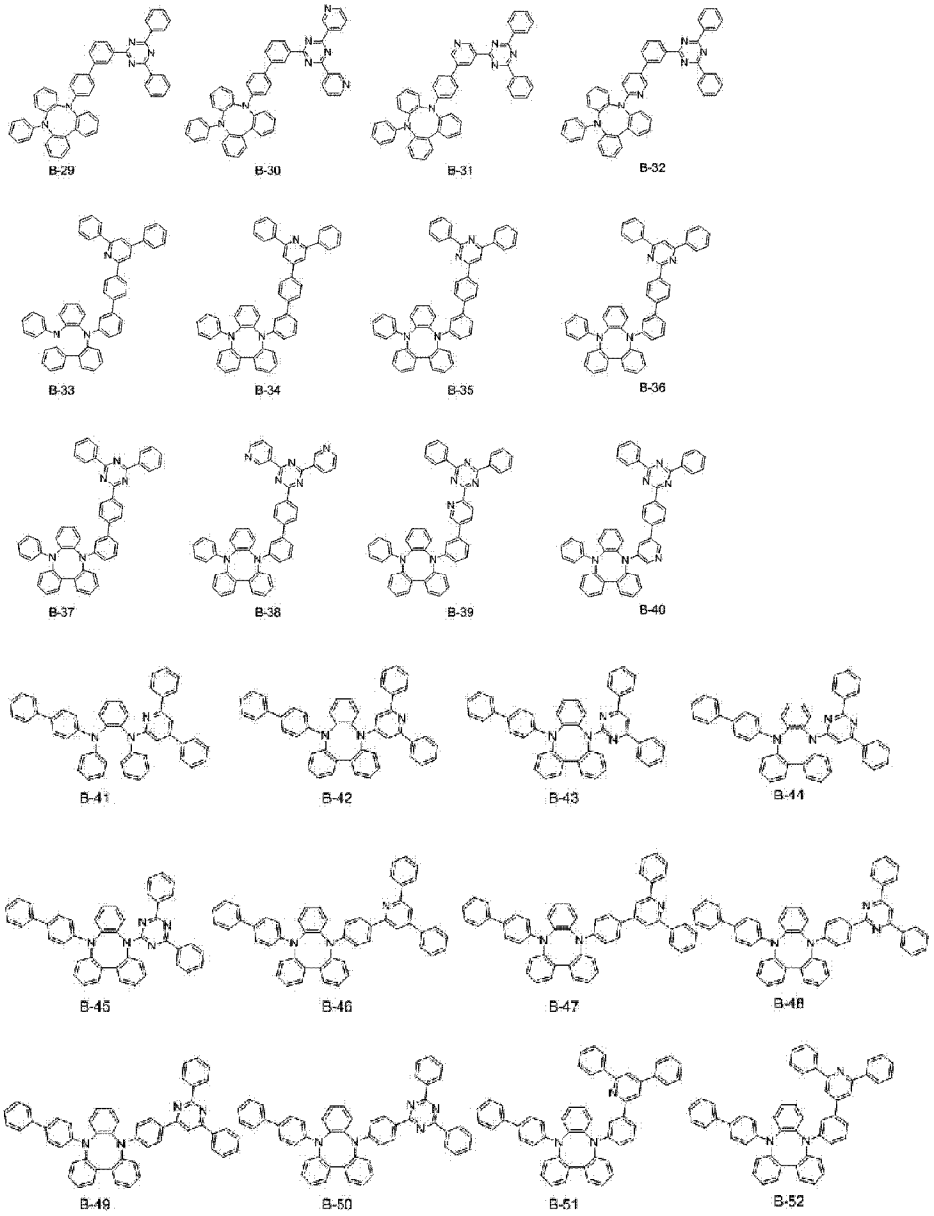


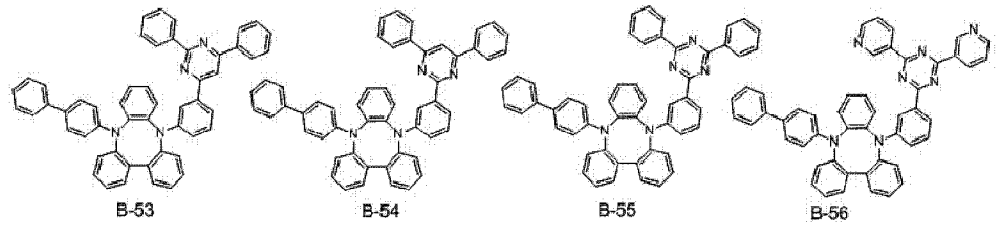

A-17
A-18
A-19
A-20
A-21
A-22
A-23
A-24
A-25
A-26
A-27
A-28
A-29
A-30
A-31
A-32
A-33
A-34
A-35
A-36
A-37
A-38
A-39
A-40
A-41
A-42
A-43
A-44
A-45
A-46
A-47
A-48

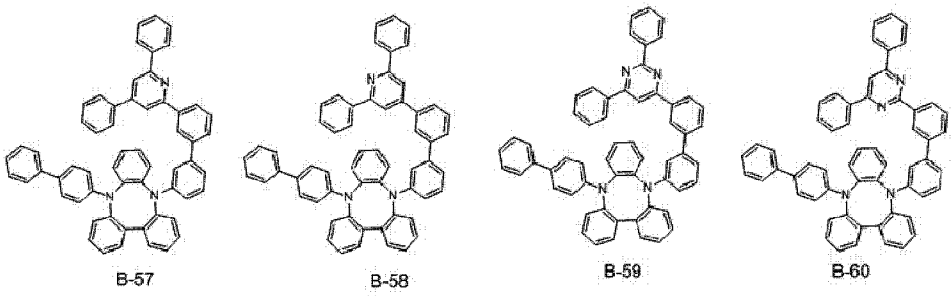

A-49
A-50
A-51
A-52
A-53
A-54
A-55
A-56
A-57
A-58
A-59
A-60
A-61
A-62
A-63
A-64
A-65
A-66
A-67
A-68
A-69
A-70
A-71
A-72
A-73
A-74
A-75
A-76
A-77
A-78
A-79
A-80
A-81

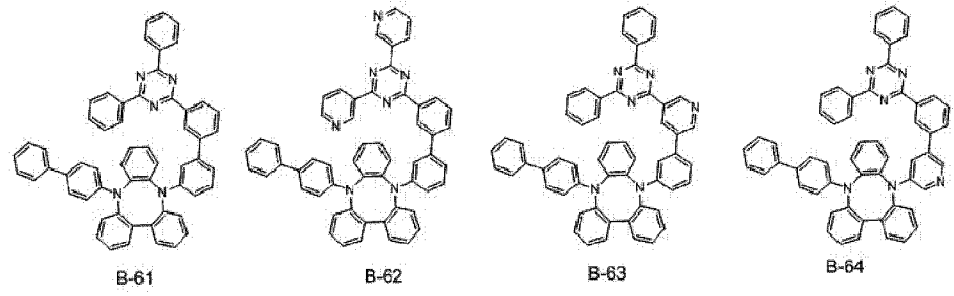

A-82
A-83
A-84
A-85
A-86
A-87
A-88
A-89
A-90
A-91
A-92
A-93
A-94
A-95
A-96
A-97
A-98
A-99
A-100
A-101
A-102
A-103
A-104
A-105
A-106
A-107
A-108
A-109
A-110
A-111
A-112
A-113
A-114
A-115
A-116
A-117

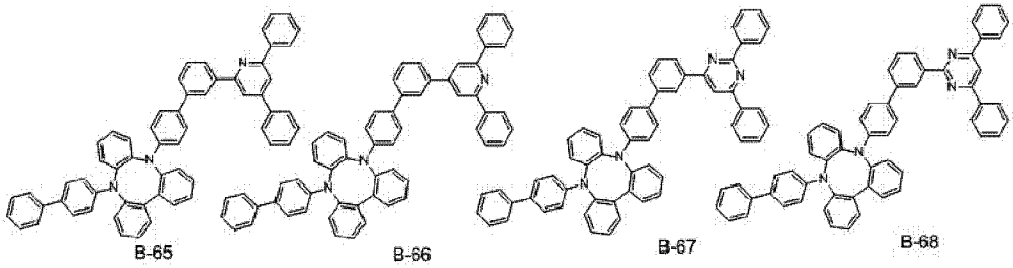

B-1
B-2
B-3
B-4
B-5
B-6
B-7
B-8
B-9
B-10
B-11
B-12
B-13
B-14
B-15
B-16
B-17
B-18
B-19
B-20
B-21
B-22
B-23
B-24
B-25
B-26
B-27
B-28

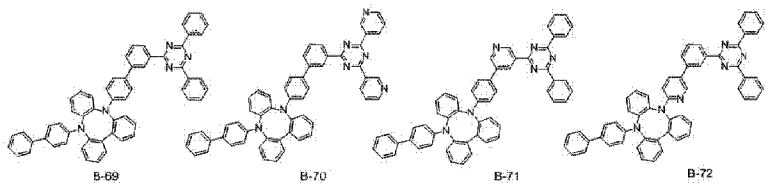

B-29
B-30
B-31
B-32
B-33
B-34
B-35
B-36
B-37
B-38
B-39
B-40
B-41
B-42
B-43
B-44
B-45
B-46
B-47
B-48
B-49
B-50
B-51
B-52

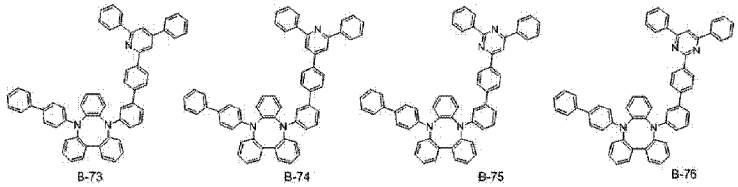

B-53 B-54 B-55 B-56

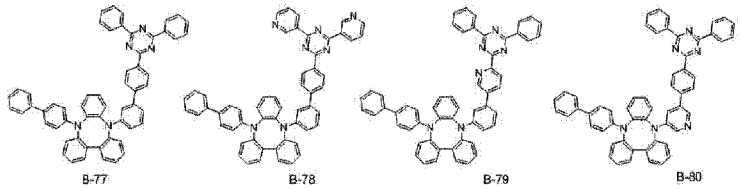

B-57 B-58 B-59 B-60

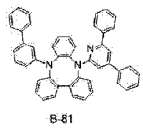

B-61 B-62 B-63 B-64

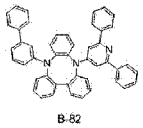

B-65 B-66 B-67 B-68

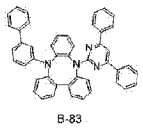

B-69 B-70 B-71 B-72

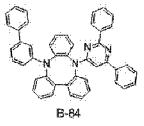

B-73 B-74 B-75 B-76

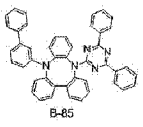

B-77 B-78 B-79 B-80

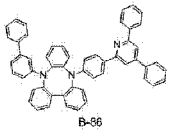

B-81

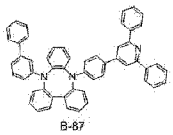

B-82

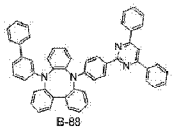

B-83

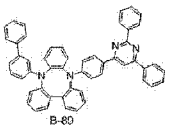

B-84

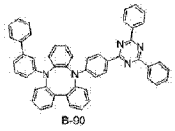

B-85

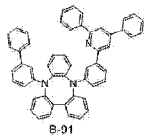

B-86

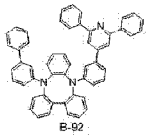

B-87

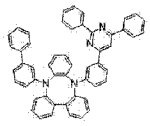

B-88

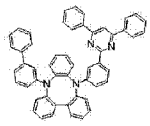

B-89

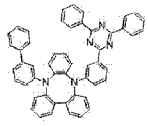

B-90

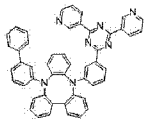

B-91

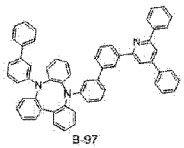

B-92

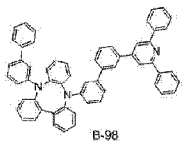

B-93

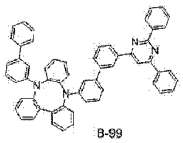

B-94

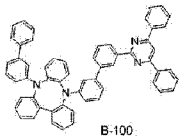

B-95

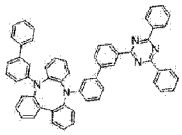

B-96

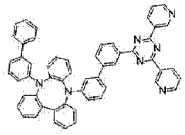

B-97

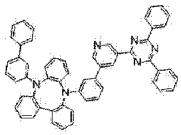

B-98

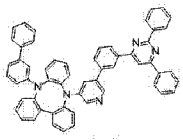

B-99

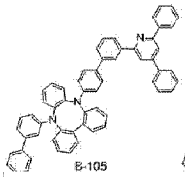

B-100

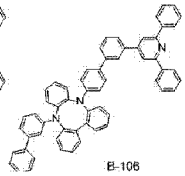

B-101

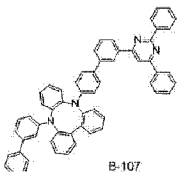

B-102

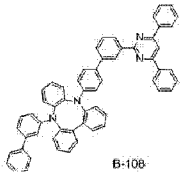

B-103

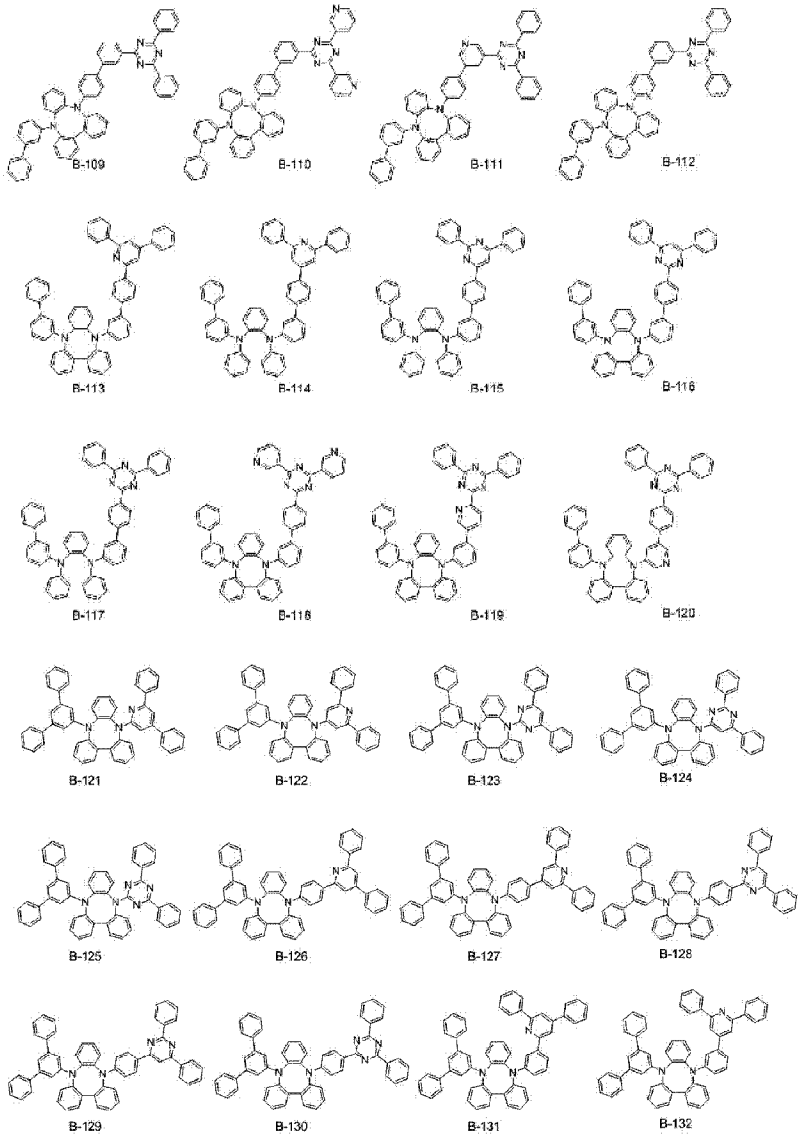

B-104

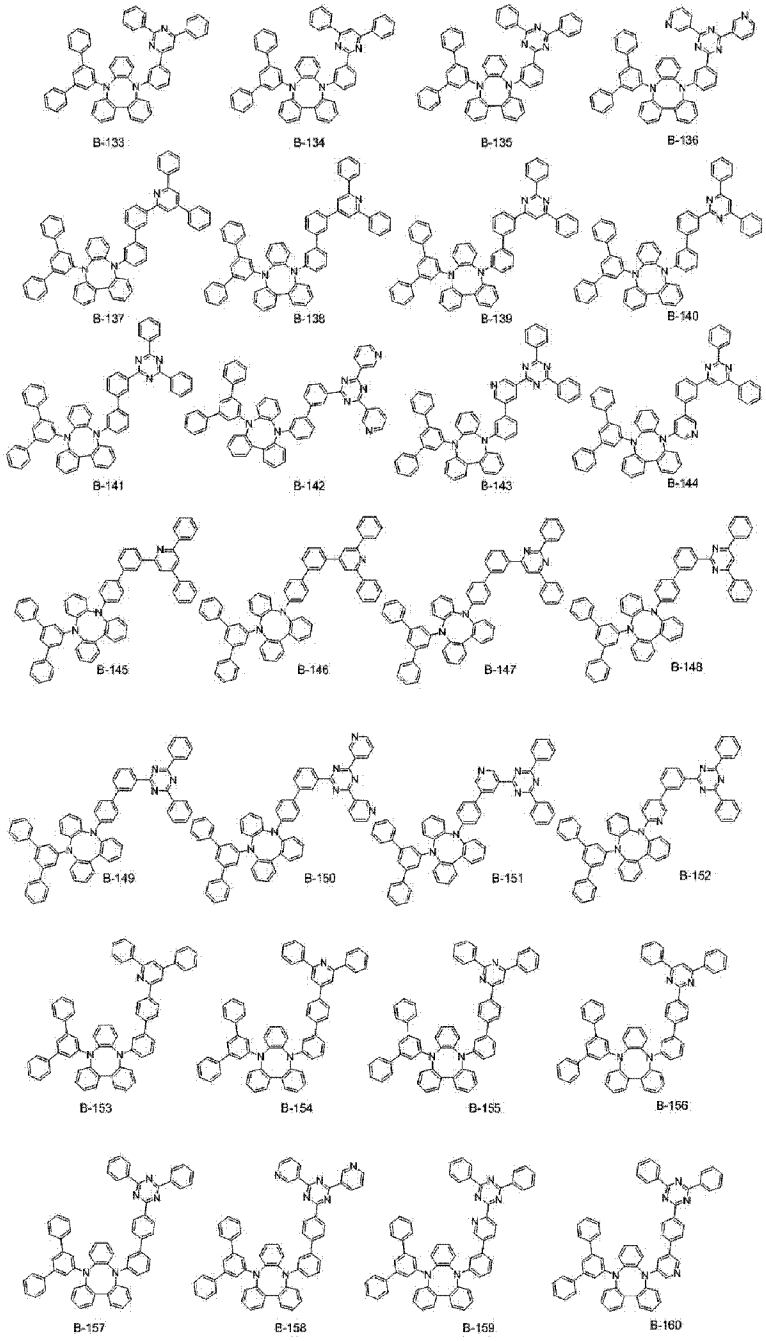

B-105

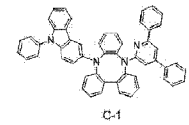

B-106

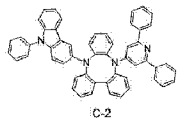

B-107

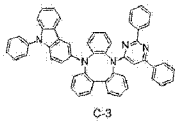

B-108

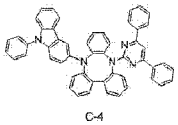

B-109
B-110
B-111
B-112
B-113
B-114
B-115
B-116
B-117
B-118
B-119
B-120
B-121
B-122
B-123
B-124
B-125
B-126
B-127
B-128
B-129
B-130
B-131
B-132

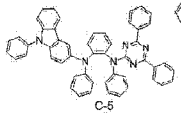

B-133
B-134
B-135
B-136
B-137
B-138
B-139
B-140
B-141
B-142
B-143
B-144
B-145
B-146
B-147
B-148
B-149
B-150
B-151
B-152
B-153
B-154
B-155
B-156
B-157
B-158
B-159
B-160

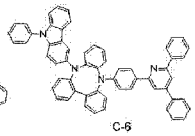

C-1

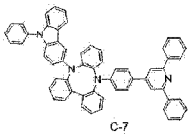

C-2

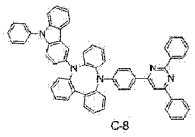

C-3

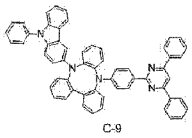

C-4

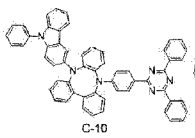

C-5

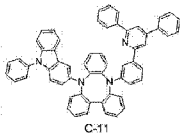

C-6

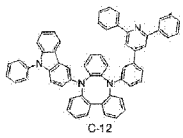

C-7

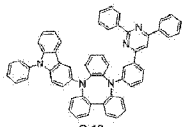

C-8

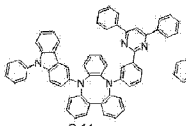

C-9

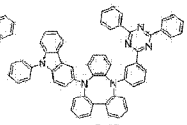

C-10

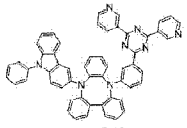

C-11

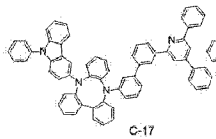

C-12

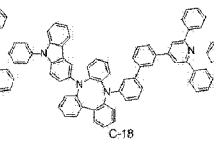

C-13

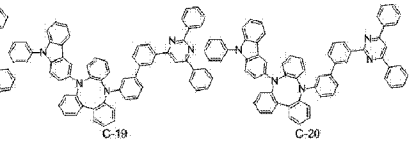

C-14


C-15

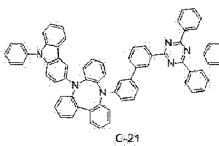

C-16

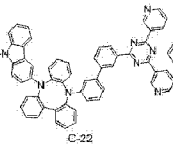

C-17

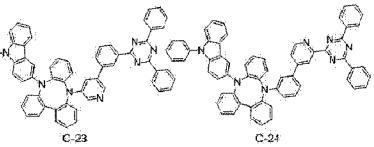

C-18


C-19

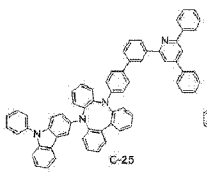
C-20

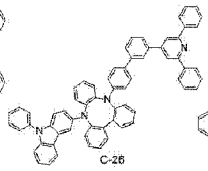

C-21

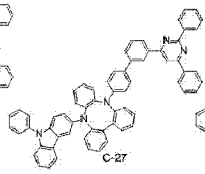

C-22

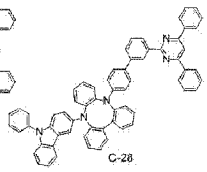

C-23

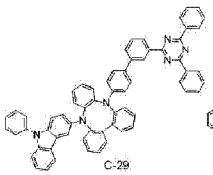
C-24

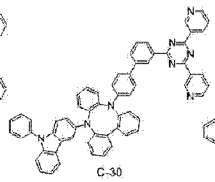

C-25

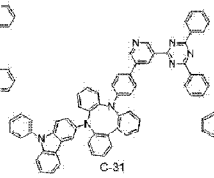

C-26

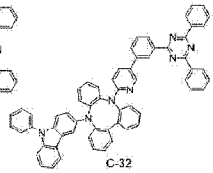

C-27

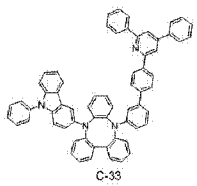

C-28

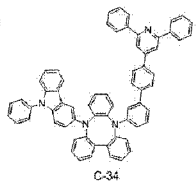

C-29

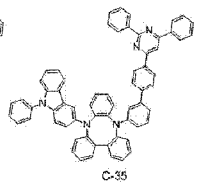

C-30

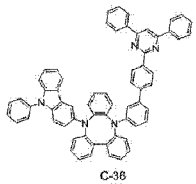

C-31

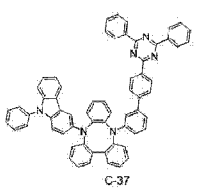

C-32

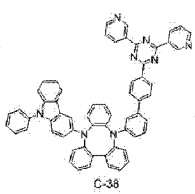

C-33

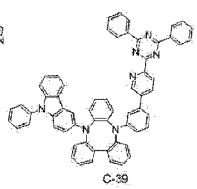

C-34

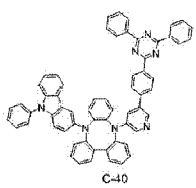

C-35

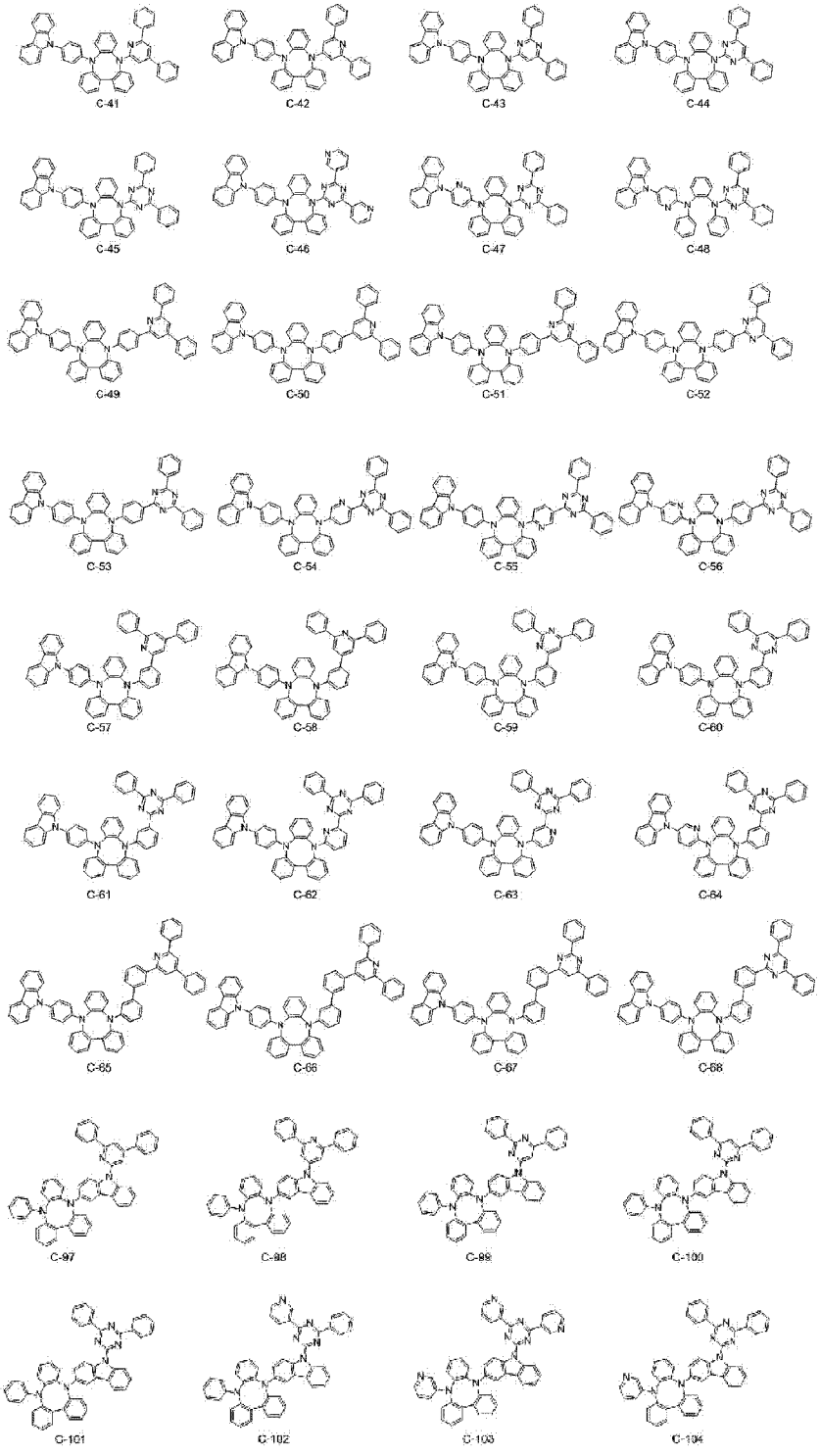

C-36

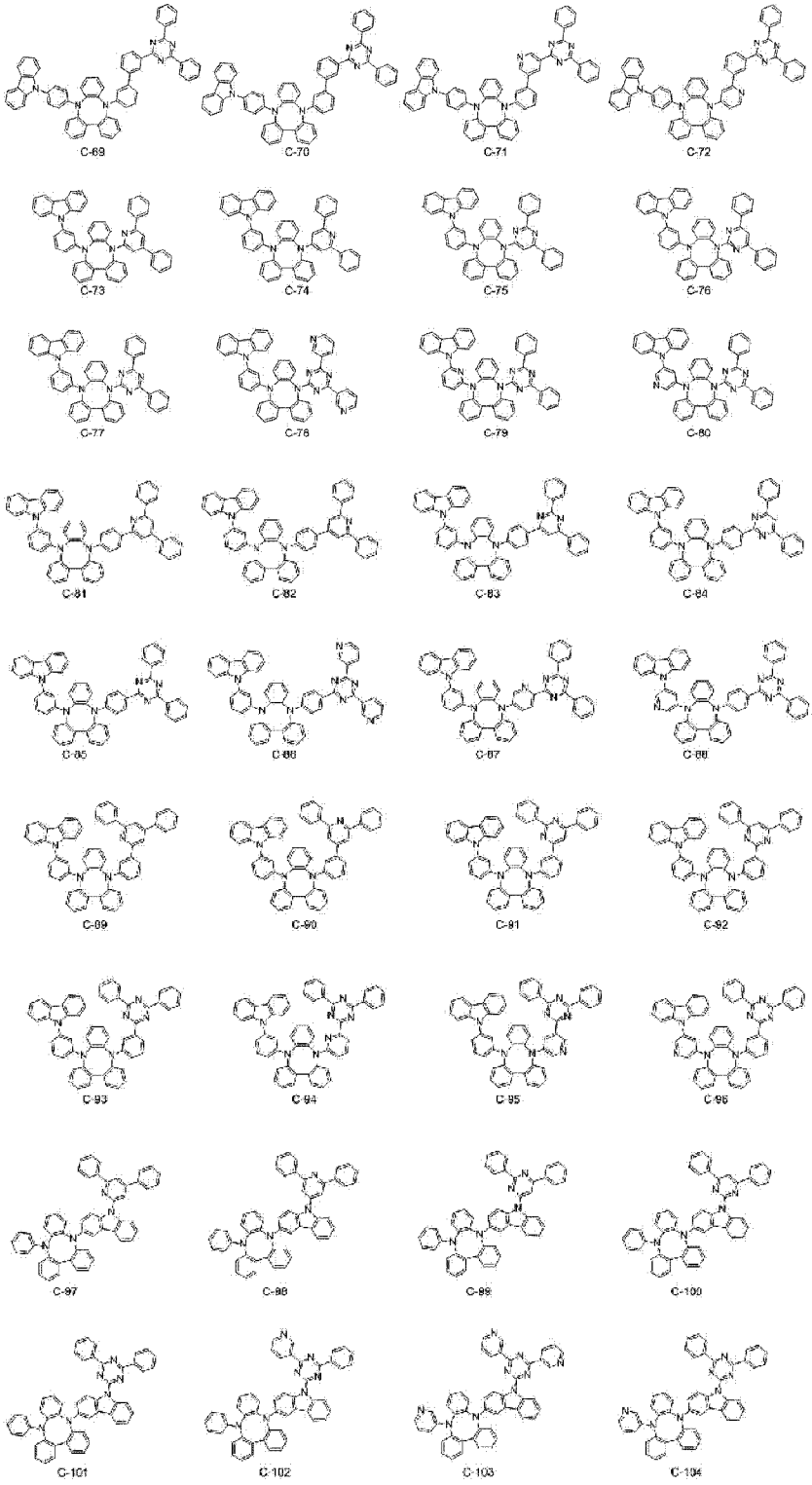

C-37

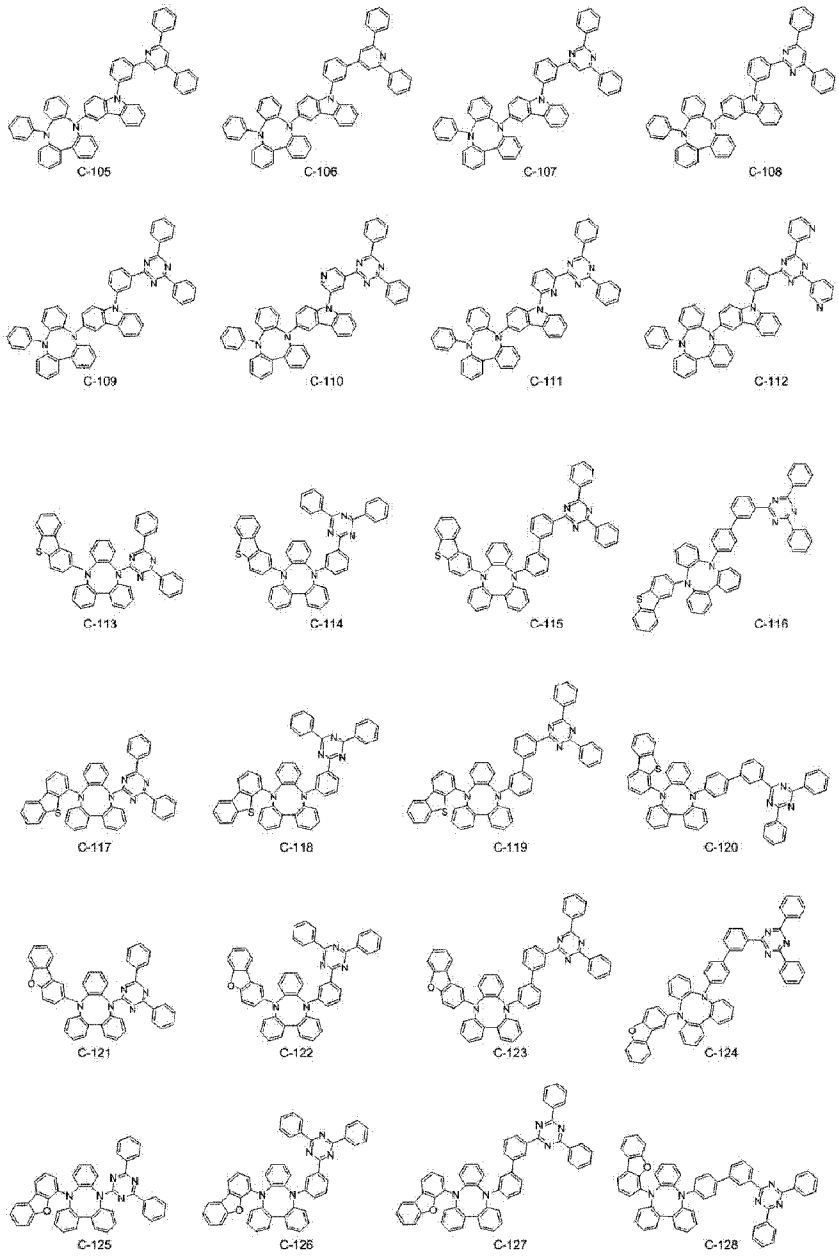

C-38

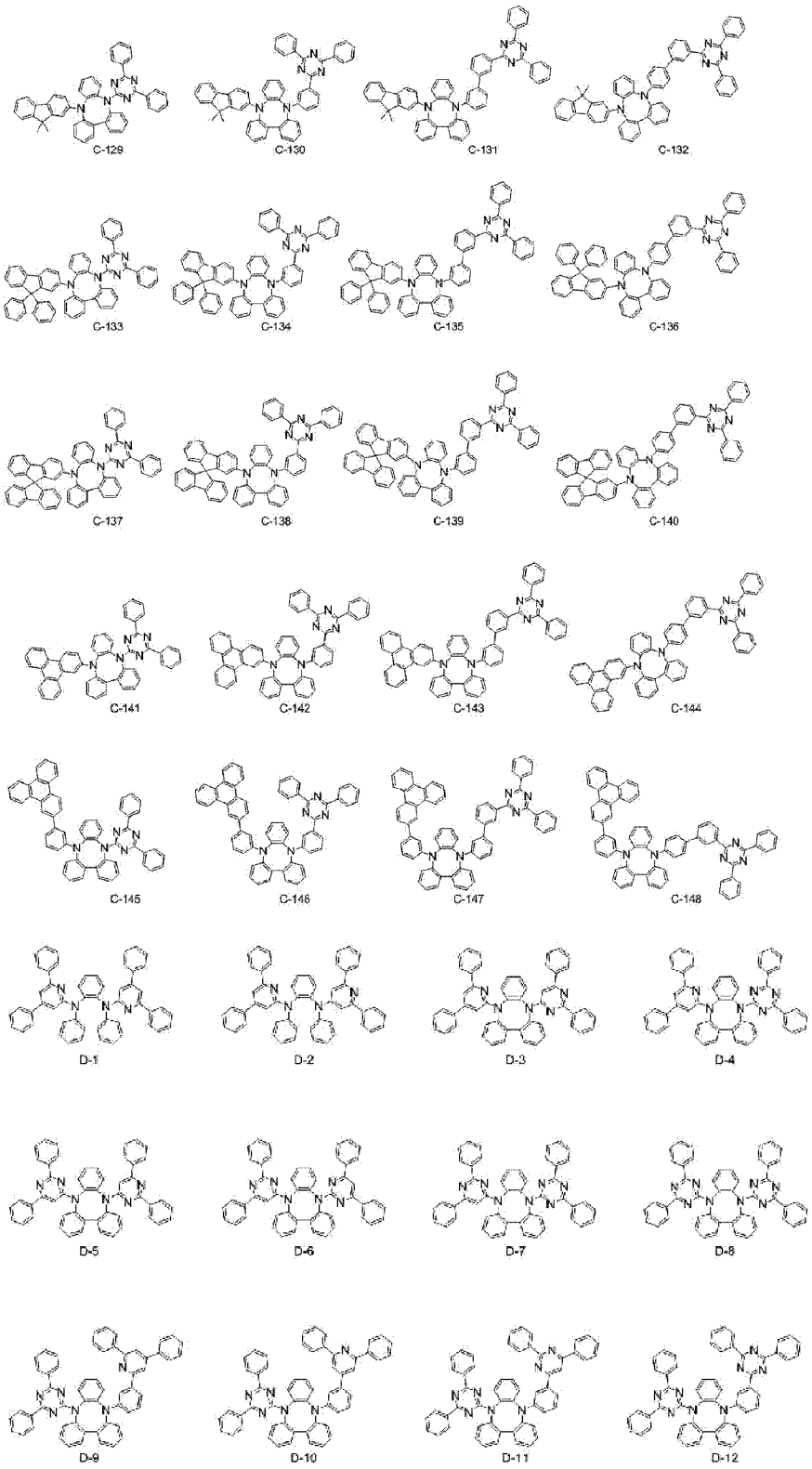

C-39

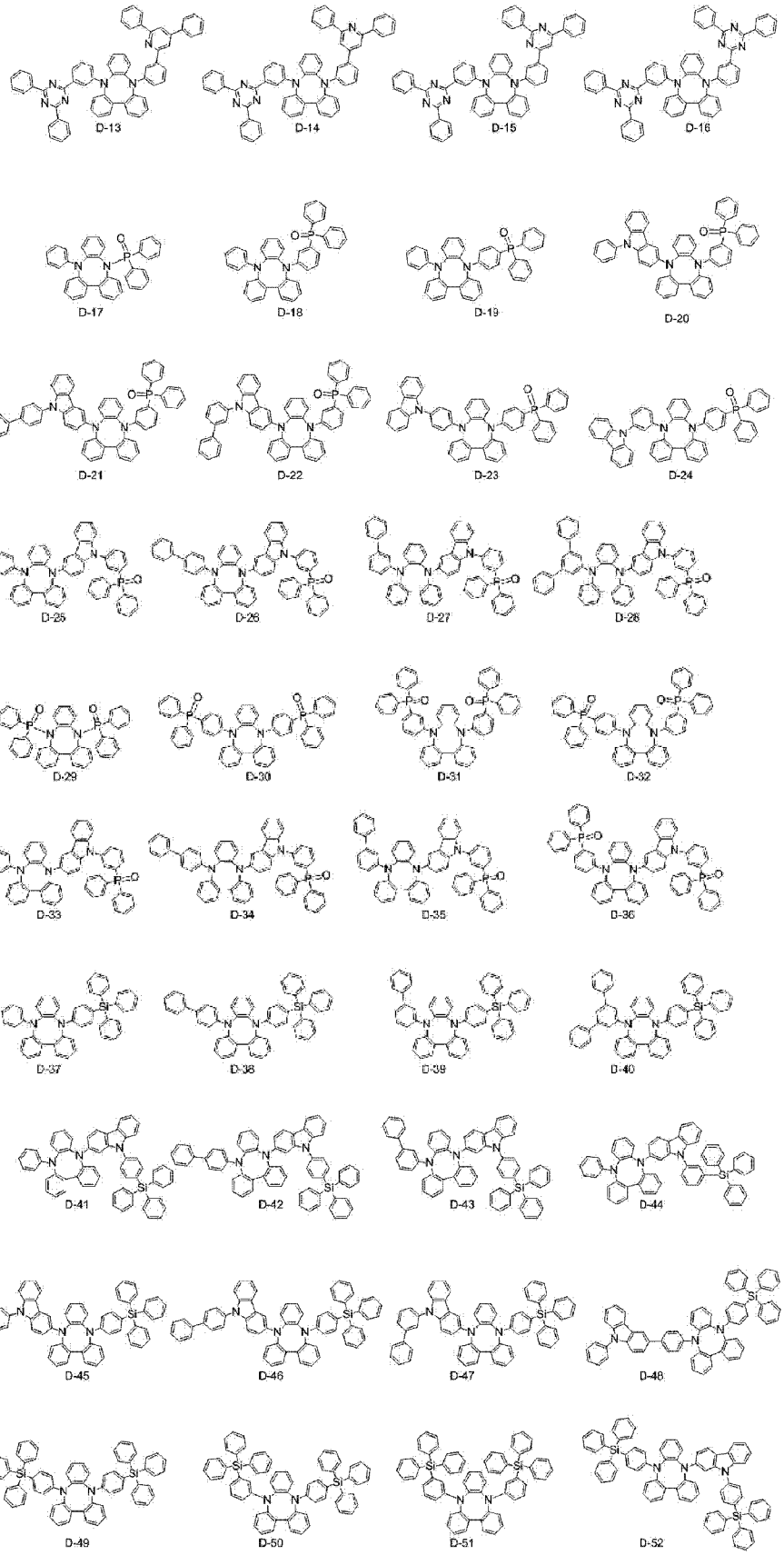

C-40

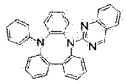

C-41
C-42
C-43
C-44
C-45
C-46
C-47
C-48
C-49
C-50
C-51
C-52
C-53
C-54
C-55
C-56
C-57
C-58
C-59
C-60
C-61
C-62
C-63
C-64
C-65
C-66
C-67
C-68
C-97
C-98
C-99
C-100
C-101
C-102
C-103
C-104

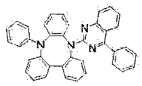

C-69
C-70
C-71
C-72
C-73
C-74
C-75
C-76
C-77
C-78
C-79
C-80
C-81
C-82
C-83
C-84
C-85
C-86
C-87
C-88
C-89
C-90
C-91
C-92
C-93
C-94
C-95
C-96
C-97
C-98
C-99
C-100
C-101
C-102
C-103
C-104

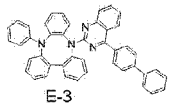

C-105
C-106
C-107
C-108
C-109
C-110
C-111
C-112
C-113
C-114
C-115
C-116
C-117
C-118
C-119
C-120
C-121
C-122
C-123
C-124
C-125
C-126
C-127
C-128

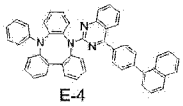

C-129
C-130
C-131
C-132
C-133
C-134
C-135
C-136
C-137
C-138
C-139
C-140
C-141
C-142
C-143
C-144
C-145
C-146
C-147
C-148
D-1
D-2
D-3
D-4
D-5
D-6
D-7
D-8
D-9
D-10
D-11
D-12

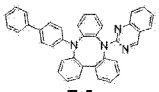

D-13
D-14
D-15
D-16
D-17
D-18
D-19
D-20
D-21
D-22
D-23
D-24
D-25
D-26
D-27
D-28
D-29
D-30
D-31
D-32
D-33
D-34
D-35
D-36
D-37
D-38
D-39
D-40
D-41
D-42
D-43
D-44
D-45
D-46
D-47
D-48
D-49
D-50
D-51
D-52

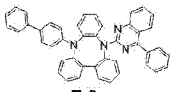

E-1

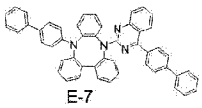

E-2

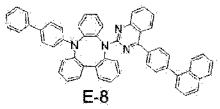

E-3

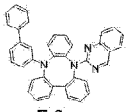

E-4

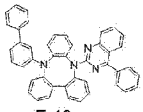

E-5

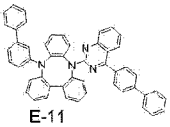

E-6

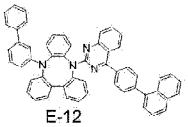

E-7

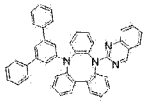

E-8

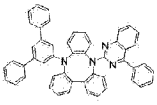

E-9

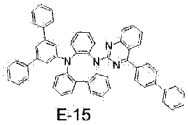

E-10

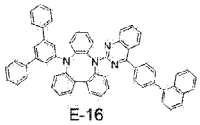

E-11

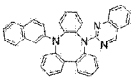

E-12

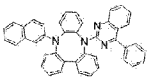

E-13

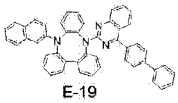

E-14

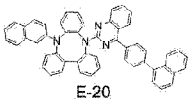

E-15

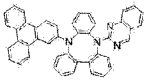

E-16

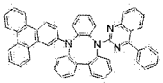

E-17

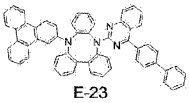

E-18

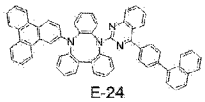

E-19

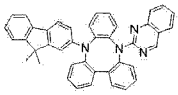

E-20

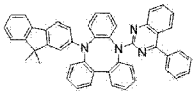

E-21

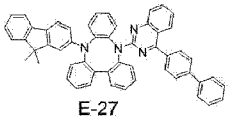

E-22

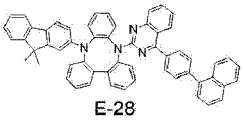

E-23

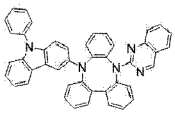

E-24

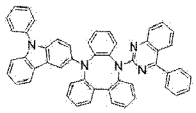

E-25

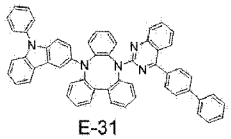

E-26

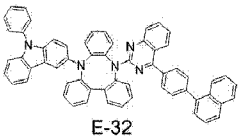

E-27

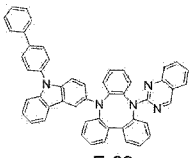

E-28

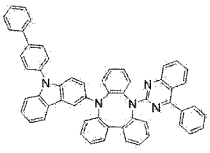

E-29

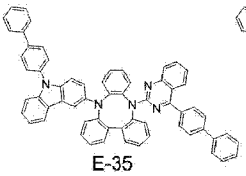

E-30

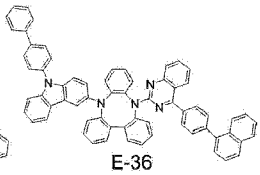

E-31

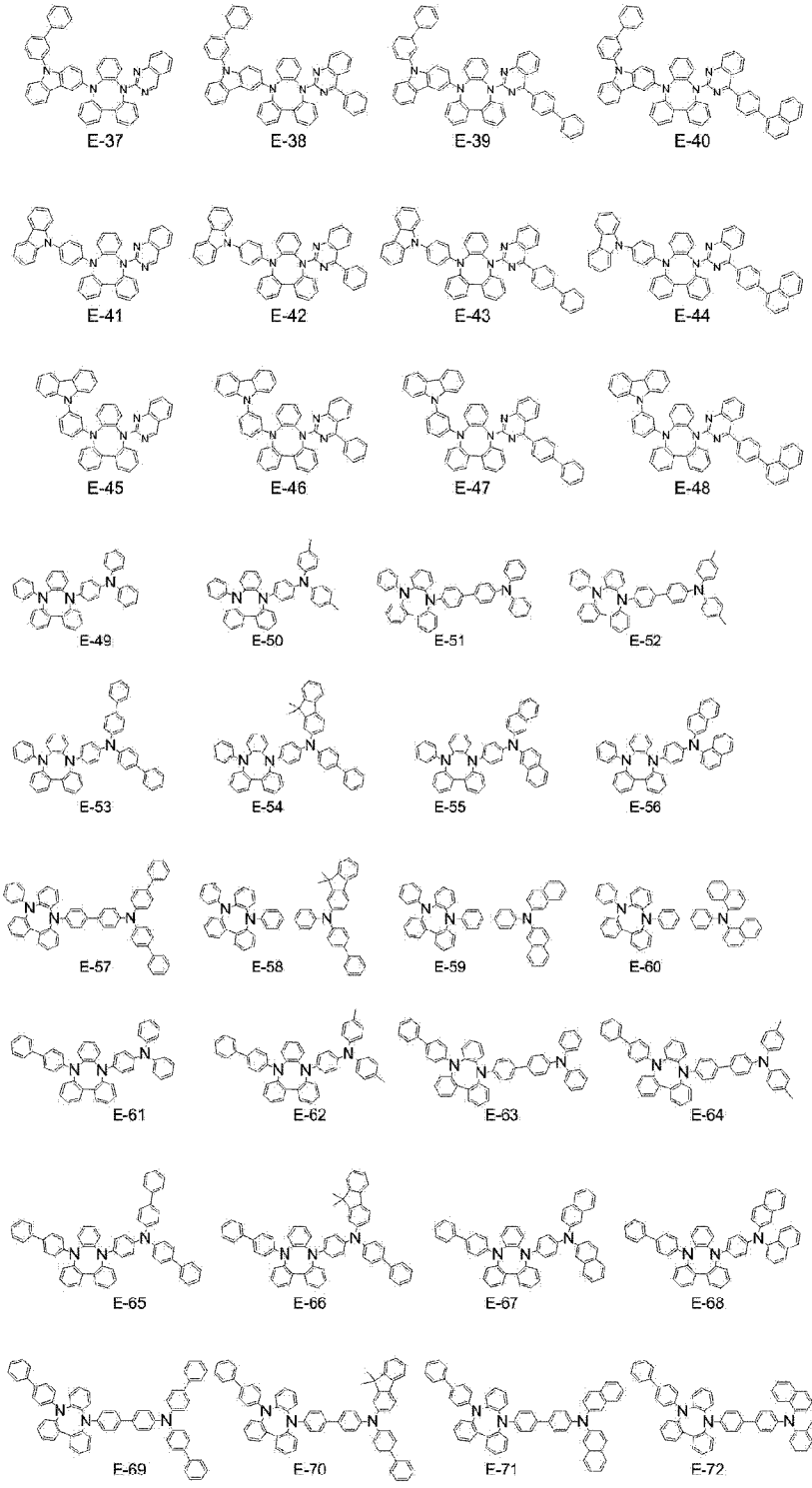

E-32

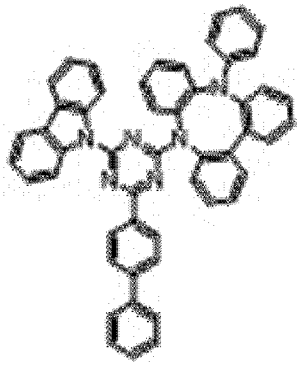

E-33


E-34

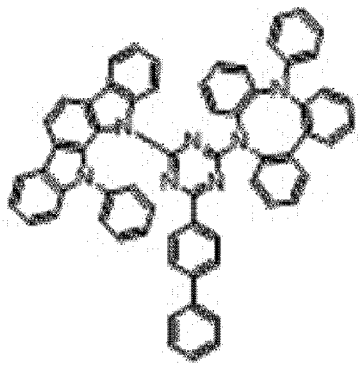

E-35


E-36

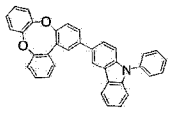

E-37
E-38
E-39
E-40
E-41
E-42
E-43
E-44
E-45
E-46
E-47
E-48
E-49
E-50
E-51
E-52
E-53
E-54
E-55
E-56
E-57
E-58
E-59
E-60
E-61
E-62
E-63
E-64
E-65
E-66
E-67
E-68
E-69
E-70
E-71
E-72



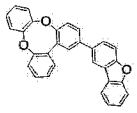
E-73



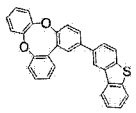
E-74



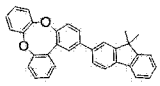
F-1



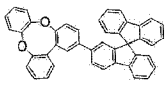
F-2



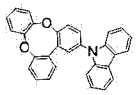
F-3



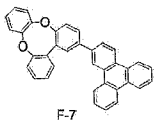
F-4



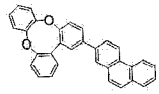
F-5



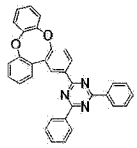
F-6



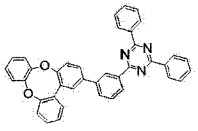
F-7



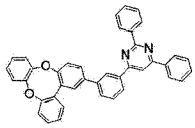
F-8



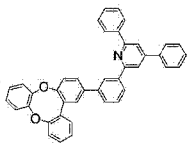
F-9



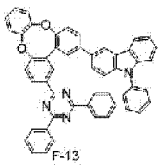
F-10



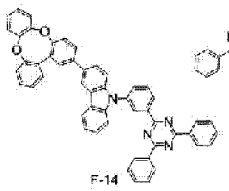
F-11



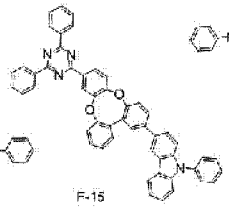
F-12



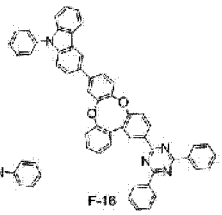
F-13



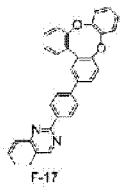
F-14



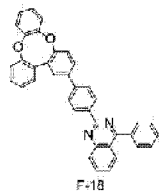
F-15



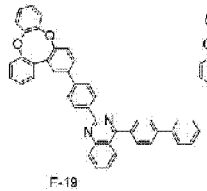
F-16



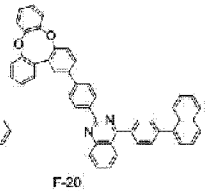
F-17



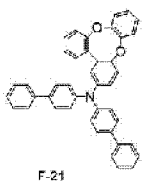
F-18



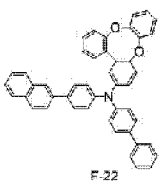
F-19



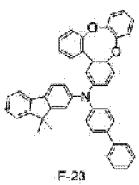
F-20



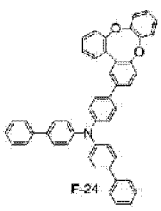
F-21



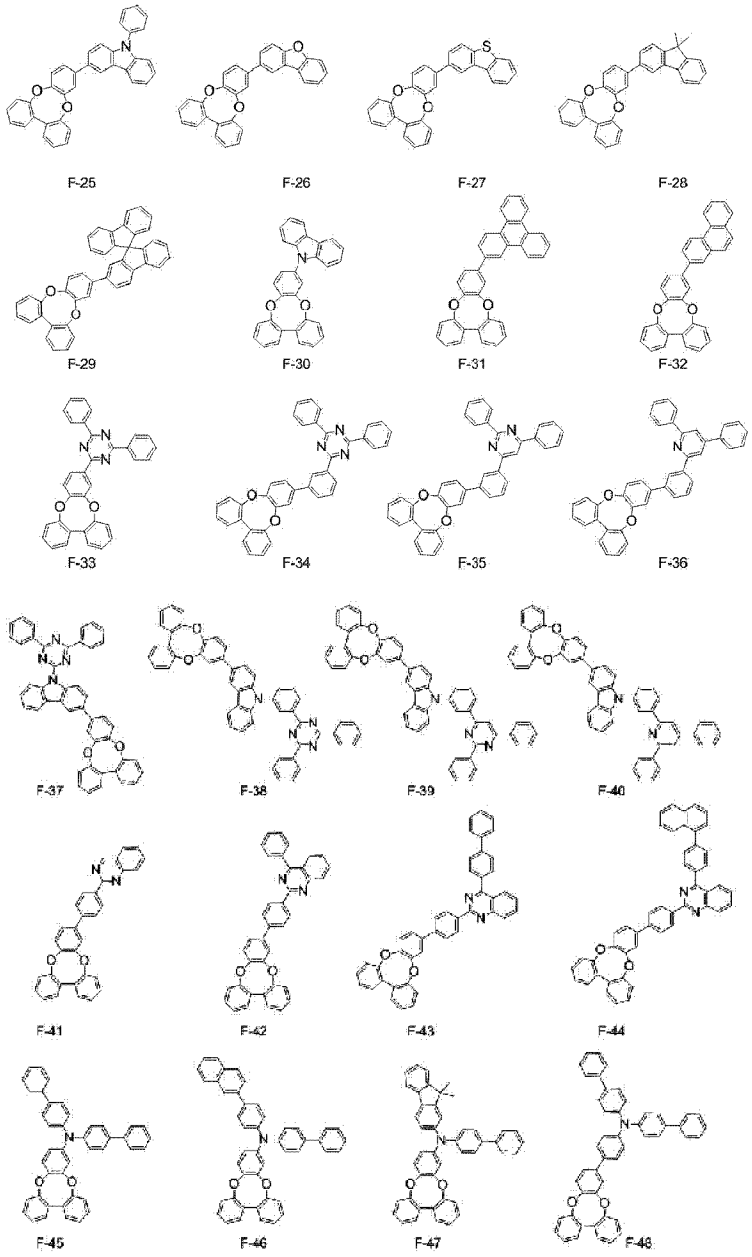
F-22

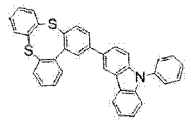


F-23

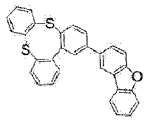


F-24

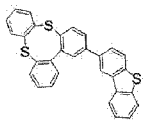

F-25
F-26
F-27
F-28
F-29
F-30
F-31
F-32
F-33
F-34
F-35
F-36
F-37
F-38
F-39
F-40
F-41
F-42
F-43
F-44
F-45
F-46
F-47
F-48



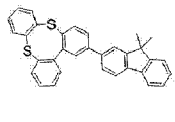
G-1



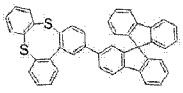
G-2



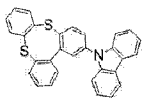
G-3



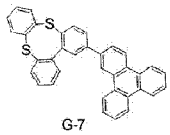
G-4



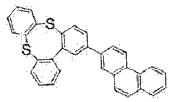
G-5



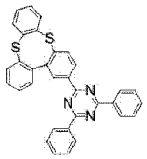
G-6



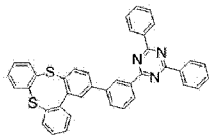
G-7



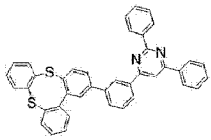
G-8



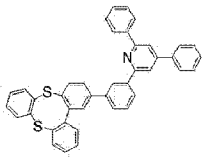
G-9



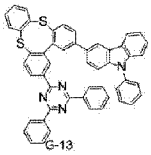
G-10



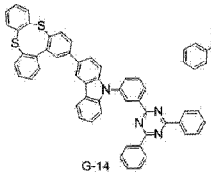
G-11



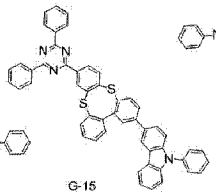
G-12



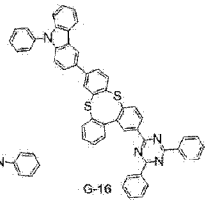
G-13



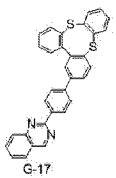
G-14



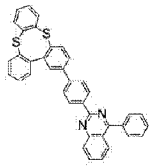
G-15



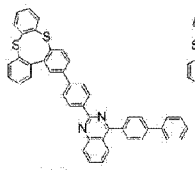
G-16



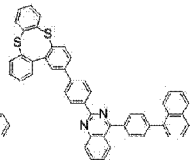
G-17



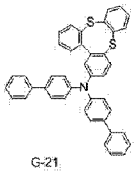
G-18



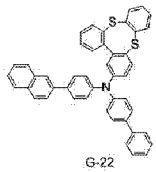
G-19



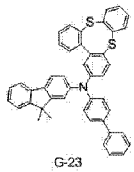
G-20



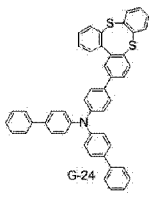
G-21



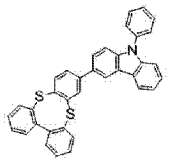
G-22



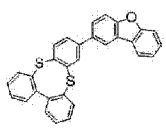
G-23



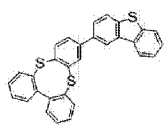
G-24



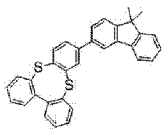
G-25



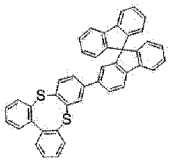
G-26



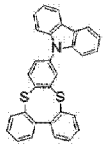
G-27



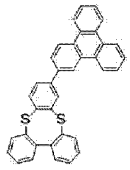
G-28



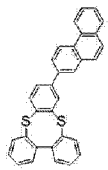
G-29



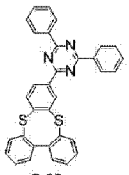
G-30



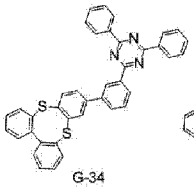
G-31



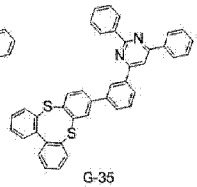
G-32



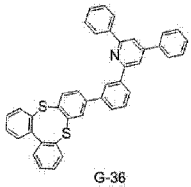
G-33



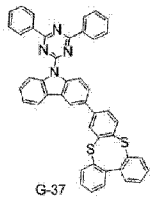
G-34



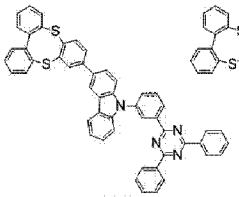
G-35



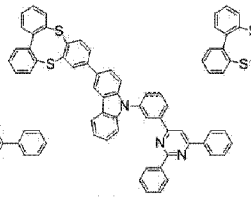
G-36



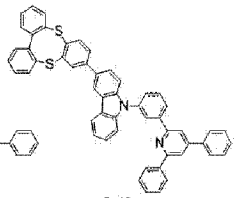
G-37



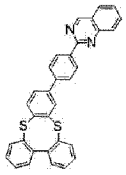
G-38



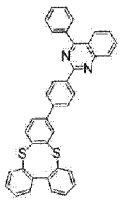
G-39



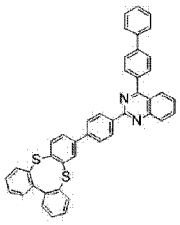
G-40



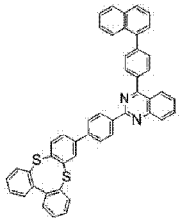
G-41



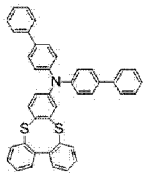
G-42



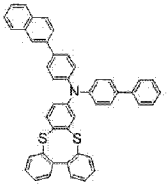
G-43



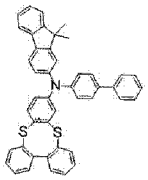
G-44



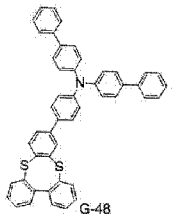
G-45



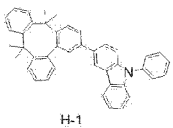
G-46



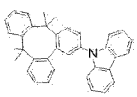
G-47



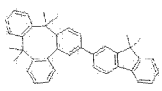
G-48



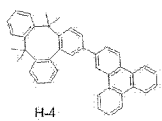
H-1



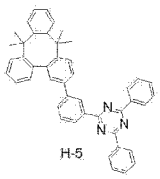
H-2



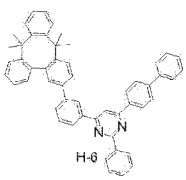
H-3



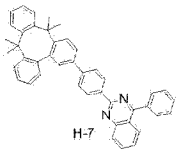
H-4



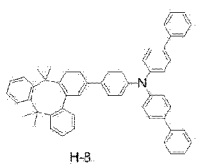
H-5



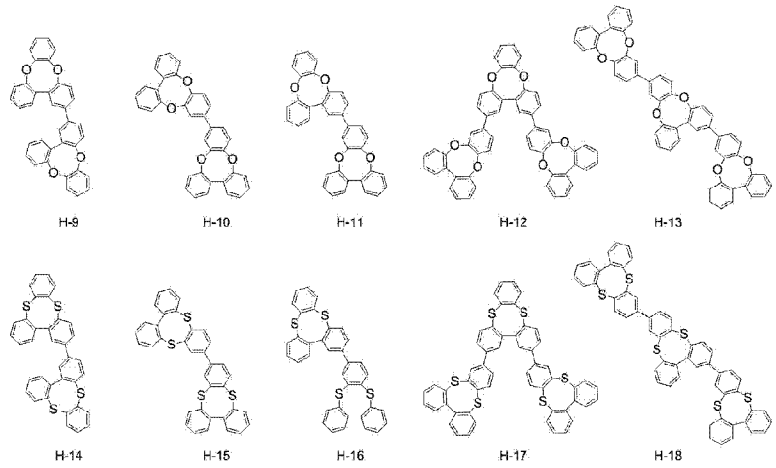
H-6



H-7

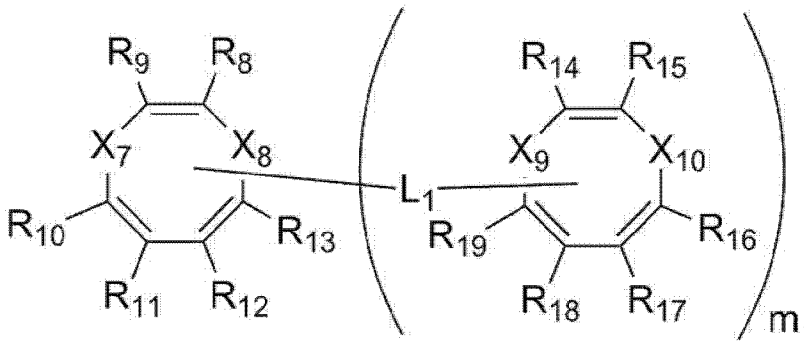


H-8



[청구항 15] 하기 화학식 9로 표시되는 화합물:

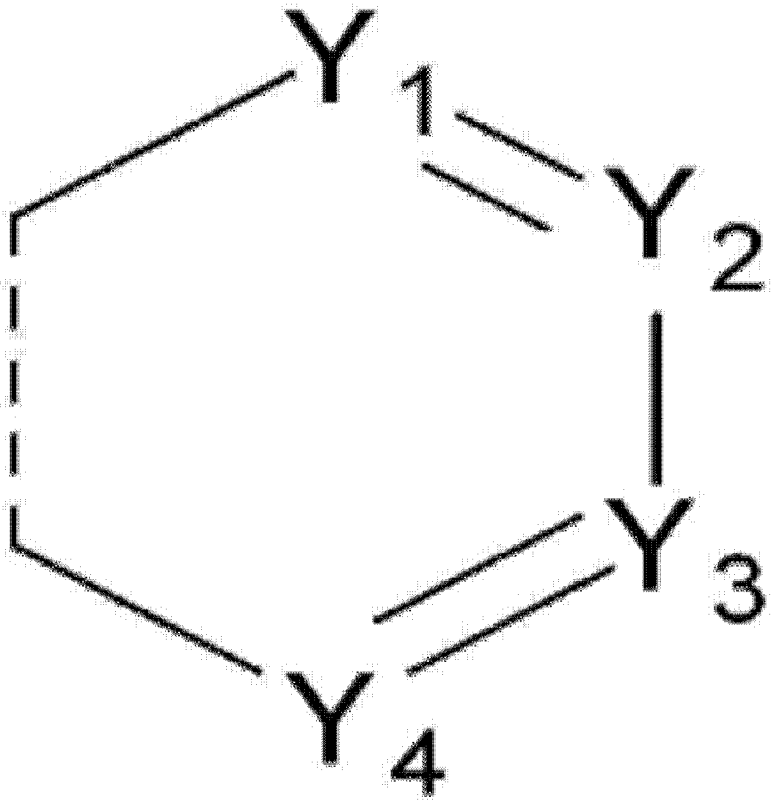
[화학식 9]



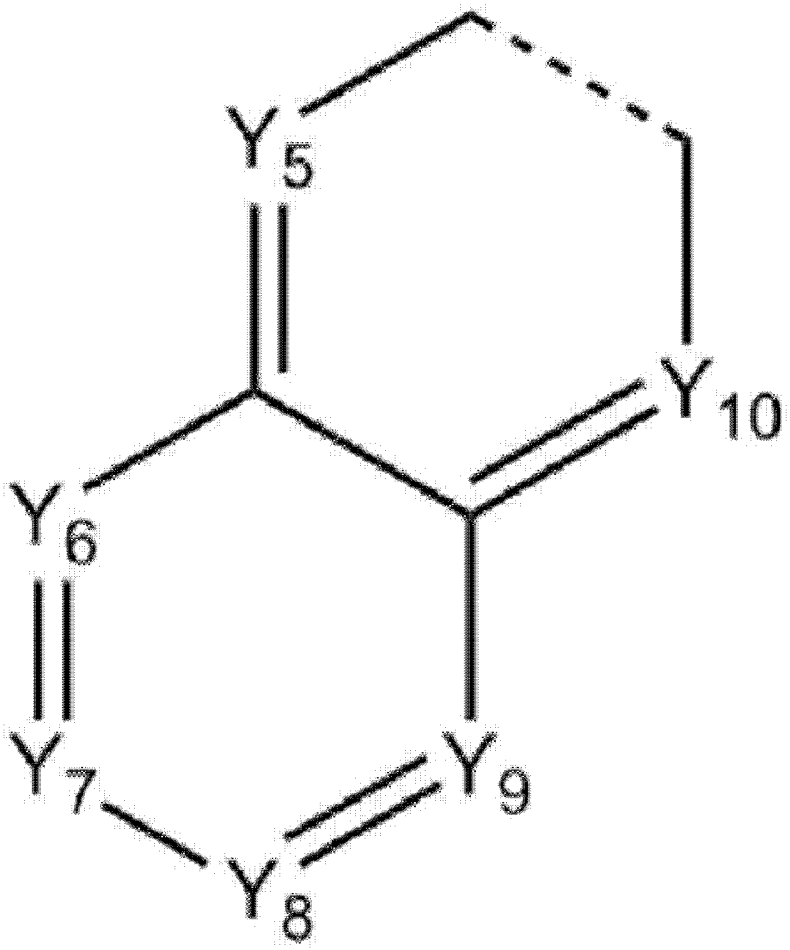
상기 화학식 9에서,

R_8과 R_9, R_{10}과 R_{11}, R_{12}와 R_{13}, R_{14}와 R_{15}, R_{16}과 R_{17} 및 R_{18}과 R_{19} 중 적어도 하는 하기 화학식 2 내지 화학식 8 중 어느 하나로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하고, 상기 R_{14} 내지 R_{19}가 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

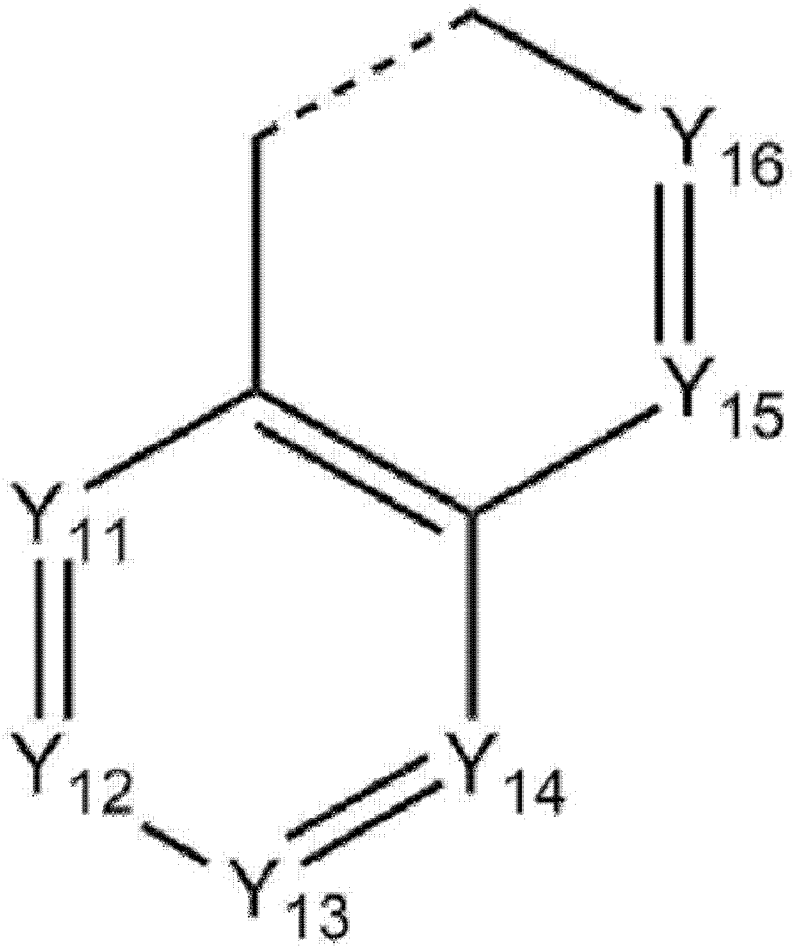
[화학식 2]



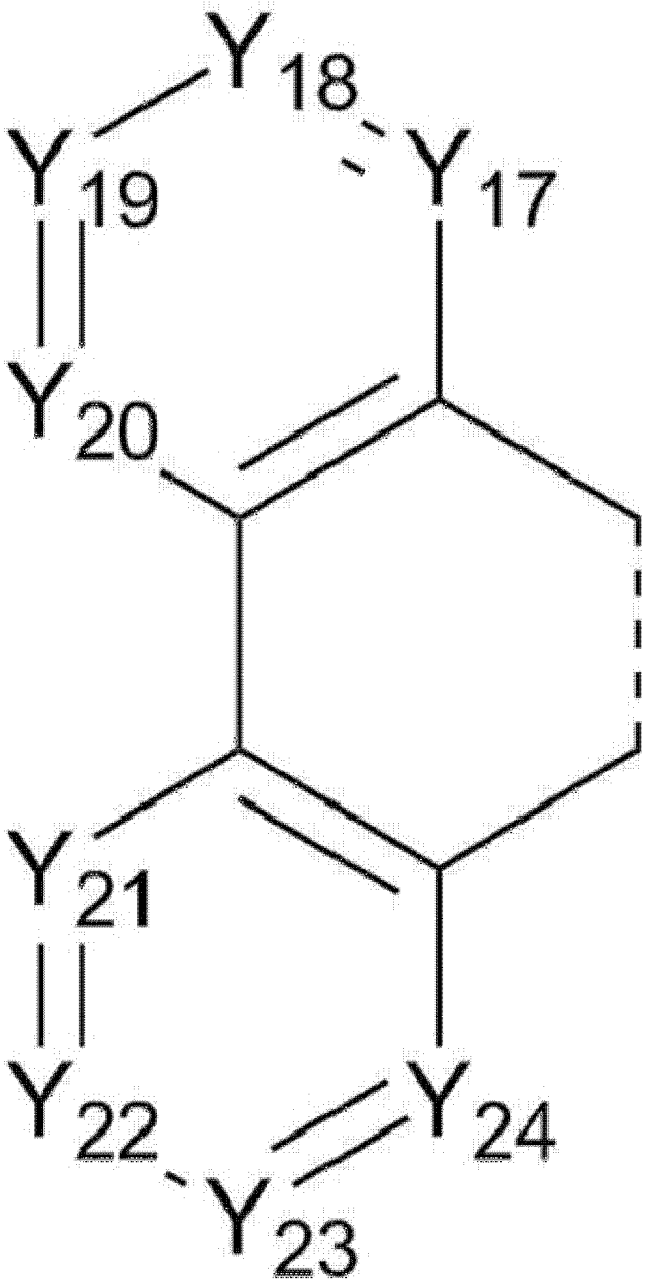
[화학식 3]



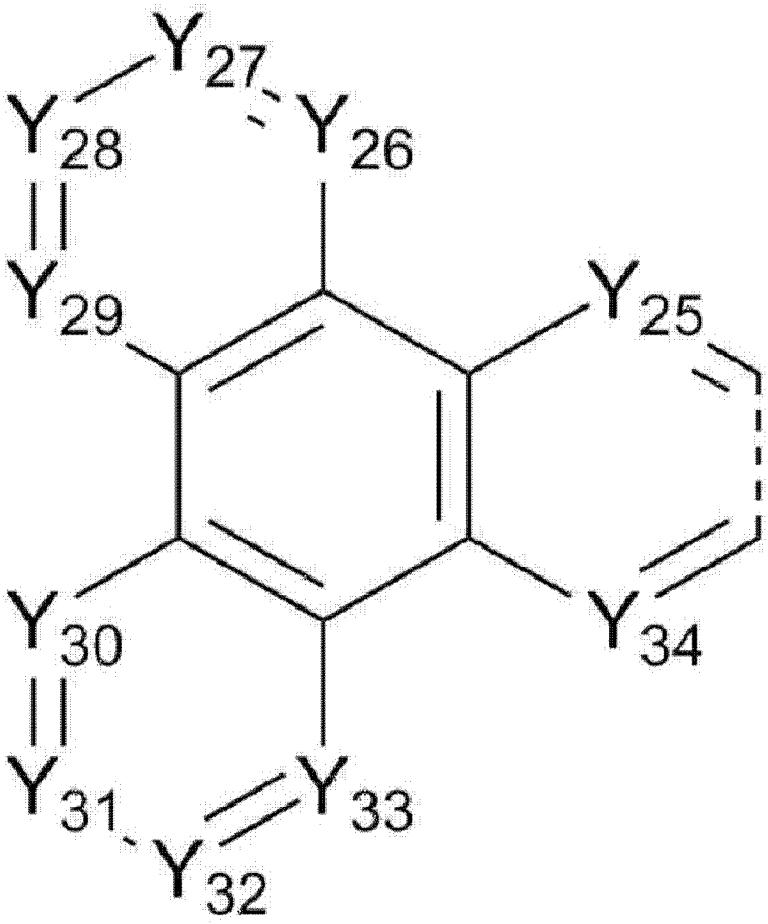
[화학식 4]



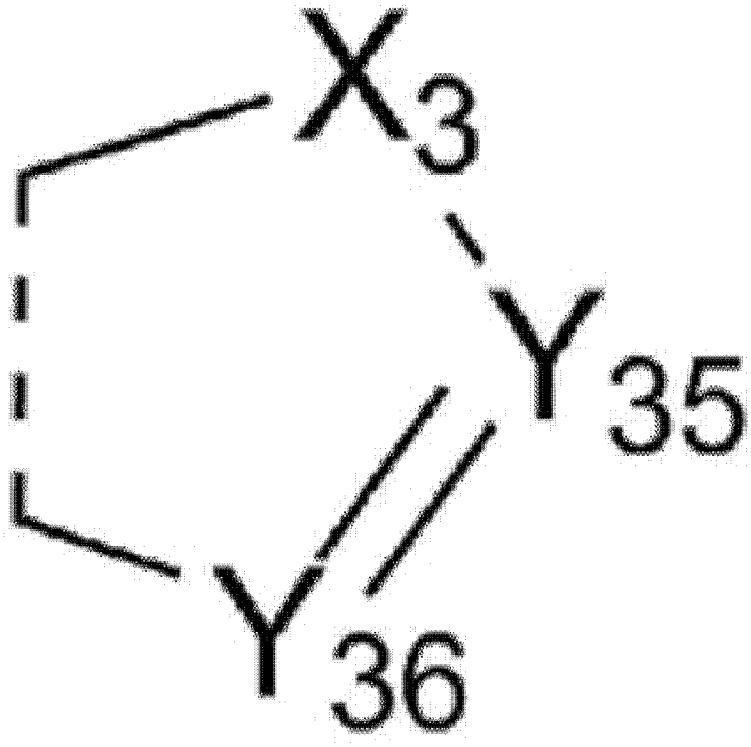
[화학식 5]



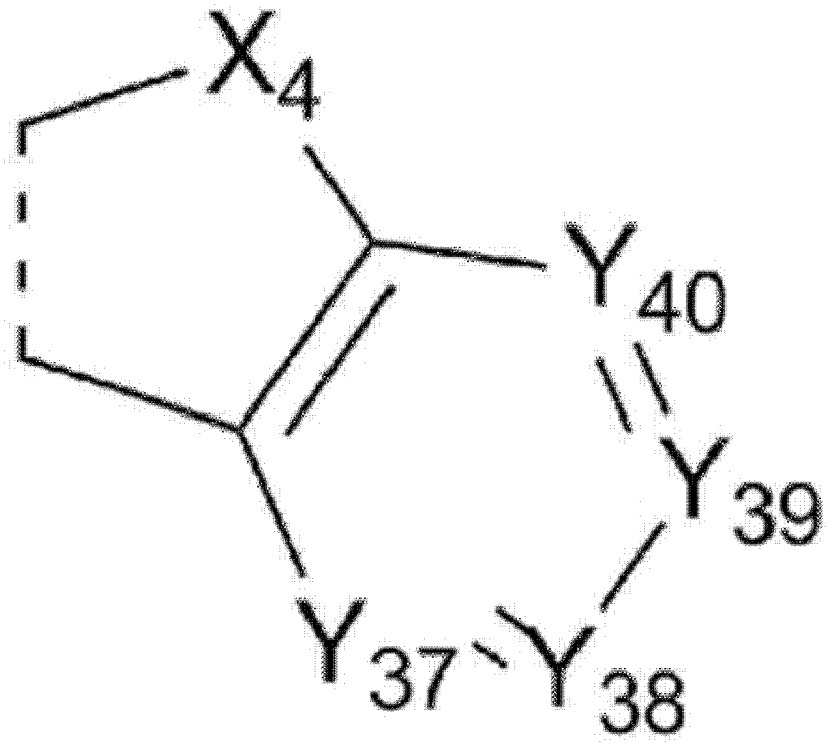
[화학식 6]



[화학식 7]



[화학식 8]



상기 화학식 2 내지 화학식 9에서,
점선은 축합이 이루어지는 부분이며;
m은 1 또는 2의 정수이며;
X_3 내지 X_4 및 X_7 내지 X_{10}은 각각 독립적으로 O, S, Se, P, $N(Ar_1)$, $C(Ar_2)(Ar_3)$ 및 $Si(Ar_4)(Ar_5)$ 으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 상기 X_3 내지 X_4과 X_9 내지 X_{10}이 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;
L_1은 단일결합, C_6~C_{18}의 아릴렌기 또는 핵원자수 5 내지 18개의 헤테로아릴렌기이고, 상기 L_1이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;
Y_1 내지 Y_{40}은 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_7)$이고, 상기 Y_1 내지 Y_{40} 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;
R_7은 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접한 각각의 R_7이 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R_7이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

Ar_1 내지 Ar_5는 각각 독립적으로 C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 상기 Ar_1 내지 Ar_5가 각각 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

상기 화학식 2 내지 화학식 8로 표시되는 고리와 축합되어 축합 고리를 형성하지 않는 R_8 내지 R_{19}는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며;

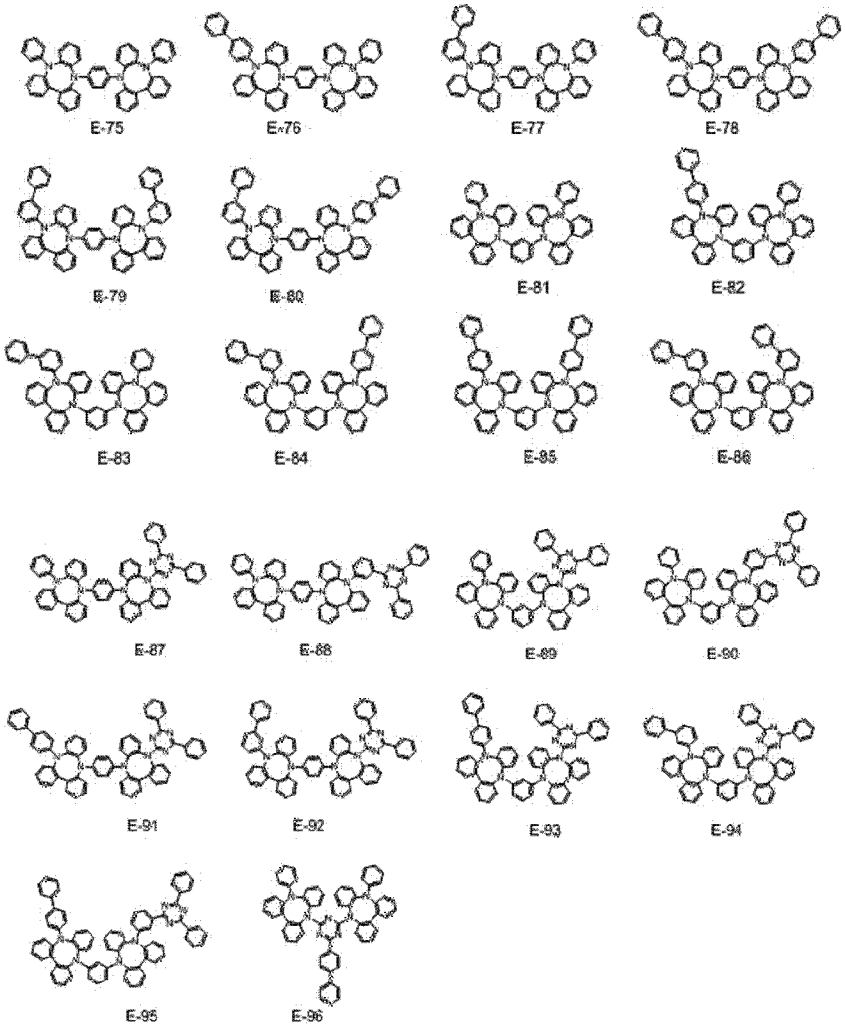
상기 R_7 내지 R_{19} 및 Ar_1 내지 Ar_5의 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, C_1~C_{40}의 알킬기, C_2~C_{40}의 알케닐기, C_2~C_{40}의 알키닐기, C_3~C_{40}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{40}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{40}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스파닐기, C_6~C_{60}의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있으며, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[청구항 16] 제15항에 있어서,

상기 L_1은 페닐렌기, 비페닐렌기, 카바졸릴기 또는 트리아지닐기인 것을 특징으로 하는 화합물.

[청구항 17] 제15항에 있어서,

상기 화학식 9로 표시되는 화합물은 아래의 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:



[청구항 18] (i) 양극, (ii) 음극, 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서,
상기 1층 이상의 유기물층 중에서 적어도 하나는 제1항의 화학식 1로 표시되는 화합물 또는 제13항의 화학식 9로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

[청구항 19] 제18항에 있어서,
상기 화합물을 포함하는 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 수송층, 전자 주입층, 수명 개선층, 발광층 및 발광 보조층으로 이루어진 군에서 선택되는 유기 전계 발광 소자.

[청구항 20] 제19항에 있어서,
상기 화합물을 포함하는 유기물층은 전자 주입층, 발광 보조층, 발광층 및 수명 개선층으로 이루어진 군에서 선택되는 유기 전계 발광 소자.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/KR2016/006980

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
C07D 245/04(2006.01)i, C07D 209/82(2006.01)i, C07D 307/91(2006.01)i, C07D 333/76(2006.01)i, C07D 403/04(2006.01)i, C07D 405/04(2006.01)i, C07D 321/00(2006.01)i, C09K 11/06(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)
C07D 245/04; C09K 19/58; C07D 321/10; C07D 209/82; C07D 307/91; C07D 333/76; C07D 403/04; C07D 405/04; C07D 321/00; C09K 11/06; 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(Registry, CAplus), Google & Keywords: organic light emitting compound, organic electroluminescence diode, 8-membered ring, diazocine-based compound

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	YOSHIDA, Hiroto et al.,"Addition of Silicon-Silicon σ-Bonds to Arynes or Bisarynes Catalyzed by a Palladium Complex", Organometallics, 2005, vol. 24, pages 156-162 See table 2 and diagram 3.	1-3,5,7,11,15
A		4,6,8-10,12-14 ,16-20
X	OHSHITA, Joji et al.,"Synthesis and Reactions of Silicon-Bridged Dithienylbiphenyls. Fine Tuning of Electronic States by Bridging Silicon Chain Lengths", Heterocycles, 2012, vol. 86, no. 2, pages 1167-1176 See page 1167 and diagram 2.	1-20
X	ABRAMOV, Igor G. et al., "Synthesis of Oxygen-containing Heterocyclic Ortho-dinitriles Based on 4-bromo-5-nitrophthalonitrile", Mendeleev Communications, 2001, vol. 11, no. 2, pages 80-81 See diagrams 1-2.	1-2,7,11
A		3-6,8-10,12-20

☒ 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
20 OCTOBER 2016 (20.10.2016)	**21 OCTOBER 2016 (21.10.2016)**
Name and mailing address of the ISA/KR Korean Intellectual Property Office Government Complex-Daejeon, 189 Seonsa-ro, Daejeon 302-701, Republic of Korea Facsimile No. 82-42-472-7140	Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/KR2016/006980

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	ESHDAT, Lior et al., "Flexibility vs Rigidity of Singly and Doubly Tethered Biphenyls: Structure, Dynamic Stereochemistry, and Resolution of Tribenzo[a,c,f]cyclooctane, Tetrabenzo[a,de,h,kl]bicyclo[6.6.0]tetradecane, and Their Alkyl Derivatives", J. Org. Chem., 1999, vol. 64, pages 3532-3537 See page 3532.	1-2,7,11
A		3-6,8-10,12-20
A	KR 10-2008-0059417 A (MERCK PATENT GMBH.) 27 June 2008 See claims 1-9.	1-20

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/KR2016/006980

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2008-0059417 A	27/06/2008	CN 101273111 A	24/09/2008
		CN 101277943 A	01/10/2008
		CN 101277943 B	23/05/2012
		EP 1928854 A1	11/06/2008
		EP 1928854 B1	16/12/2009
		EP 1928980 A1	11/06/2008
		EP 1928980 B1	09/03/2011
		JP 2009-514799 A	09/04/2009
		JP 2009-515818 A	16/04/2009
		JP 5405113 B2	05/02/2014
		KR 10-1401188 B1	28/05/2014
		TW I410412 B	01/10/2013
		TW I428330 B	01/03/2014
		US 2008-0272337 A1	06/11/2008
		US 2008-0281108 A1	13/11/2008
		US 7771800 B2	10/08/2010
		US 7771801 B2	10/08/2010
		WO 2007-039104 A1	12/04/2007
		WO 2007-039105 A1	12/04/2007

국제조사보고서

국제출원번호
PCT/KR2016/006980

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 245/04(2006.01)i, C07D 209/82(2006.01)i, C07D 307/91(2006.01)i, C07D 333/76(2006.01)i, C07D 403/04(2006.01)i, C07D 405/04(2006.01)i, C07D 321/00(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)
C07D 245/04; C09K 19/58; C07D 321/10; C07D 209/82; C07D 307/91; C07D 333/76; C07D 403/04; C07D 405/04; C07D 321/00; C09K 11/06; 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(Registry, CAplus), Google & 키워드: 유기 발광 화합물, 유기 전계 발광 소자, 8원환, 디아조신계 화합물

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	YOSHIDA, HIROTO 등, `Addition of Silicon-Silicon σ-Bonds to Arynes or Bisarynes Catalyzed by a Palladium Complex`, Organometallics, 2005, 제24권, 페이지 156-162 표 2 및 도식 3 참조.	1-3,5,7,11,15
A		4,6,8-10,12-14,16-20
X	OHSHITA, JOJI 등, `Synthesis and Reactions of Silicon-Bridged Dithienylbiphenyls. Fine Tuning of Electronic States by Bridging Silicon Chain Lengths`, Heterocycles, 2012, 제86권, 제2호, 페이지 1167-1176 페이지 1167 및 도식 2 참조.	1-20
X	ABRAMOV, IGOR G. 등, `Synthesis of oxygen-containing heterocyclic ortho-dinitriles based on 4-bromo-5-nitrophthalonitrile`, Mendeleev Communications, 2001, 제11권, 제2호, 페이지 80-81 도식 1-2 참조.	1-2,7,11
A		3-6,8-10,12-20

☒ 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
2016년 10월 20일 (20.10.2016)	2016년 10월 21일 (21.10.2016)

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

심사관
김동석
전화번호 +82-42-481-5405

국제조사보고서

국제출원번호
PCT/KR2016/006980

C (계속). 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	ESHDAT, LIOR 등, `Flexibility vs Rigidity of Singly and Doubly Tethered Biphenyls: Structure, Dynamic Stereochemistry, and Resolution of Tribenzo[a,c,f]cyclooctane, Tetrabenzo[a,de,h,kl]bicyclo[6.6.0]tetradecane, and Their Alkyl Derivatives`, J. Org. Chem., 1999, 제64권, 페이지 3532-3537 페이지 3532 참조.	1-2,7,11
A		3-6,8-10,12-20
A	KR 10-2008-0059417 A (메르크 파텐트 게엠베하) 2008.06.27 청구항 1-9 참조.	1-20

국제조사보고서
대응특허에 관한 정보

국제출원번호
PCT/KR2016/006980

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2008-0059417 A	2008/06/27	CN 101273111 A	2008/09/24
		CN 101277943 A	2008/10/01
		CN 101277943 B	2012/05/23
		EP 1928854 A1	2008/06/11
		EP 1928854 B1	2009/12/16
		EP 1928980 A1	2008/06/11
		EP 1928980 B1	2011/03/09
		JP 2009-514799 A	2009/04/09
		JP 2009-515818 A	2009/04/16
		JP 5405113 B2	2014/02/05
		KR 10-1401188 B1	2014/05/28
		TW I410412 B	2013/10/01
		TW I428330 B	2014/03/01
		US 2008-0272337 A1	2008/11/06
		US 2008-0281108 A1	2008/11/13
		US 7771800 B2	2010/08/10
		US 7771801 B2	2010/08/10
		WO 2007-039104 A1	2007/04/12
		WO 2007-039105 A1	2007/04/12