



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2013년09월26일
(11) 등록번호 10-1311935
(24) 등록일자 2013년09월17일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
- (21) 출원번호 10-2010-0071131
(22) 출원일자 2010년07월22일
심사청구일자 2011년09월28일
(65) 공개번호 10-2011-0118542
(43) 공개일자 2011년10월31일
(30) 우선권주장
1020100038169 2010년04월23일 대한민국(KR)
(56) 선행기술조사문헌
WO2007125714 A1
JP2005112765 A
- (73) 특허권자
제일모직주식회사
경상북도 구미시 구미대로 58 (공단동)
(72) 발명자
류동완
경기도 용인시 수지구 신봉1로 110, LG빌리지 50
2동 1203호 (신봉동)
정성현
경기도 군포시 산본천로 119-9, 주공 11단지 아파트 1101동 1212호 (산본동)
(뒷면에 계속)
- (74) 대리인
팬코리아특허법인

전체 청구항 수 : 총 20 항


심사관 : 오세주

(54) 발명의 명칭 유기광전소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기광전소자

(57) 요 약

유기광전소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기광전소자에 관한 것으로, 하기 화학식 1로 표시되는 유기광전소자용 화합물을 제공하여, 우수한 전기화학적 및 열적 안정성으로 수명 특성이 우수하고, 낮은 구동전압에서도 높은 발광효율을 가지는 유기광전소자를 제조할 수 있다.


[화학식 1]



상기 화학식 1의 정의는 본 명세서에 기재된 바와 같다.

대 표 도 - 도1

100



(72) 발명자

허달호

경기도 수원시 권선구 경수대로302번길 29, 삼성아
파트 5동 103호 (권선동)

이경미

경기도 의왕시 고산로 56 (고천동, 제일모직)

이남현

경기도 의왕시 고산로 56 (고천동, 제일모직)

채미영


경기도 의왕시 고산로 56 (고천동, 제일모직)

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기광전소자용 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

R_1 내지 R_{16} 은 서로 동일하거나 상이하며, 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 페로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술파모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 알킬티울기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 우레이드기 및 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기로 이루어진 군에서 선택되고,

R_1 내지 R_8 중 어느 하나는 Ar_1 과의 결합을 나타내고,

R_9 내지 R_{16} 중 어느 하나는 Ar_2 와의 결합을 나타내고,

R_1 내지 R_8 의 치환 위치 중에 적어도 하나는 Ar_1 과 시그마 결합으로 연결되어 있을 수 있으며, R_9 내지 R_{16} 의 치환 위치 중에 적어도 하나는 Ar_2 과 시그마 결합으로 연결되어 있을 수 있고,

X는 NR_{17} , 0, S 및 $SO_2(O=S=O)$ 로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 R_{17} 는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 및 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되고,

Y는 0, S 및 $SO_2(O=S=O)$ 로 이루어진 군에서 선택되고,

Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하며, 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤�테로아릴기이고,

n은 1 내지 4 중 어느 하나인 정수이고,

m은 0 내지 4 중 어느 하나인 정수이고,

Ar_3 은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤�테로아릴기이나, 단 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨라닐기 및 치환 또는 비치환된 디벤조티오페닐기는 제외되고, 상기 X가 NR_{17} 인 경우 플루오레닐기는 제외고,

X가 NR_{17} 이고 Ar_1 및 Ar_2 가 모두 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이며, Ar_3 가 헤테로아릴기를 제외한 치

환기로 치환되거나 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고, Y가 0인 경우는 제외되고,

X 및 Y가 동시에 0이고, Ar₁ 및 Ar₂가 모두 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이며, Ar₃이 헤테로아릴기 를 제외한 치환기로 치환되거나 비치환된 C6 내지 C30 아릴기인 경우는 제외된다.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

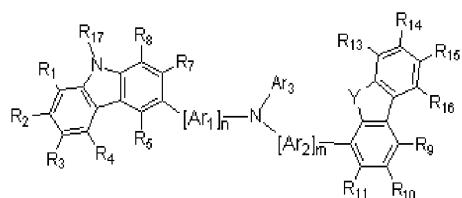
상기 X는 NR₁₇, O, S 및 SO₂(O=S=O)로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 R₁₇는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이며, 여기서 "치환"이란, 상기 아릴기 또는 헤테로 아릴기의 수소 중 적어도 하나가 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된 치환기로 치환된 것인 유기광전소자용 화합물.

청구항 3

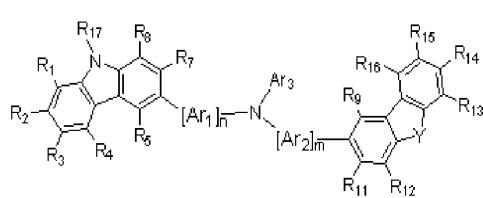
제 1 항에 있어서,

상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 2 내지 7 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기광전소자용 화합물:

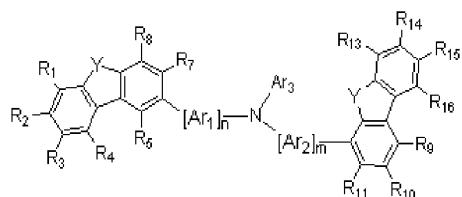
[화학식 2]



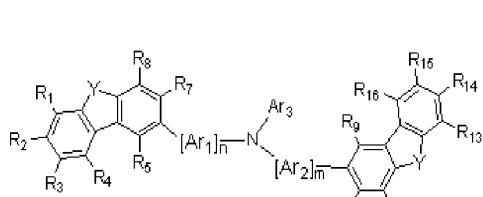
[화학식 3]



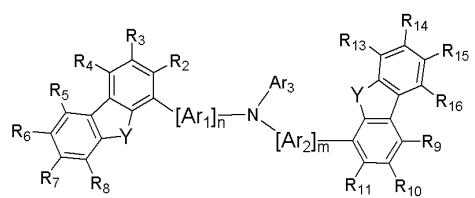
[화학식 4]



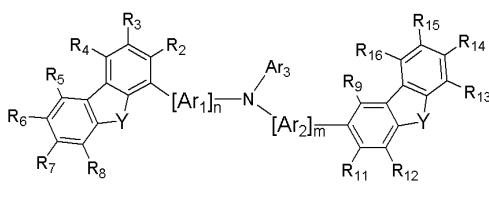
[화학식 5]



[화학식 6]



[화학식 7]



상기 화학식 2 내지 7에서,

R₁ 내지 R₁₆은 서로 동일하거나 상이하며, 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 페로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1

내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 술파모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 알킬티울기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 우레이드기 및 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기로 이루어진 군에서 선택되고,

R_{17} 은 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 및 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤�테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되고,

Y는 0, S 및 $SO_2(O=S=O)$ 이고,

Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하며, 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤�테로아릴기이고,

n은 1 내지 4 중 어느 하나인 정수이고,

m은 0 내지 4 중 어느 하나인 정수이고,

Ar_3 은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤�테로아릴기이다. 단 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨라닐기 및 치환 또는 비치환된 디벤조티오페닐기는 제외되고,

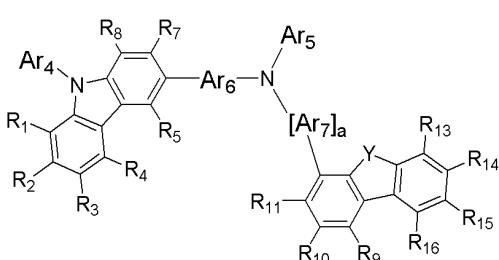
Ar_1 및 Ar_2 가 모두 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이며, Ar_3 가 헤�테로아릴기를 제외한 치환기로 치환되거나 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이며, Y가 0인 경우는 제외된다.

청구항 4

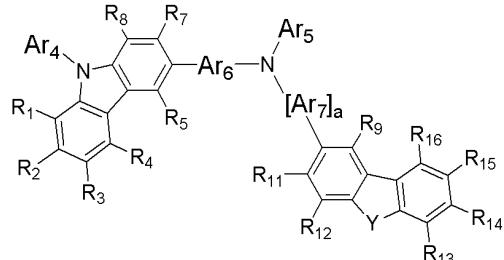
제 1 항에 있어서,

상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 8 또는 9로 표시되는 것인 유기광전소자용 화합물:

[화학식 8]



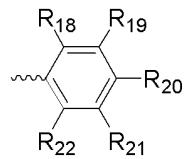
[화학식 9]



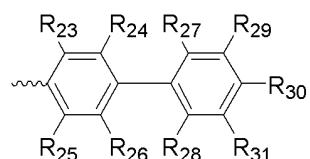
상기 화학식 8 및 9에서,

Ar_4 및 Ar_5 은 서로 동일하거나 상이하며, 독립적으로 하기 화학식 10 내지 18로 표시되는 치환기 중 어느 하나로 선택되고,

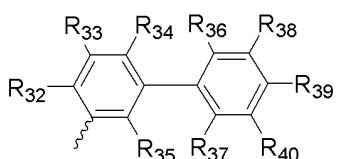
[화학식 10]



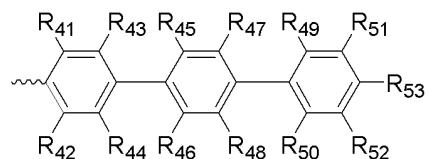
[화학식 11]



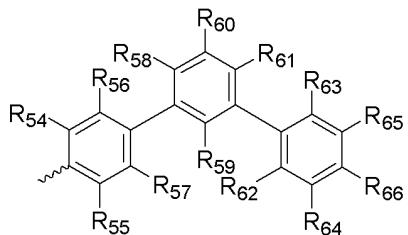
[화학식 12]



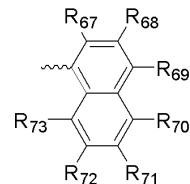
[화학식 13]



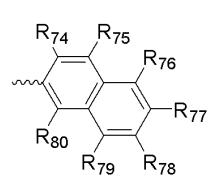
[화학식 14]



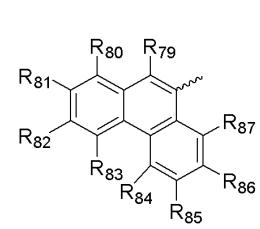
[화학식 15]



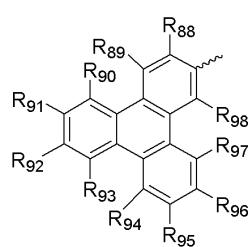
[화학식 16]



[화학식 17]



[화학식 18]



상기 R₁ 내지 R₅, R₇ 내지 R₁₆ 및 R₁₈ 내지 R₉₈은 서로 동일하거나 상이하며, 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 헤드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기 및 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기로 이루어진 군에서 선택되고,

Ar₆ 및 Ar₇은 서로 동일하거나 상이하며, 독립적으로 상기 화학식 10 내지 18로 표시되는 치환기 중 어느 하나로 선택되며, 상기 선택된 치환기의 상기 R₁₈ 내지 R₉₈ 중 어느 하나는 인접한 원자와의 결합을 나타내고,

a는 0 또는 1이고,

Y는 S 또는 SO₂(O=S=O)이다.

청구항 5

제 1 항에 있어서,

상기 Ar₃은 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 폐난트릴기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐일기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 폐릴레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오페닐기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸

일기, 치환 또는 비치환된 퍼리딜기, 치환 또는 비치환된 퍼리미디닐기, 치환 또는 비치환된 퍼라지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈옥사진일기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진일기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페나진일기, 치환 또는 비치환된 페노티아진일기 및 치환 또는 비치환된 페녹사진일기로 이루어진 군에서 선택되는 것인 유기광전소자용 화합물.

청구항 6

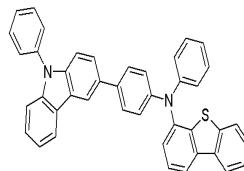
제 4 항에 있어서,

상기 Ar_4 는 상기 화학식 10 내지 18로 표시되는 치환기 중 어느 하나에서 선택되나, 상기 Ar_4 로 선택된 치환기의 R_{18} 내지 R_{98} 중 적어도 어느 하나는 수소가 아닌 것인 유기광전소자용 화합물.

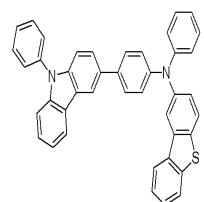
청구항 7

하기 화학식 중 어느 하나로 표시되는 유기광전소자용 화합물.

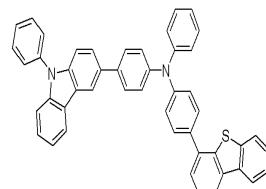
[A-2]



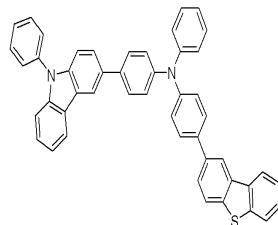
[A-4]



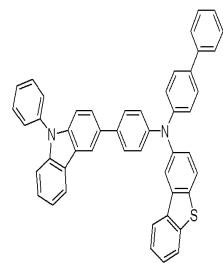
[A-6]



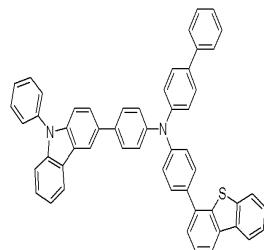
[A-8]



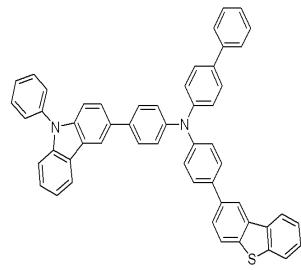
[A-9]



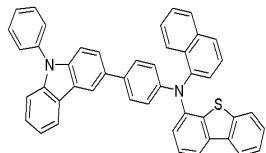
[A-11]



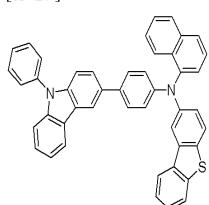
[A-13]



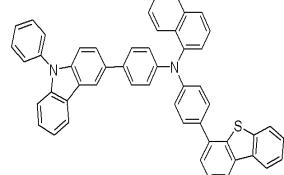
[A-15]



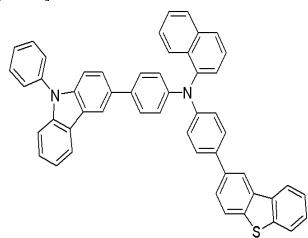
[A-17]



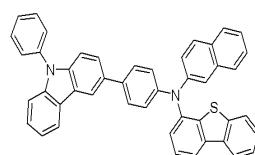
[A-19]



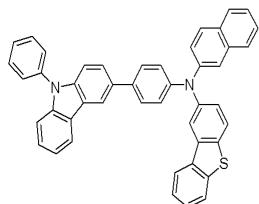
[A-21]



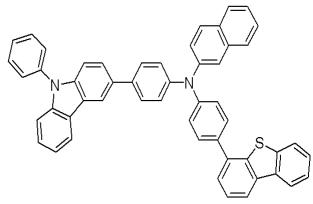
[A-23]



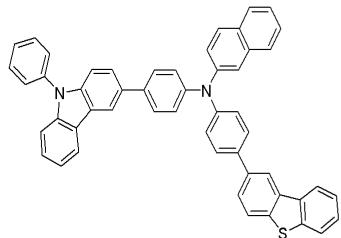
[A-25]



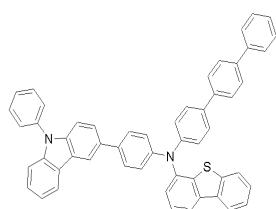
[A-27]



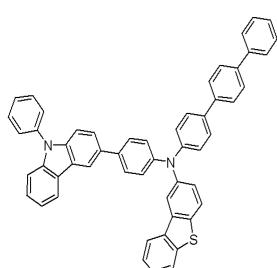
[A-29]



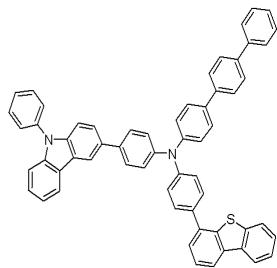
[A-31]



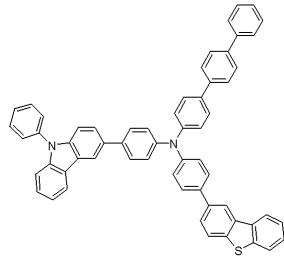
[A-33]



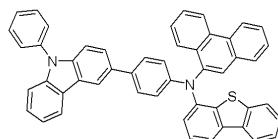
[A-35]



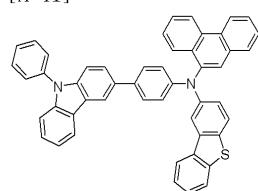
[A-37]



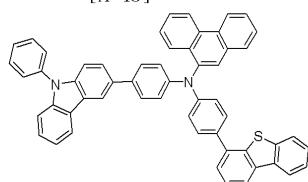
[A-39]



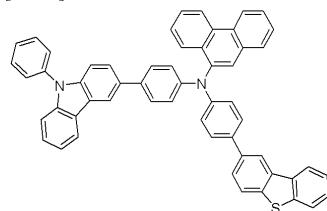
[A-41]



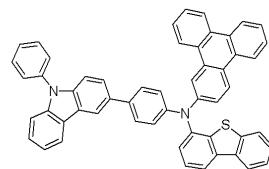
[A-43]



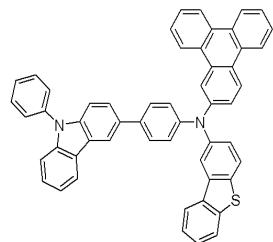
[A-45]



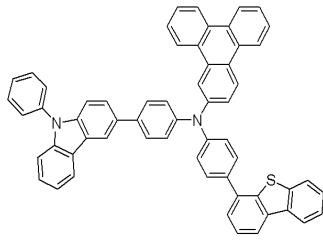
[A-47]



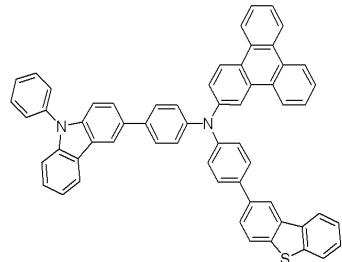
[A-49]



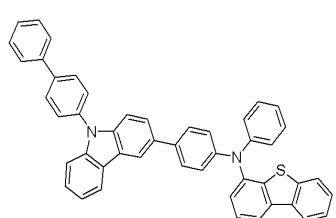
[A-51]



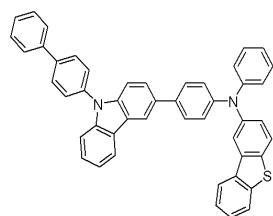
[A-53]



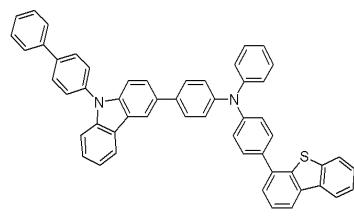
[A-55]



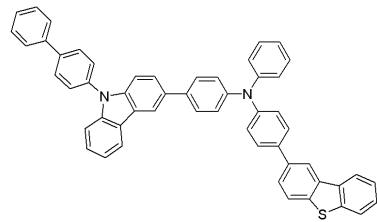
[A-57]



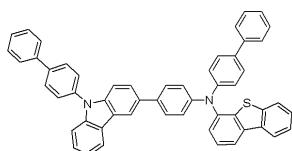
[A-59]



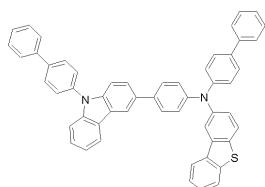
[A-61]



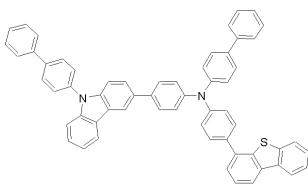
[A-63]



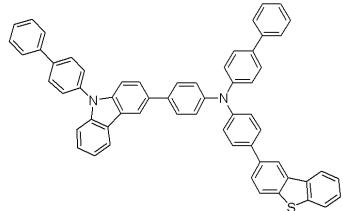
[A-65]



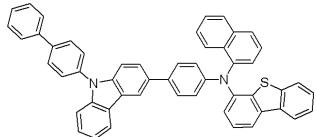
[A-67]



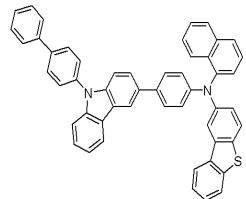
[A-69]



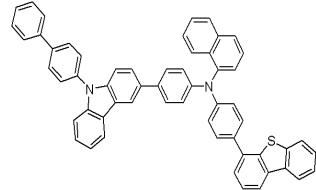
[A-71]



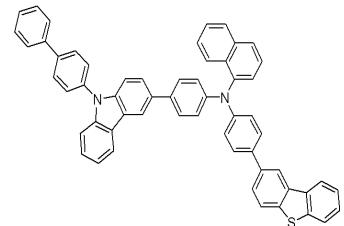
[A-73]



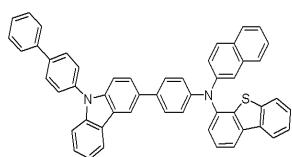
[A-75]



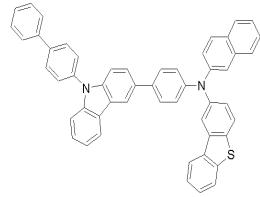
[A-77]



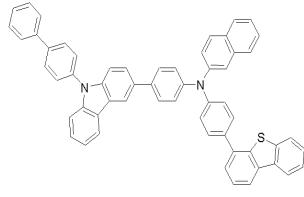
[A-79]



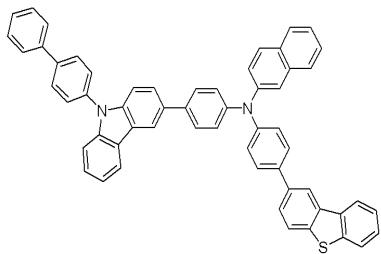
[A-81]



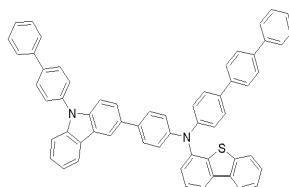
[A-83]



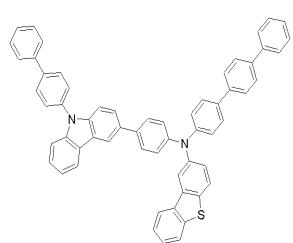
[A-85]



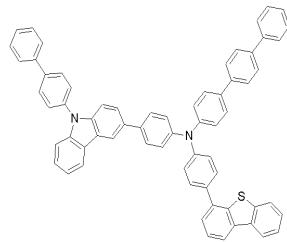
[A-87]



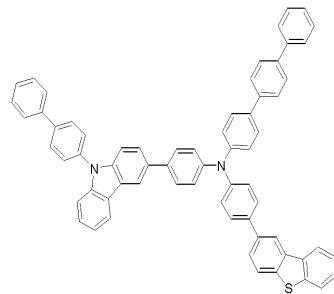
[A-89]



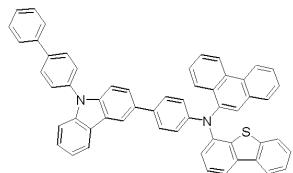
[A-91]



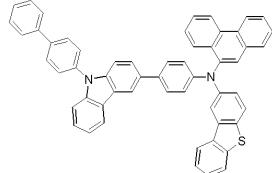
[A-93]



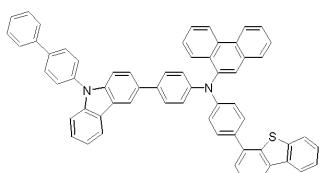
[A-95]



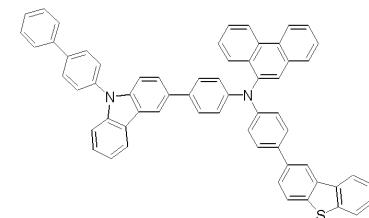
[A-97]



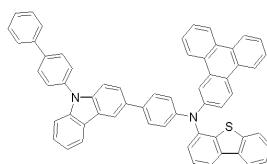
[A-99]



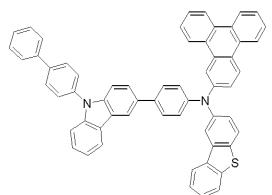
[A-101]



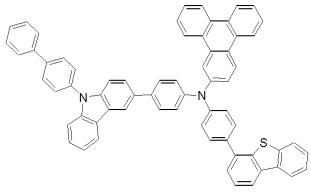
[A-103]



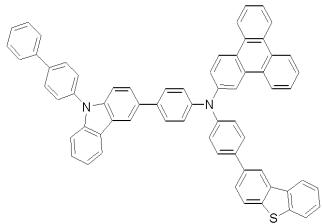
[A-105]



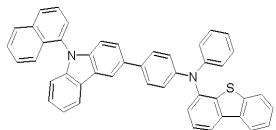
[A-107]



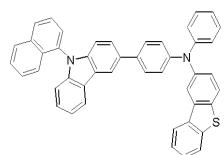
[A-109]



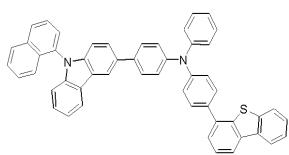
[A-111]



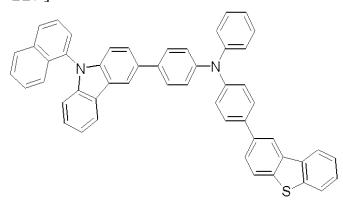
[A-113]



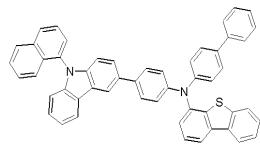
[A-115]



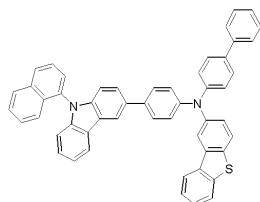
[A-117]



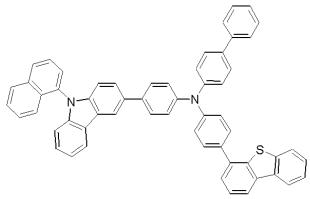
[A-119]



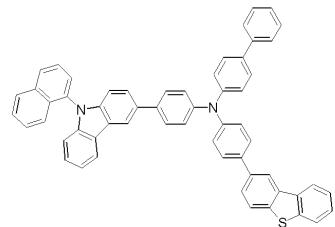
[A-121]



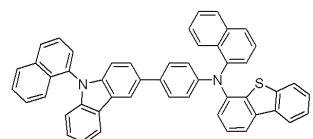
[A-123]



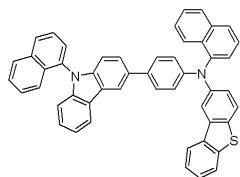
[A-125]



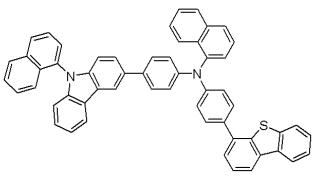
[A-127]



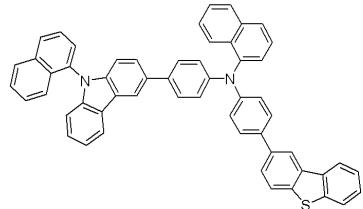
[A-129]



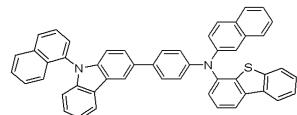
[A-131]



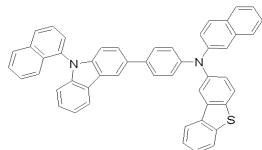
[A-133]



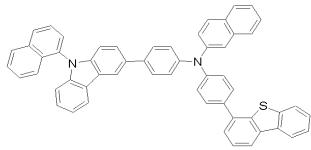
[A-135]



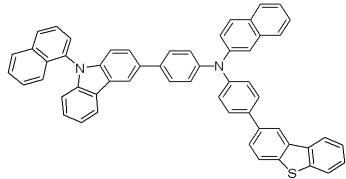
[A-137]



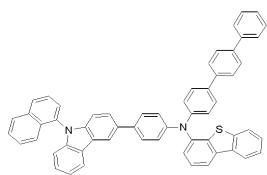
[A-139]



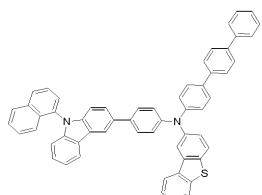
[A-141]



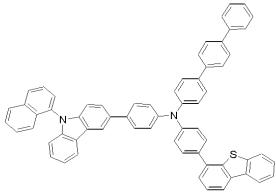
[A-143]



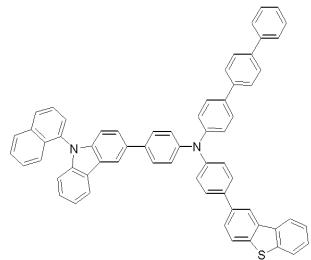
[A-145]



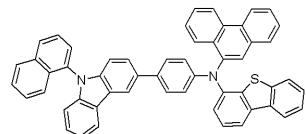
[A-147]



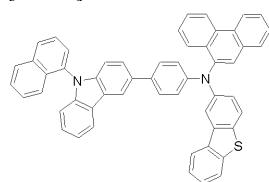
[A-149]



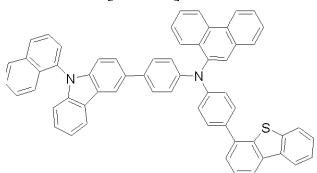
[A-151]



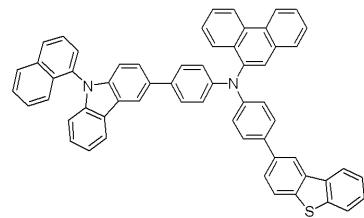
[A-153]



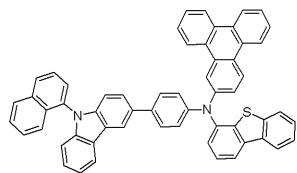
[A-155]



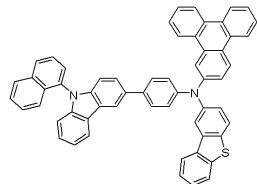
[A-157]



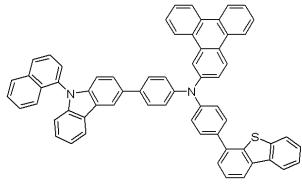
[A-159]



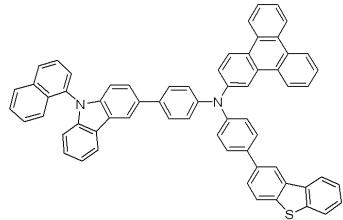
[A-161]



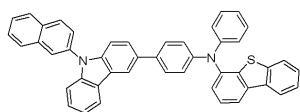
[A-163]



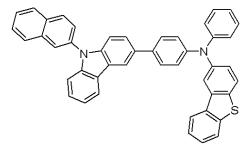
[A-165]



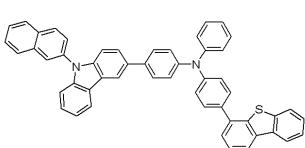
[A-167]



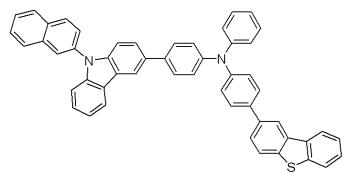
[A-169]



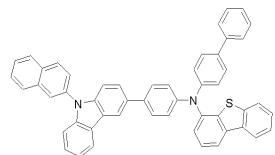
[A-171]



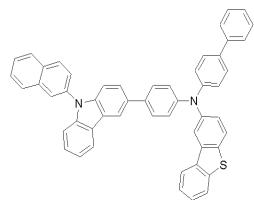
[A-173]



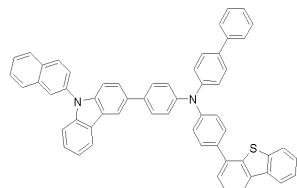
[A-175]



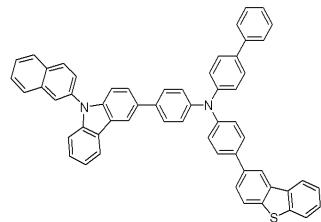
[A-177]



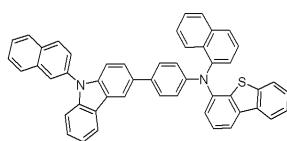
[A-179]



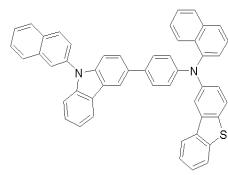
[A-181]



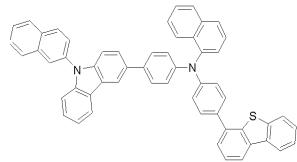
[A-183]



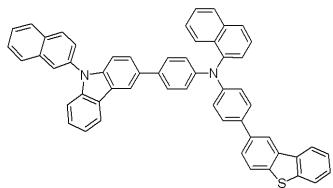
[A-185]



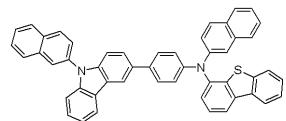
[A-187]



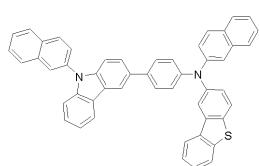
[A-189]



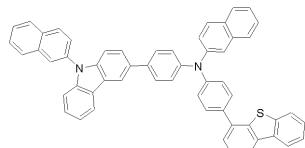
[A-191]



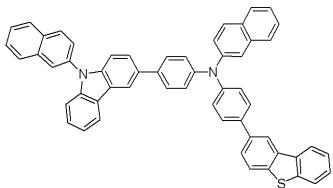
[A-193]



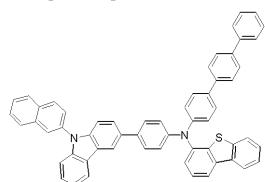
[A-195]



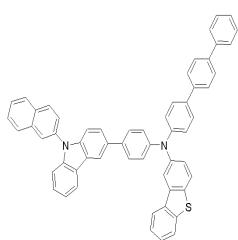
[A-197]



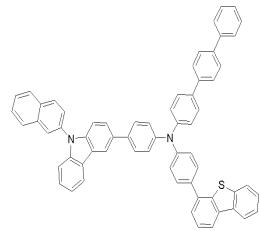
[A-199]



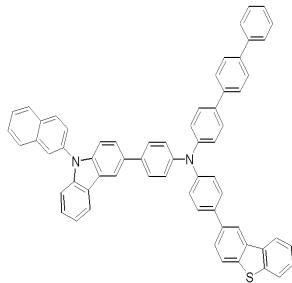
[A-201]



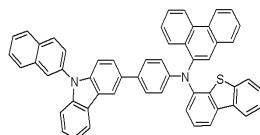
[A-203]



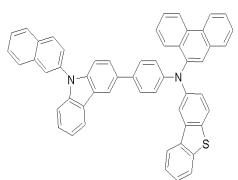
[A-205]



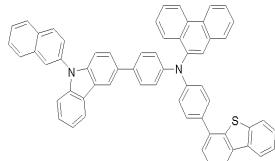
[A-207]



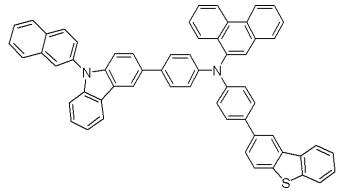
[A-209]



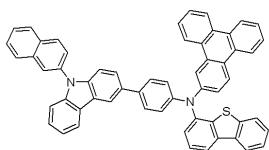
[A-211]



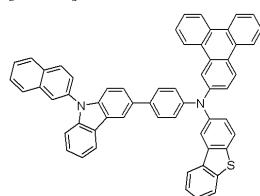
[A-213]



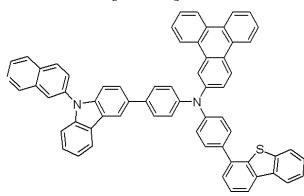
[A-215]



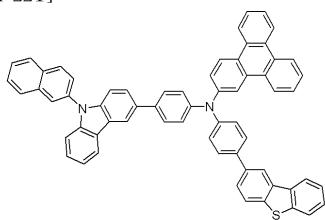
[A-217]



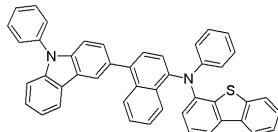
[A-219]



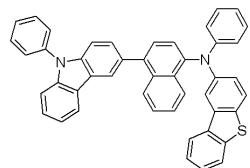
[A-221]



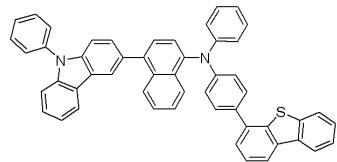
[A-223]



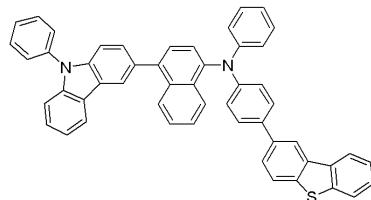
[A-225]



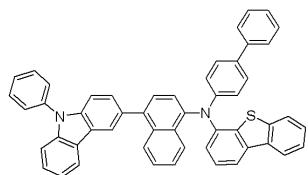
[A-227]



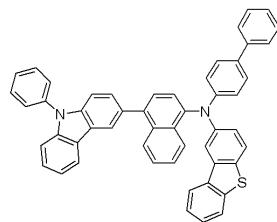
[A-229]



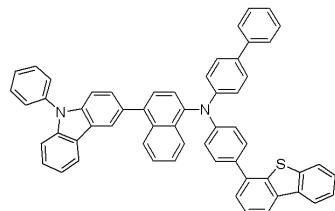
[A-231]



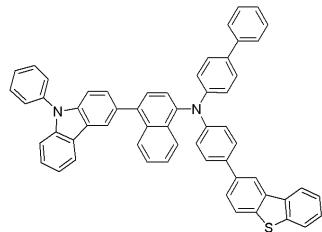
[A-233]



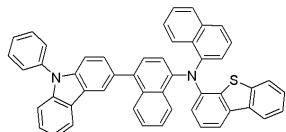
[A-235]



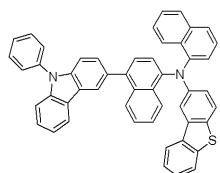
[A-237]



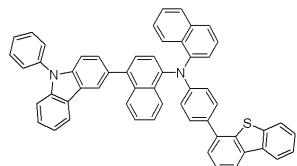
[A-239]



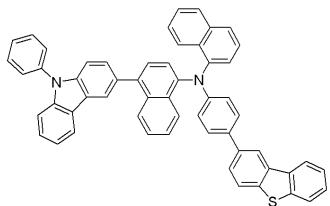
[A-241]



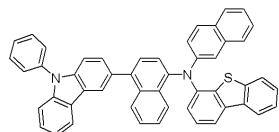
[A-243]



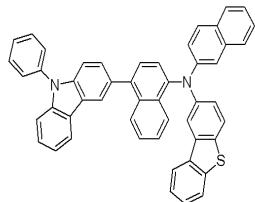
[A-245]



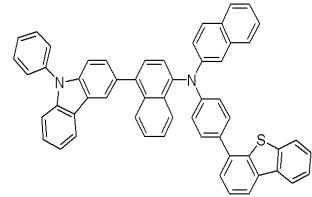
[A-247]



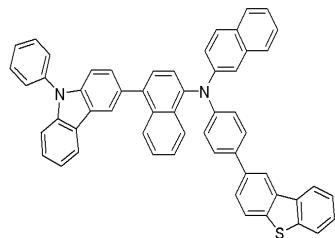
[A-249]



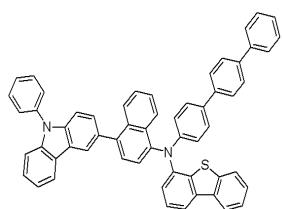
[A-251]



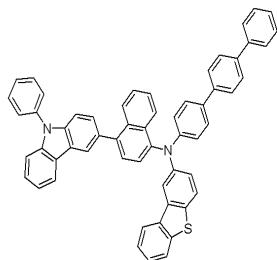
[A-253]



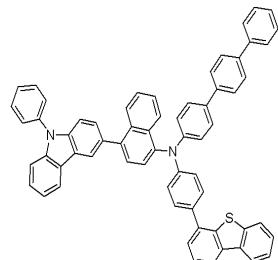
[A-255]



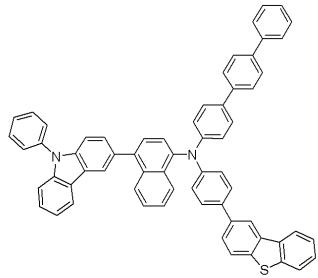
[A-257]



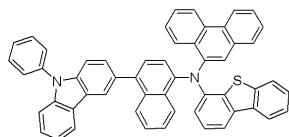
[A-259]



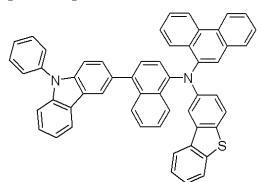
[A-261]



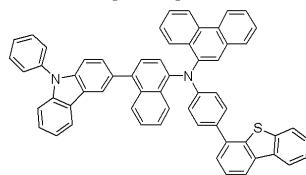
[A-263]



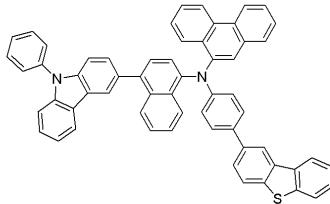
[A-265]



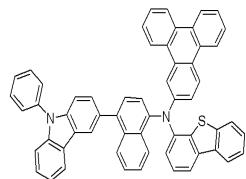
[A-267]



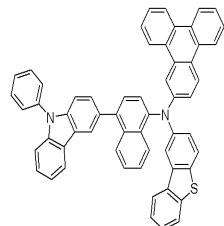
[A-269]



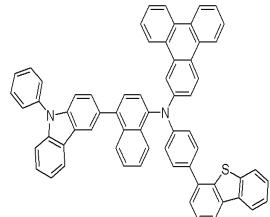
[A-271]



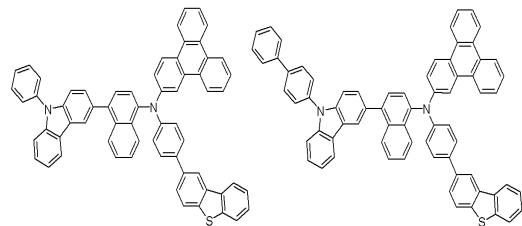
[A-273]



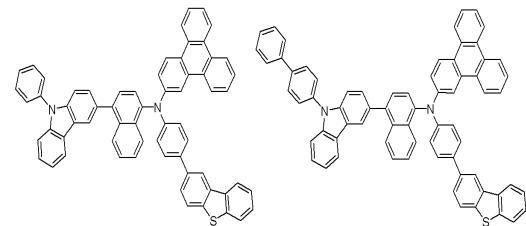
[A-275]



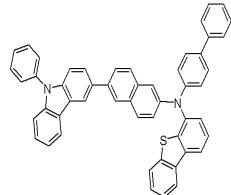
[A-277]



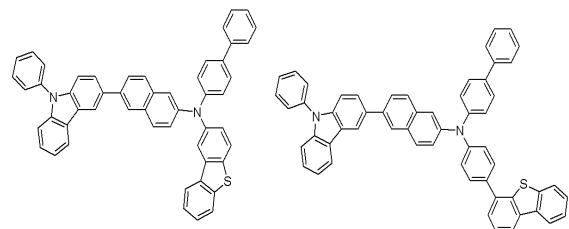
[A-278]



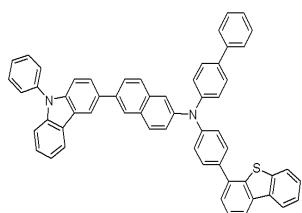
[A-280]



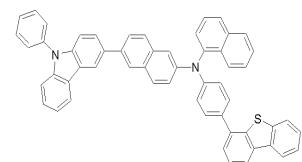
[A-283]



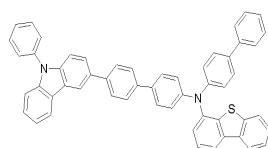
[A-284]



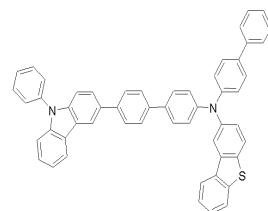
[A-287]



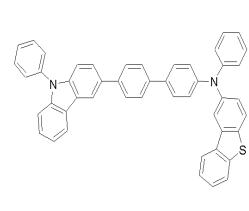
[A-289]



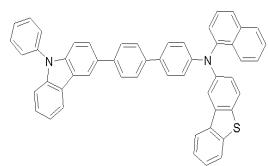
[A-292]



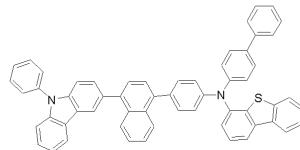
[A-293]



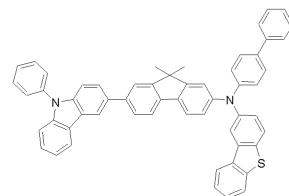
[A-296]



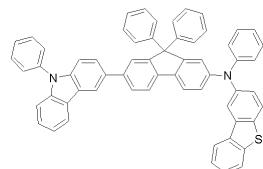
[A-298]



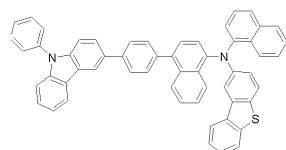
[A-301]



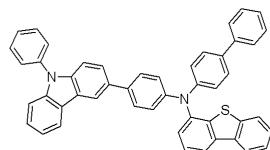
[A-302]



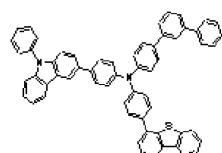
[A-305]



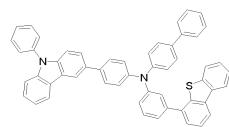
[A-415]



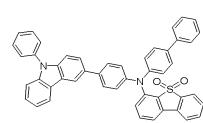
[A-458]



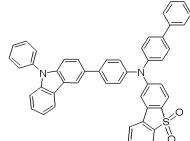
[A-470]



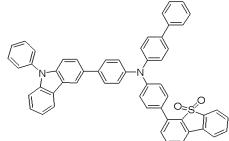
[A-471]



[A-472]



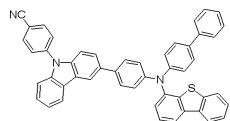
[A-473]



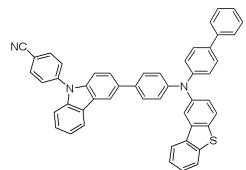
청구항 8

하기 화학식 중 어느 하나로 표시되는 유기광전소자용 화합물.

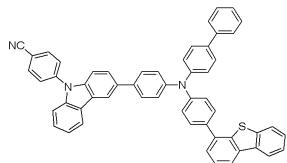
[A-418]



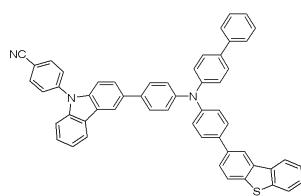
[A-420]



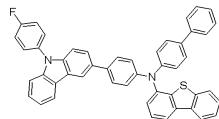
[A-422]



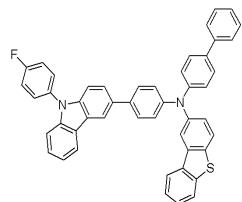
[A-424]



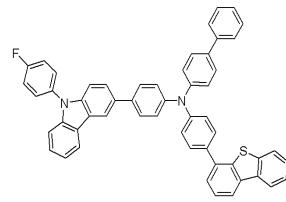
[A-426]



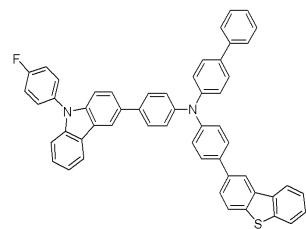
[A-428]



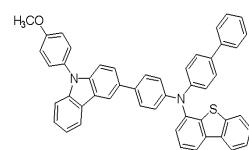
[A-430]



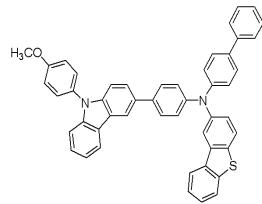
[A-432]



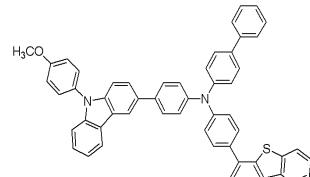
[A-434]



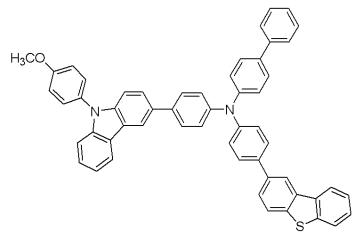
[A-436]



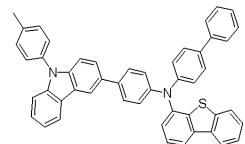
[A-438]



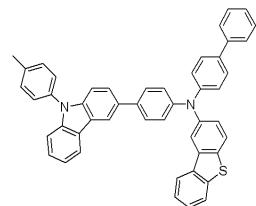
[A-440]



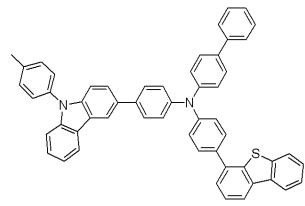
[A-442]



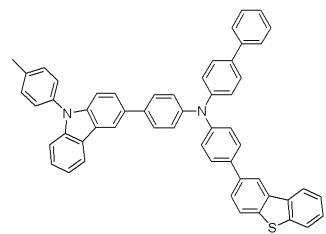
[A-444]



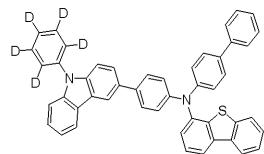
[A-446]



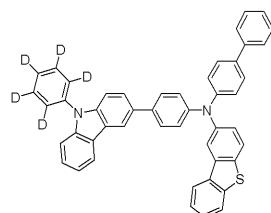
[A-448]



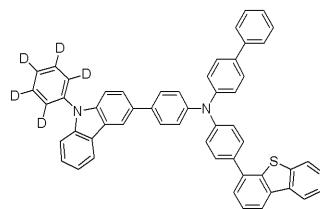
[A-450]



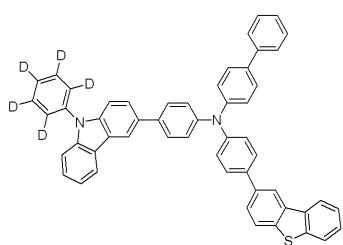
[A-452]



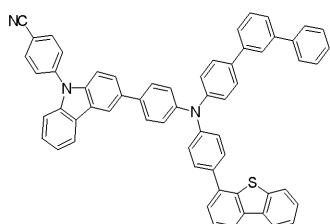
[A-454]



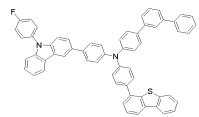
[A-456]



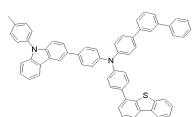
[A-460]



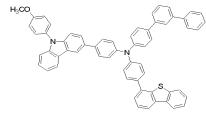
[A-462]



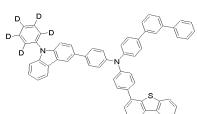
[A-464]



[A-466]



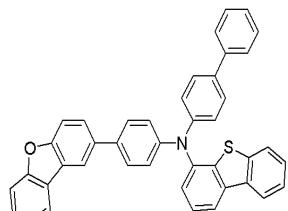
[A-468]



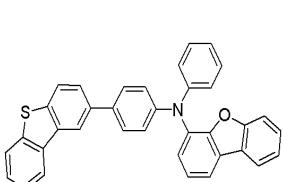
청구항 9

하기 화학식 중 어느 하나로 표시되는 유기광전소자용 화합물.

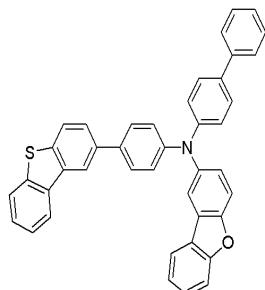
[A-325]



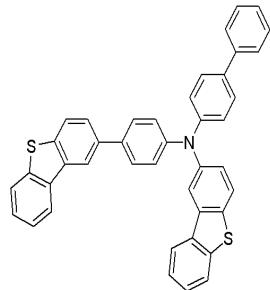
[A-326]



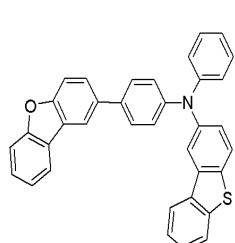
[A-327]



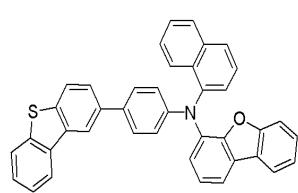
[A-328]



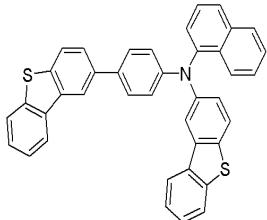
[A-329]



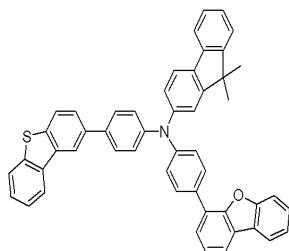
[A-331]



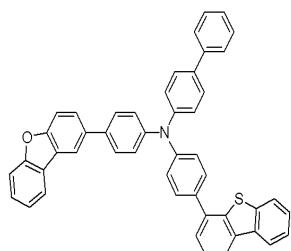
[A-332]



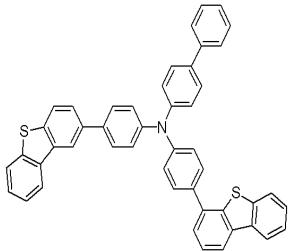
[A-333]



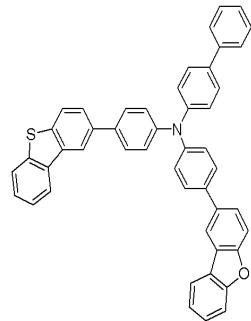
[A-334]



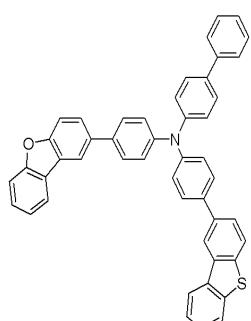
[A-335]



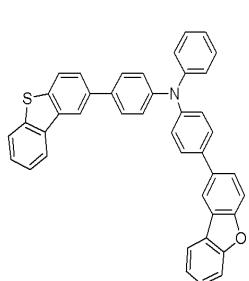
[A-336]



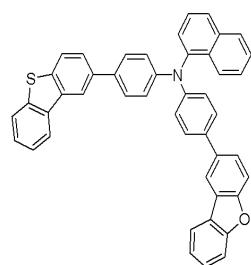
[A-337]



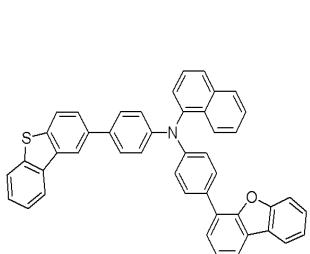
[A-338]



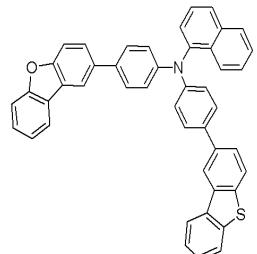
[A-339]



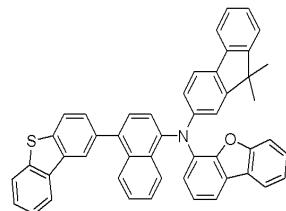
[A-340]



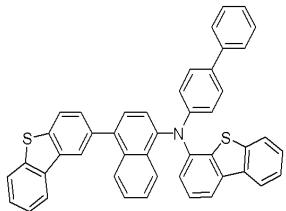
[A-341]



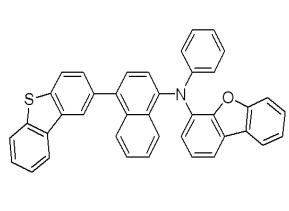
[A-342]



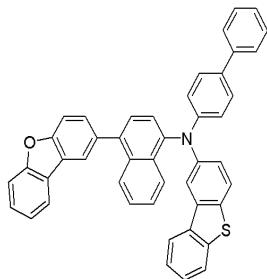
[A-343]



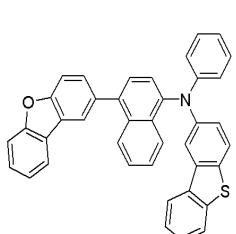
[A-344]



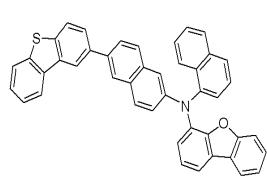
[A-346]



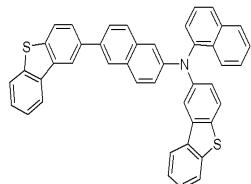
[A-347]



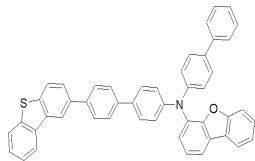
[A-349]



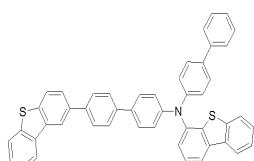
[A-350]



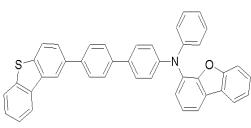
[A-351]



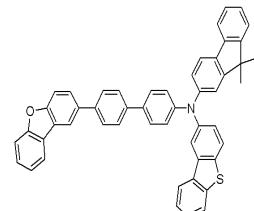
[A-352]



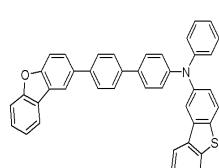
[A-353]



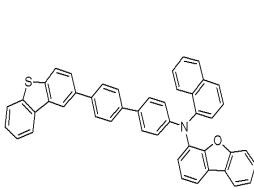
[A-355]



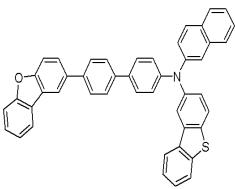
[A-356]



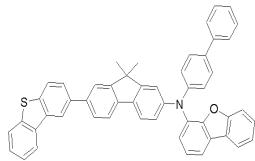
[A-358]



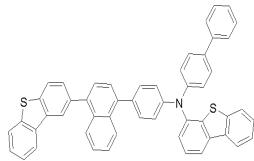
[A-359]



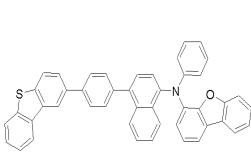
[A-360]



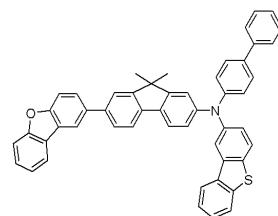
[A-361]



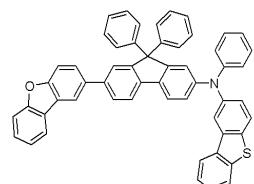
[A-362]



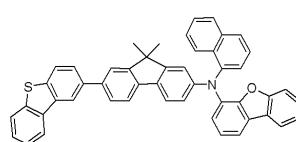
[A-364]



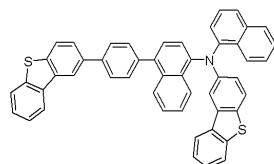
[A-365]



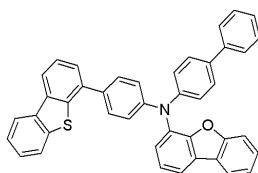
[A-367]



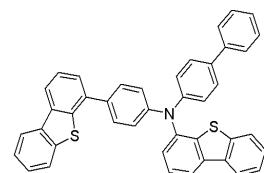
[A-368]



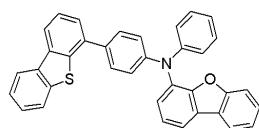
[A-369]



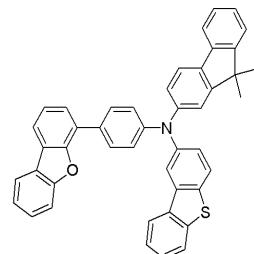
[A-370]



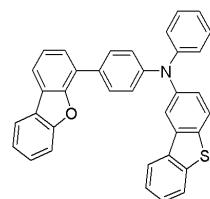
[A-371]



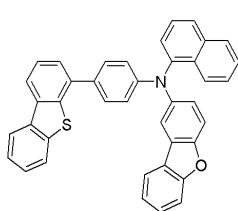
[A-373]



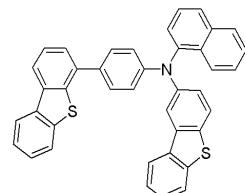
[A-374]



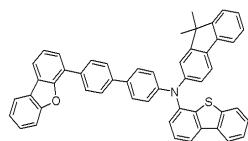
[A-375]



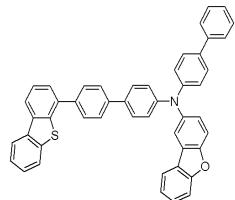
[A-377]



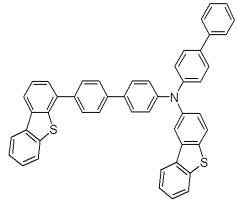
[A-379]



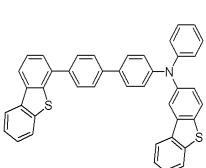
[A-381]



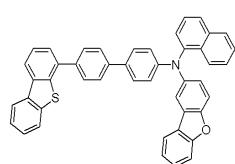
[A-382]



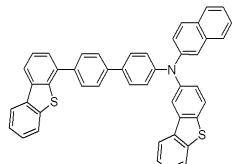
[A-383]



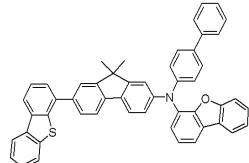
[A-384]



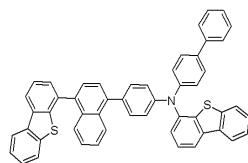
[A-386]



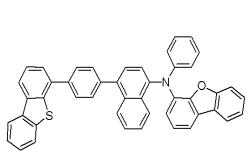
[A-387]



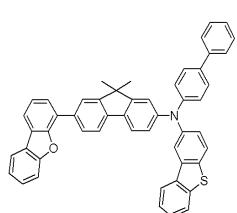
[A-388]



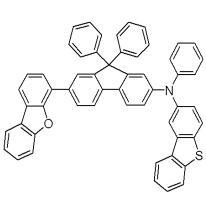
[A-389]



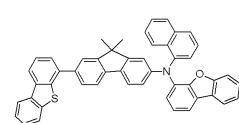
[A-391]



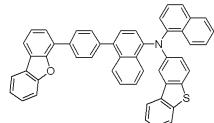
[A-392]



[A-394]



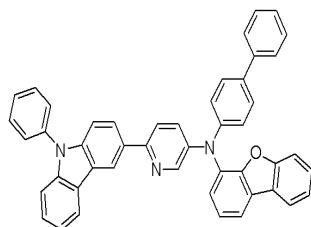
[A-395]



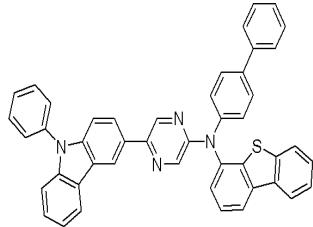
청구항 10

하기 화학식 중 어느 하나로 표시되는 유기광전소자용 화합물.

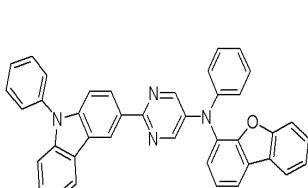
[A-306]



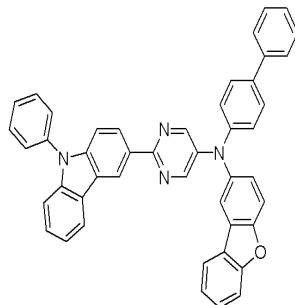
[A-307]



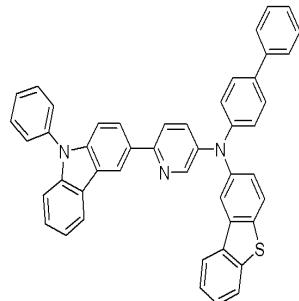
[A-308]



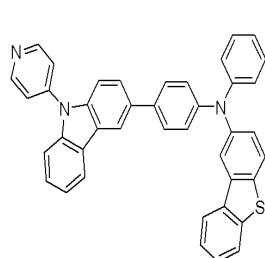
[A-309]



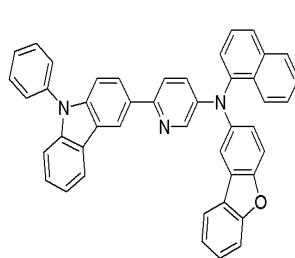
[A-310]



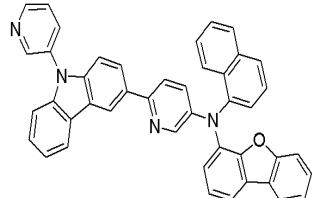
[A-311]



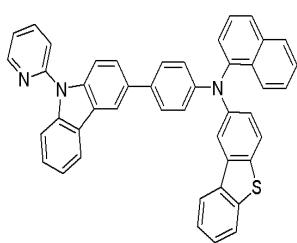
[A-312]



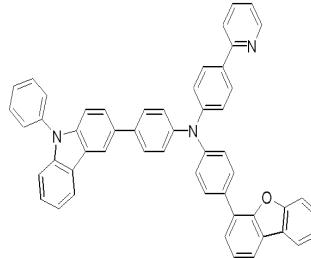
[A-313]



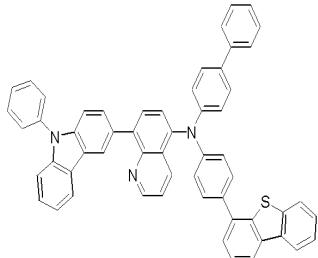
[A-314]



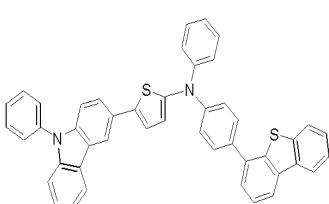
[A-315]



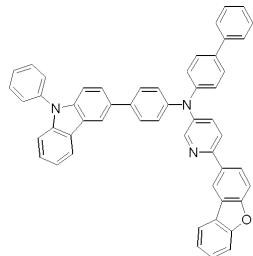
[A-316]



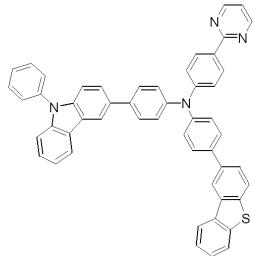
[A-317]



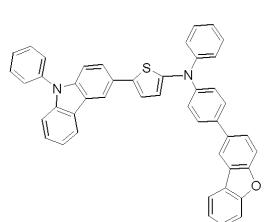
[A-318]



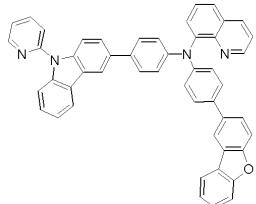
[A-319]



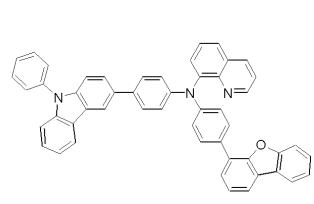
[A-320]



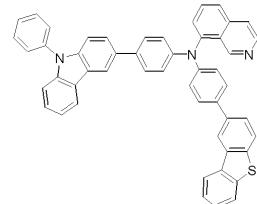
[A-321]



[A-322]



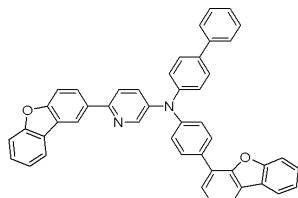
[A-323]



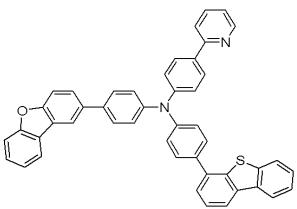
청구항 11

하기 화학식 중 어느 하나로 표시되는 유기광전소자용 화합물.

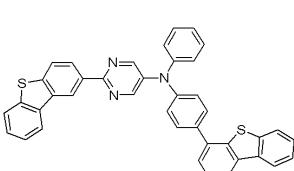
[A-396]



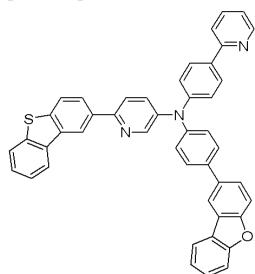
[A-397]



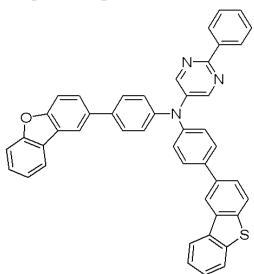
[A-398]



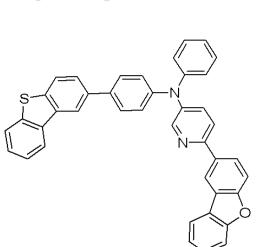
[A-399]



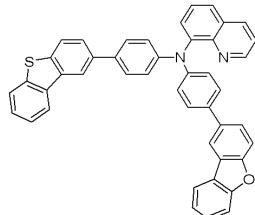
[A-400]



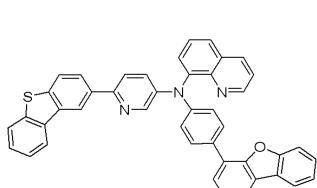
[A-401]



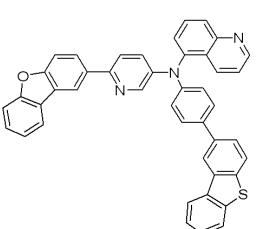
[A-402]



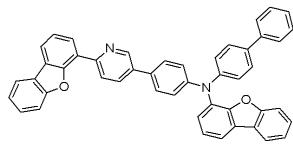
[A-403]



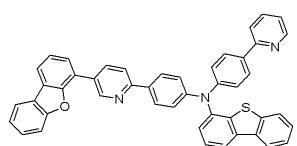
[A-404]



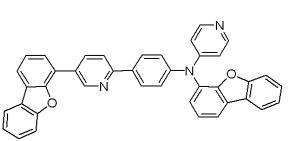
[A-405]

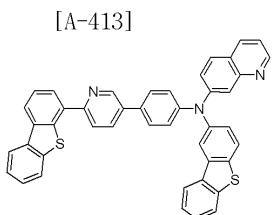
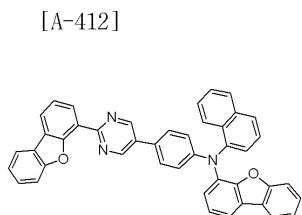
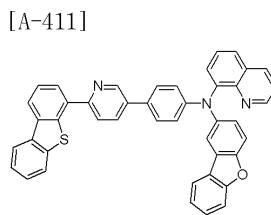
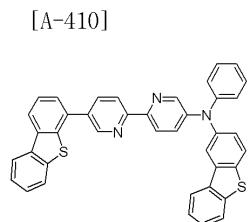
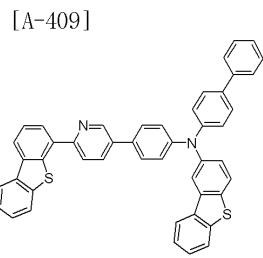
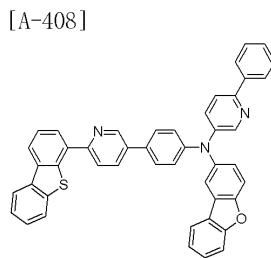


[A-406]



[A-407]





청구항 12

제 1 항에 있어서,

상기 유기광전소자용 화합물은 유기발광소자의 정공수송재료 또는 정공주입재료로 이용될 수 있는 것인 유기광전소자용 화합물.

청구항 13

제 1 항에 있어서,

상기 유기광전소자용 화합물은 3중항 여기에너지(T1) 2.0eV 이상인 것인 유기광전소자용 화합물.

청구항 14

제 1 항에 있어서,

상기 유기광전소자는 유기발광소자, 유기태양전지, 유기트랜지스터, 유기 감광체 드럼 및 유기메모리소자로 이루어진 군에서 선택되는 것인 유기광전소자용 화합물.

청구항 15

양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 적어도 한 층 이상의 유기박막층을 포함하는 유기발광소자에 있어서,

상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 상기 제 1 항에 따른 유기광전소자용 화합물을 포함하는 것인 유기발광소자.

청구항 16

제 15 항에 있어서,

상기 유기박막층은 발광층, 정공수송층, 정공주입층, 전자수송층, 전자주입층, 정공차단층 및 이들의 조합을 이루어진 군에서 선택되는 것인 유기발광소자.

청구항 17

제 15 항에 있어서,

상기 유기광전소자용 화합물은 정공수송층 또는 정공주입층 내에 포함되는 것인 유기발광소자.

청구항 18

제 15 항에 있어서,

상기 유기광전소자용 화합물은 발광층 내에 포함되는 것인 유기발광소자.

청구항 19

제 15 항에 있어서,

상기 유기광전소자용 화합물은 발광층 내에 인광 또는 형광 호스트 재료로서 사용되는 것인 유기발광소자.

청구항 20

제 15 항의 유기발광소자를 포함하는 것인 표시장치.

명세서**기술 분야**

- [0001] 수명, 효율, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성이 우수한 유기광전소자를 제공할 수 있는 유기광전소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기광전소자에 관한 것이다.
- 배경기술**
- [0002] 유기광전소자(organic photoelectric device)라 함은 정공 또는 전자를 이용한 전극과 유기물 사이에서의 전하교류를 필요로 하는 소자를 의미한다.
- [0003] 유기광전소자는 동작 원리에 따라 하기와 같이 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 첫째는 외부의 광원으로부터 소자로 유입된 광자에 의하여 유기물층에서 엑시톤(exciton)이 형성되고 이 엑시톤이 전자와 정공으로 분리되고, 이 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되어 전류원(전압원)으로 사용되는 형태의 전자소자이다.
- [0004] 둘째는 2 개 이상의 전극에 전압 또는 전류를 가하여 전극과 계면을 이루는 유기물 반도체에 정공 또는 전자를 주입하고, 주입된 전자와 정공에 의하여 동작하는 형태의 전자소자이다.
- [0005] 유기광전소자의 예로는 유기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체 드럼(organic photo conductor drum), 유기트랜지스터 등이 있으며, 이들은 모두 소자의 구동을 위하여 정공의 주입 또는 수송 물질, 전자의 주입 또는 수송 물질, 또는 발광 물질을 필요로 한다.
- [0006] 특히, 유기발광소자(organic light emitting diodes, OLED)는 최근 평판 디스플레이(flat panel display)의 수요가 증가함에 따라 주목받고 있다. 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다.
- [0007] 이러한 유기발광소자는 유기발광재료에 전류를 가하여 전기에너지를 빛으로 전환시키는 소자로서 통상 양극(anode)과 음극(cathode) 사이에 기능성 유기물 층이 삽입된 구조로 이루어져 있다. 여기서 유기물층은 유기광전소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.
- [0008] 이러한 유기발광소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공(hole)이, 음극에서는 전자(electron)가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만나 재결합(recombination)에 의해 에너지

가 높은 여기자를 형성하게 된다. 이때 형성된 여기자가 다시 바닥상태(ground state)로 이동하면서 특정한 파장을 갖는 빛이 발생하게 된다.

- [0009] 최근에는, 형광 발광물질뿐 아니라 인광 발광물질도 유기광전소자의 발광물질로 사용될 수 있음이 알려졌으며, 이러한 인광 발광은 바닥상태(ground state)에서 여기상태(excited state)로 전자가 전이한 후, 계간 전이(intersystem crossing)를 통해 단일항 여기자가 삼중항 여기자로 비발광 전이된 다음, 삼중항 여기자가 바닥상태로 전이하면서 발광하는 메카니즘으로 이루어진다.
- [0010] 상기한 바와 같이 유기발광소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하 수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다.
- [0011] 또한, 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 수 있다.
- [0012] 한편, 발광 재료로서 하나의 물질만 사용하는 경우 분자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율과 안정성을 증가시키기 위하여 발광 재료로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다.
- [0013] 유기발광소자가 전술한 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질, 발광 재료 중 호스트 및/또는 도판트 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하며, 아직까지 안정하고 효율적인 유기발광소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이며, 따라서 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다. 이와 같은 재료 개발의 필요성은 전술한 다른 유기광전소자에서도 마찬가지이다.
- [0014] 또한, 저분자 유기발광소자는 전공 중착법에 의해 박막의 형태로 소자를 제조하므로 효율 및 수명성능이 좋으며, 고분자 유기 발광 소자는 잉크젯(Inkjet) 또는 스픬코팅(spin coating)법을 사용하여 초기 투자비가 적고 대면적화가 유리한 장점이 있다.
- [0015] 저분자 유기발광소자 및 고분자 유기발광소자는 모두 자체발광, 고속응답, 광시야각, 초박형, 고화질, 내구성, 넓은 구동온도범위 등의 장점을 가지고 있어 차세대 디스플레이로 주목을 받고 있다. 특히 기존의 LCD(liquid crystal display)와 비교하여 자체발광형으로서 어두운 곳이나 외부의 빛이 들어와도 시안성이 좋으며, 백라이트가 필요 없어 LCD의 1/3수준으로 두께 및 무게를 줄일 수 있다.
- [0016] 또한, 응답속도가 LCD에 비해 1000배 이상 빠른 마이크로 초 단위여서 잔상이 없는 완벽한 동영상을 구현할 수 있다. 따라서, 최근 본격적인 멀티미디어 시대에 맞춰 최적의 디스플레이로 각광받을 것으로 기대되며, 이러한 장점을 바탕으로 1980년대 후반 최초 개발 이후 효율 80배, 수명 100배 이상에 이르는 급격한 기술발전을 이루어 왔고, 최근에는 40인치 유기발광소자 패널이 발표되는 등 대형화가 급속히 진행되고 있다.
- [0017] 대형화를 위해서는 발광 효율의 증대 및 소자의 수명 향상이 수반되어야 한다. 이때, 소자의 발광 효율은 발광층 내의 정공과 전자의 결합이 원활히 이루어져야 한다. 그러나, 일반적으로 유기물의 전자 이동도는 정공 이동도에 비해 느리므로, 발광층 내의 정공과 전자의 결합이 효율적으로 이루어지기 위해서는, 효율적인 전자 수송층을 사용하여 음극으로부터의 전자 주입 및 이동도를 높이는 동시에, 정공의 이동을 차단할 수 있어야 한다.
- [0018] 또한, 수명 향상을 위해서는 소자의 구동시 발생하는 출열(Joule heat)로 인해 재료가 결정화되는 것을 방지하여야 한다. 따라서, 전자의 주입 및 이동성이 우수하며, 전기화학적 안정성이 높은 유기 화합물을 대한 개발이 필요하다.

발명의 내용

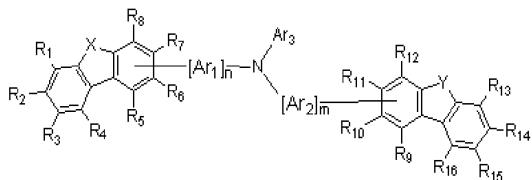
해결하려는 과제

- [0019] 정공 주입 및 수송 역할 또는 전자 주입 및 수송역할을 할 수 있고, 적절한 도편트와 함께 발광 호스트로서의 역할을 할 수 있는 유기광전소자용 화합물을 제공한다.
- [0020] 수명, 효율, 구동전압, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성이 우수한 유기광전소자를 제공하고자 한다.

과제의 해결 수단

- [0021] 본 발명의 일 측면에서는, 하기 화학식 1로 표시되는 유기광전소자용 화합물을 제공한다.

[0022] [화학식 1]



[0023]

[0024] 상기 화학식 1에서,

[0025] R_1 내지 R_{16} 은 서로 동일하거나 상이하며, 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 폐로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술파모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 알킬티울기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로티울기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 우레이드기 및 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기로 이루어진 군에서 선택되고,

[0026] R_1 내지 R_8 중 어느 하나는 Ar_1 과의 결합을 나타내고,[0027] R_9 내지 R_{16} 중 어느 하나는 Ar_2 와의 결합을 나타내고,

[0028] R_1 내지 R_8 의 치환 위치 중에 적어도 하나는 Ar_1 과 시그마 결합으로 연결되어 있을 수 있으며, R_9 내지 R_{16} 의 치환 위치 중에 적어도 하나는 Ar_2 와 시그마 결합으로 연결되어 있을 수 있고,

[0029] X는 NR_{17} , 0, S 및 $SO_2(O=S=O)$ 로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 R_{17} 는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 및 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되고,

[0030] Y는 0, S 및 $SO_2(O=S=O)$ 로 이루어진 군에서 선택되고,

[0031] Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하며, 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤�테로아릴기이고,

[0032] n은 1 내지 4 중 어느 하나인 정수이고,

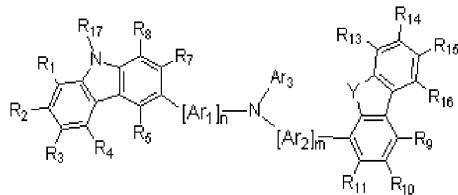
[0033] m은 0 내지 4 중 어느 하나인 정수이고,

[0034] Ar_3 은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤�테로아릴기이다. 단, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨라닐기 및 치환 또는 비치환된 디벤조티오페닐기는 제외되고, 상기 X가 NR_{17} 인 경우 플루오레닐기는 제외된다.

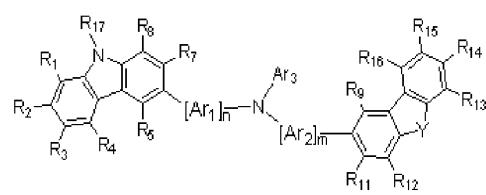
[0035] 상기 X는 NR_{17} , 0, S 및 $SO_2(O=S=O)$ 로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 R_{17} 는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤�테로아릴기이며, 여기서 "치환"이란, 상기 아릴기 또는 헤테로아릴기의 수소 중 적어도 하나가 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된 치환기로 치환된 것이다.

[0036] 상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 2 내지 7 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다.

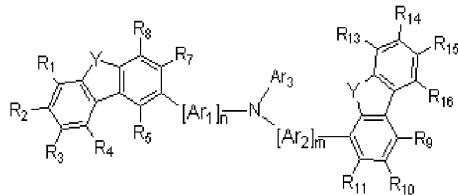
[화학식 2]



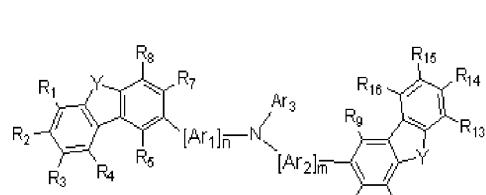
[화학식 3]



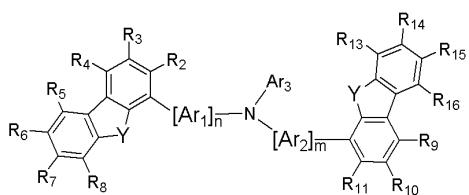
[화학식 4]



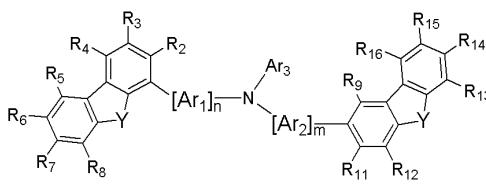
[화학식 5]



[화학식 6]



[화학식 7]



[0037]

[0038] 상기 화학식 2 내지 7에서,

[0039] R₁ 내지 R₁₆은 서로 동일하거나 상이하며, 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 페로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술파모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 우레이드기 및 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기로 이루어진 군에서 선택되고,

[0040] R₁₇은 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 및 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤�테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되고,

[0041] Y는 O, S 및 SO₂(O=S=O)이고,

[0042] Ar₁ 및 Ar₂는 서로 동일하거나 상이하며, 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤�테로아릴기이고,

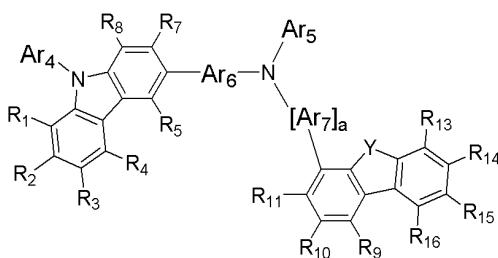
[0043] n은 1 내지 4 중 어느 하나인 정수이고,

[0044] m은 0 내지 4 중 어느 하나인 정수이고,

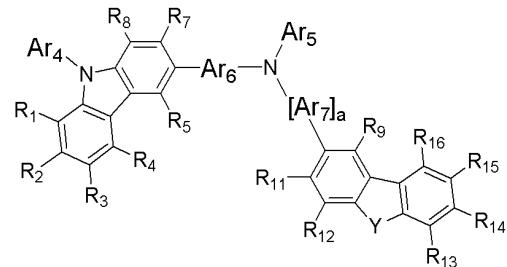
[0045] Ar₃은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이다. 단, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨라닐기 및 치환 또는 비치환된 디벤조티오페닐기는 제외된다.

[0046] 상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 8 또는 9로 표시되는 것일 수 있다.

[화학식 8]



[화학식 9]

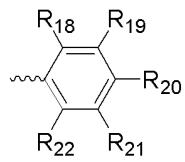


[0047]

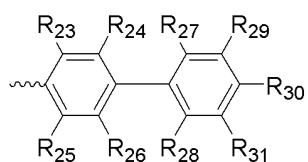
[0048] 상기 화학식 8 및 9에서,

[0049] Ar₄ 및 Ar₅은 서로 동일하거나 상이하며, 독립적으로 하기 화학식 10 내지 18로 표시되는 치환기 중 어느 하나로 선택되고,

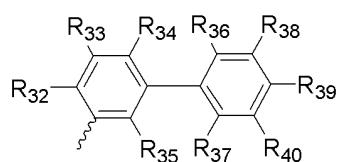
[화학식 10]



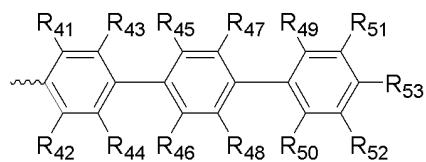
[화학식 11]



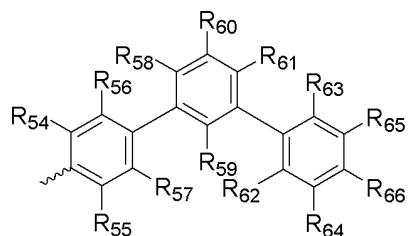
[화학식 12]



[화학식 13]

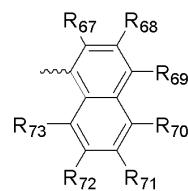


[화학식 14]

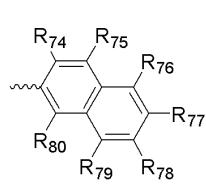


[0050]

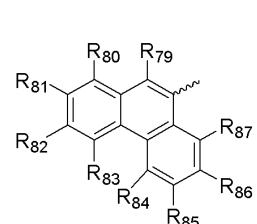
[화학식 15]



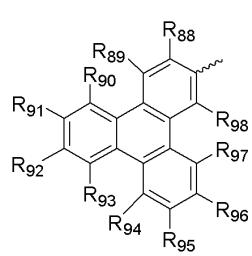
[화학식 16]



[화학식 17]



[화학식 18]



[0052]

[0053] 상기 R₁ 내지 R₅, R₇ 내지 R₁₆ 및 R₁₈ 내지 R₉₈은 서로 동일하거나 상이하며, 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 헤드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1

내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기 및 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기로 이루어진 군에서 선택되고,

[0054] Ar_6 및 Ar_7 은 서로 동일하거나 상이하며, 독립적으로 상기 화학식 9 내지 17로 표시되는 치환기 중 어느 하나로 선택되며, 상기 선택된 치환기의 상기 R_{18} 내지 R_{98} 중 어느 하나는 인접한 원자와의 결합을 나타내고,

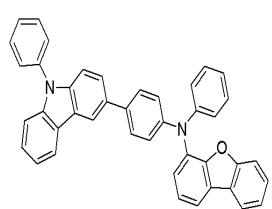
[0055] a는 0 또는 1이다.

[0056] 상기 Ar_3 은 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐일기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오페닐기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸일기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈옥사진일기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진일기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페나진일기, 치환 또는 비치환된 페노티아진일기 및 치환 또는 비치환된 페녹사진일기로 이루어진 군에서 선택되는 것일 수 있다.

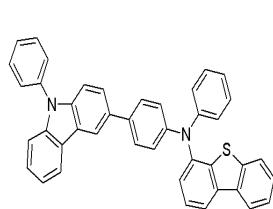
[0057] 상기 Ar_4 는 상기 화학식 10 내지 18로 표시되는 치환기 중 어느 하나에서 선택되나, 상기 Ar_4 로 선택된 치환기의 R_{18} 내지 R_{98} 중 적어도 어느 하나는 수소가 아닌 것일 수 있으며, 구체적으로는 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기 및 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[0058] 상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 A-1 내지 A-305, A-414 내지 A-416, A-457, A-458 또는 A-469 내지 A-473 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

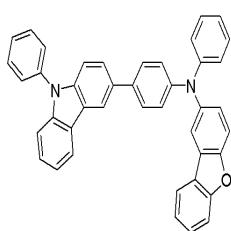
[A-1]



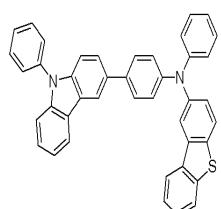
[A-2]



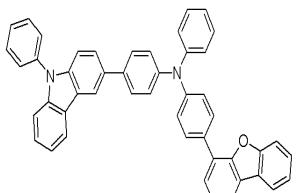
[A-3]



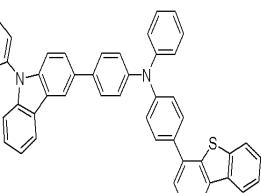
[A-4]



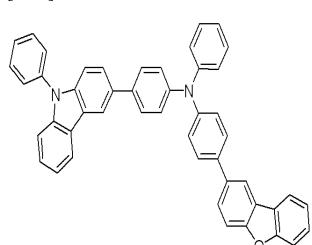
[A-5]



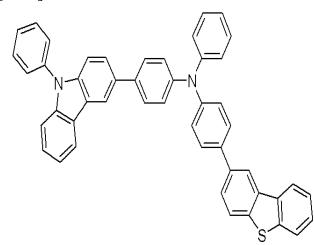
[A-6]



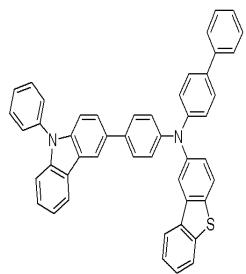
[A-7]



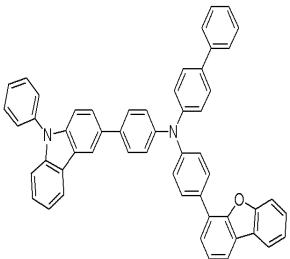
[A-8]



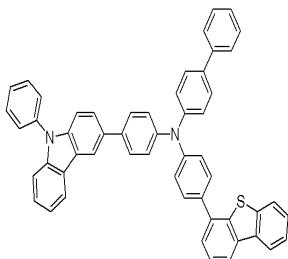
[A-9]



[A-10]

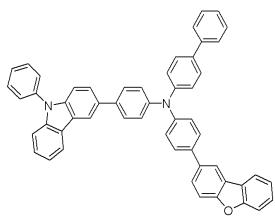


[A-11]

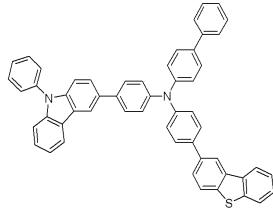


[0059]

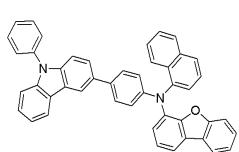
[A-12]



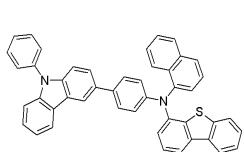
[A-13]



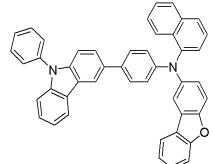
[A-14]



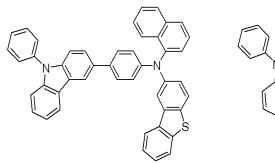
[A-15]



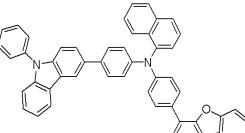
[A-16]



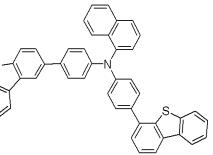
[A-17]



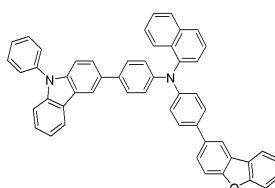
[A-18]



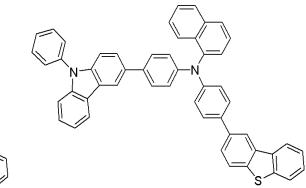
[A-19]



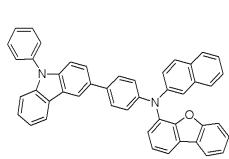
[A-20]



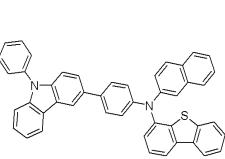
[A-21]



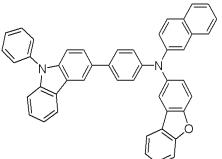
[A-22]



[A-23]

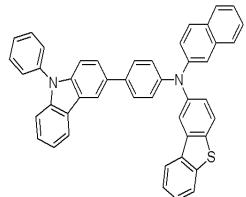


[A-24]

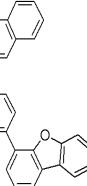


[0060]

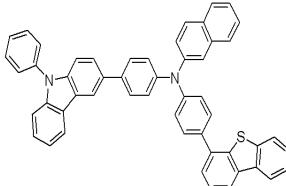
[A-25]



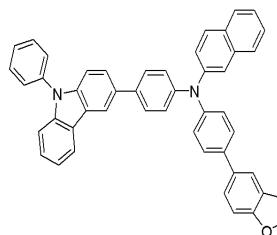
[A-26]



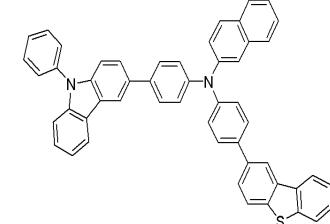
[A-27]



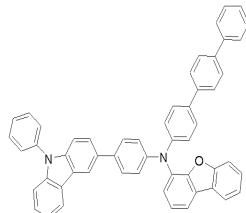
[A-28]



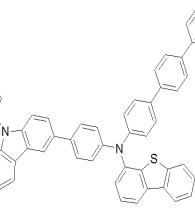
[A-29]



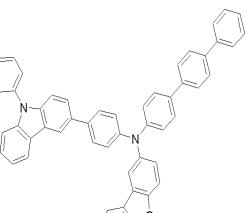
[A-30]



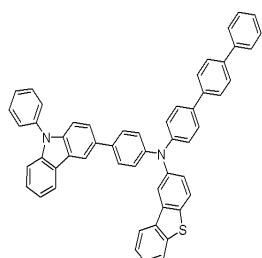
[A-31]



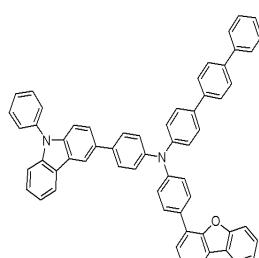
[A-32]



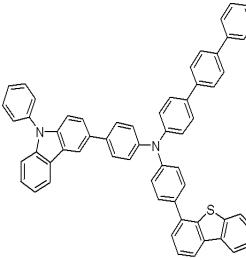
[A-33]



[A-34]

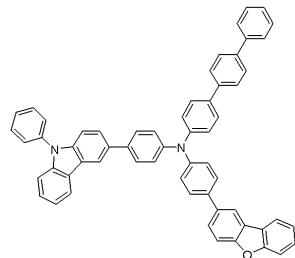


[A-35]

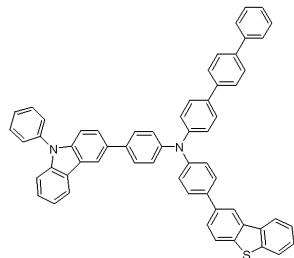


[0061]

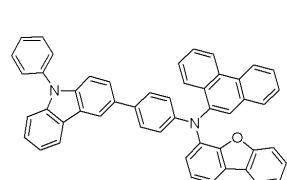
[A-36]



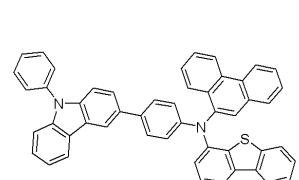
[A-37]



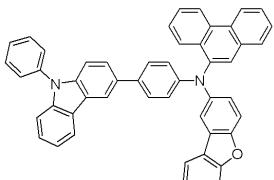
[A-38]



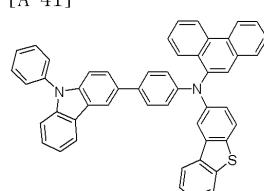
[A-39]



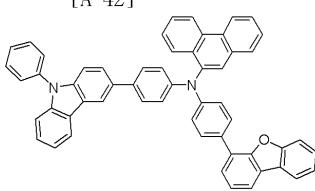
[A-40]



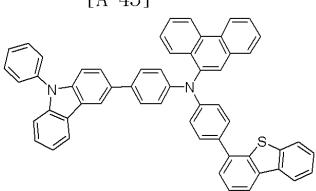
[A-41]



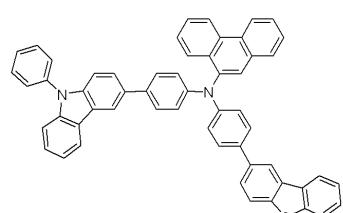
[A-42]



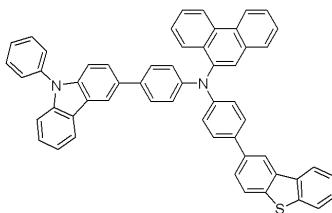
[A-43]



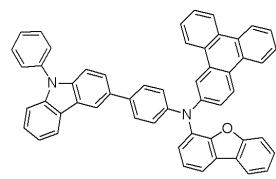
[A-44]



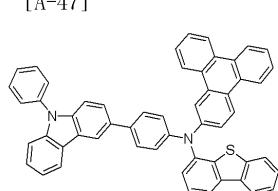
[A-45]



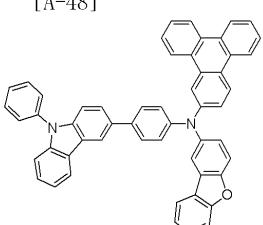
[A-46]



[A-47]

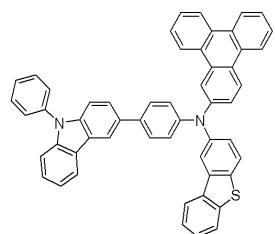


[A-48]

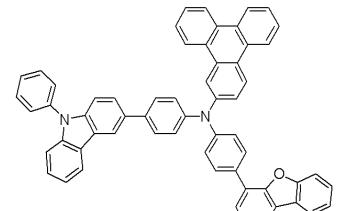


[0062]

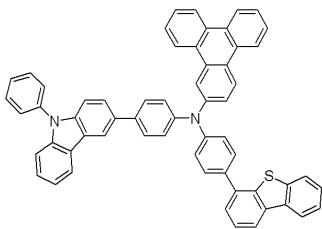
[A-49]



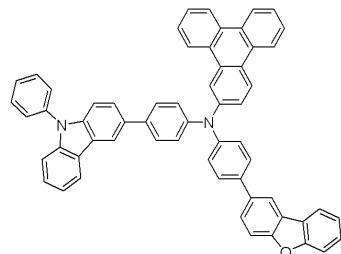
[A-50]



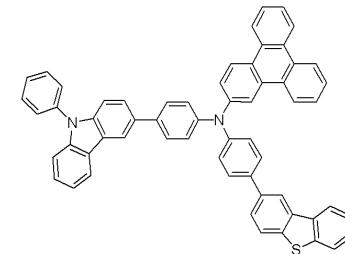
[A-51]



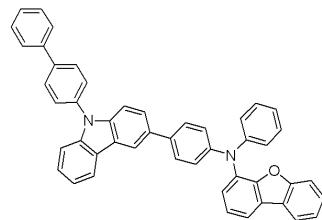
[A-52]



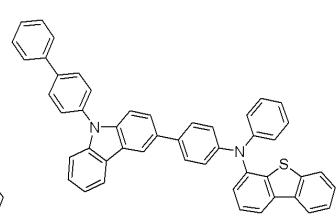
[A-53]



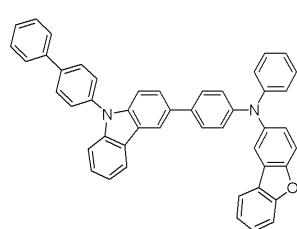
[A-54]



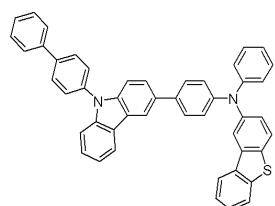
[A-55]



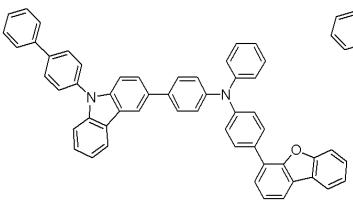
[A-56]



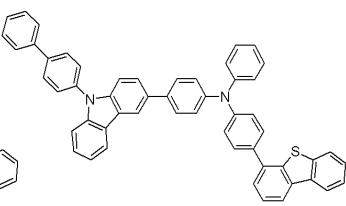
[A-57]



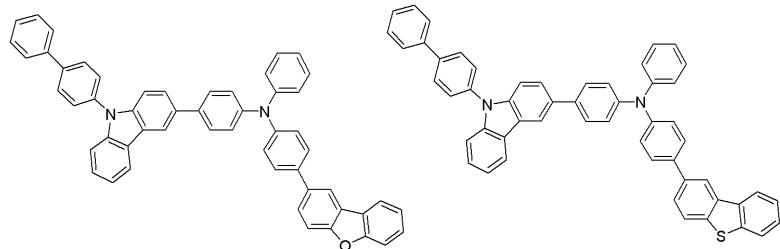
[A-58]



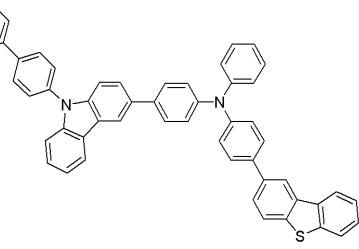
[A-59]



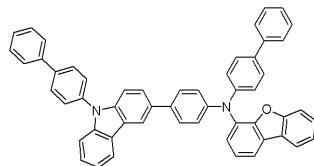
[A-60]



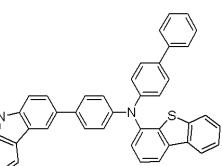
[A-61]



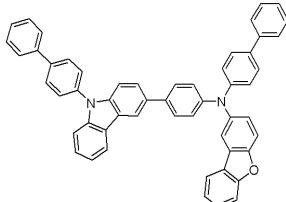
[A-62]



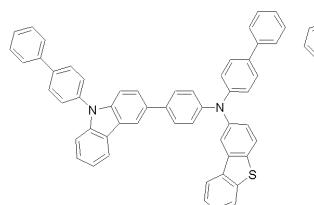
[A-63]



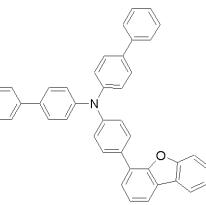
[A-64]



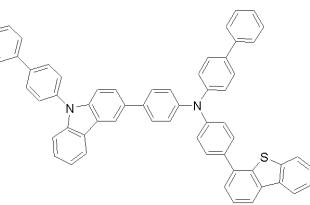
[A-65]



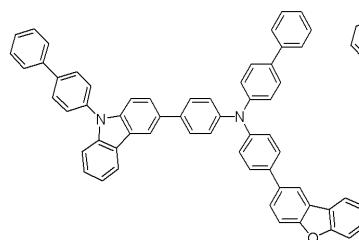
[A-66]



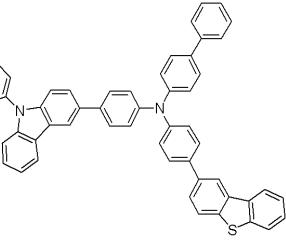
[A-67]



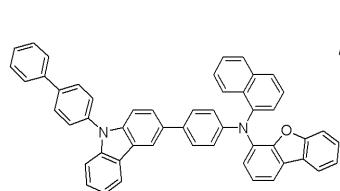
[A-68]



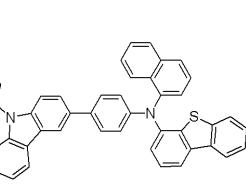
[A-69]



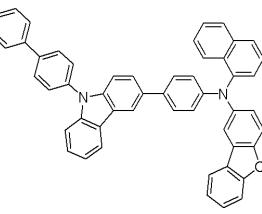
[A-70]



[A-71]

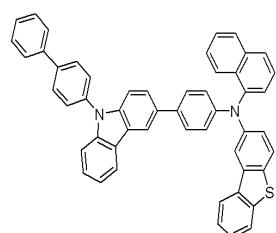


[A-72]

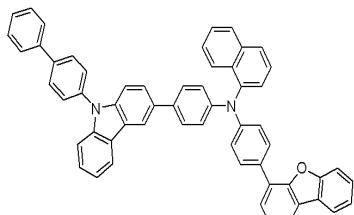


[0064]

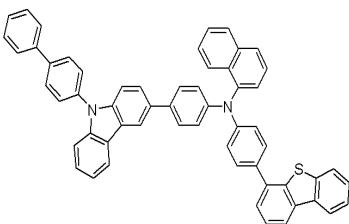
[A-73]



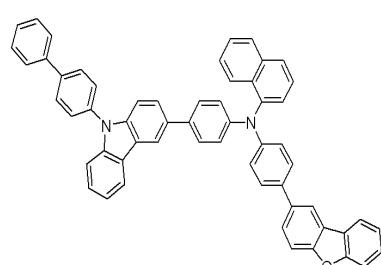
[A-74]



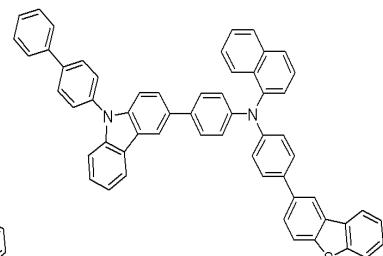
[A-75]



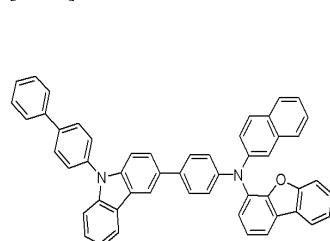
[A-76]



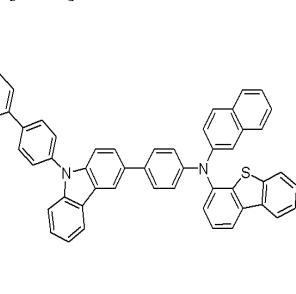
[A-77]



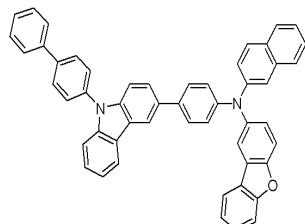
[A-78]



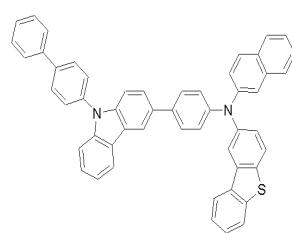
[A-79]



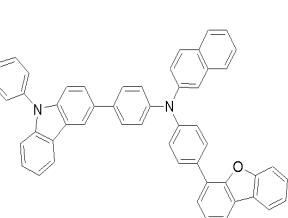
[A-80]



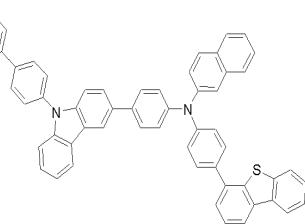
[A-81]



[A-82]

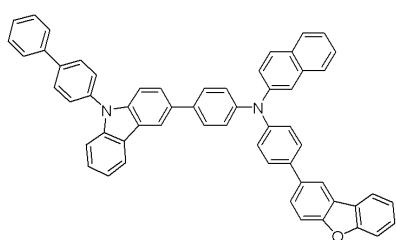


[A-83]

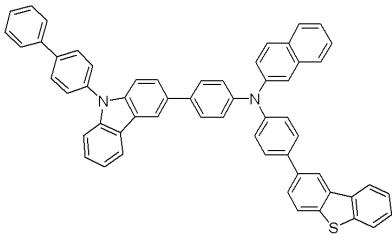


[0065]

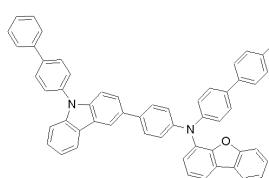
[A-84]



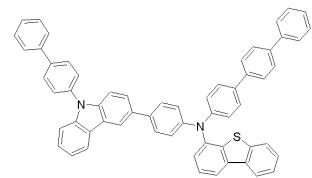
[A-85]



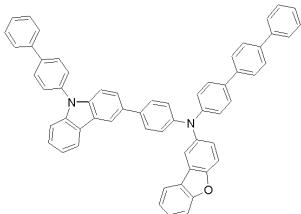
[A-86]



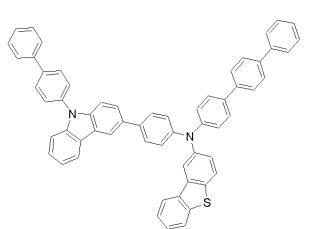
[A-87]



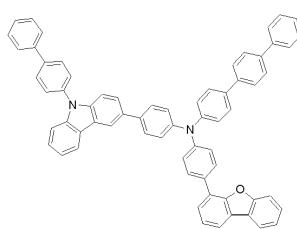
[A-88]



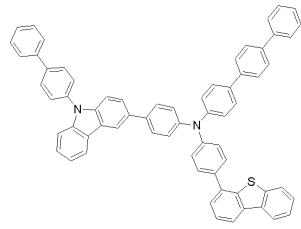
[A-89]



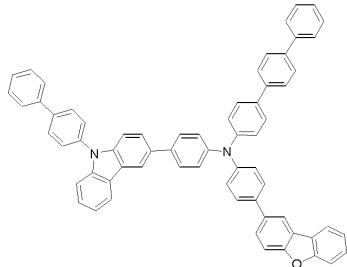
[A-90]



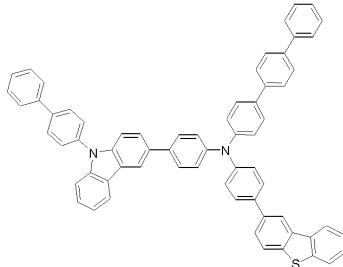
[A-91]



[A-92]

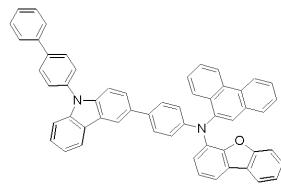


[A-93]

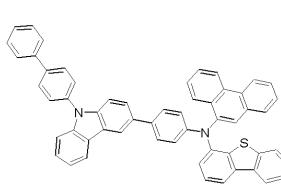


[0066]

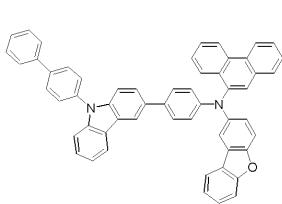
[A-94]



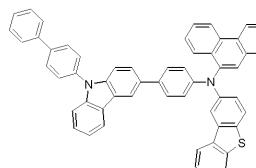
[A-95]



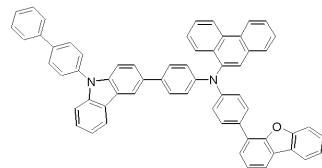
[A-96]



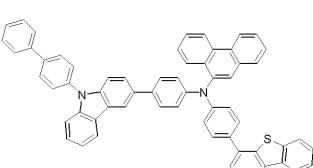
[A-97]



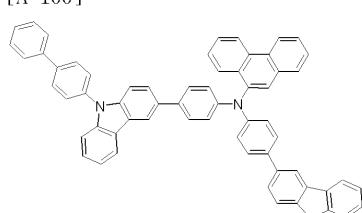
[A-98]



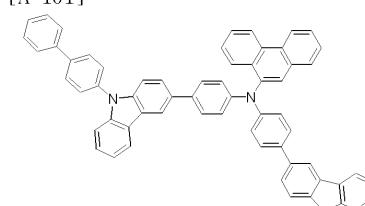
[A-99]



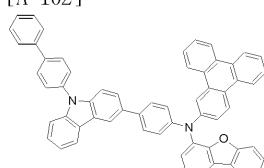
[A-100]



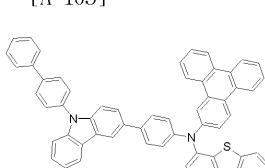
[A-101]



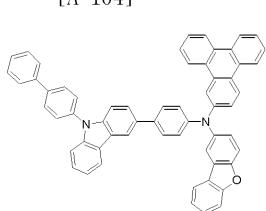
[A-102]



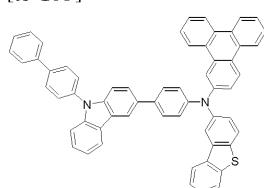
[A-103]



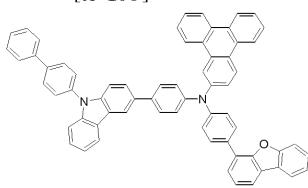
[A-104]



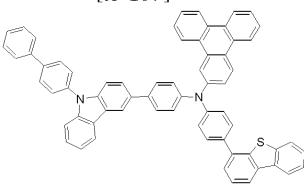
[A-105]



[A-106]

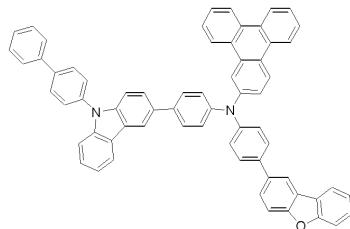


[A-107]

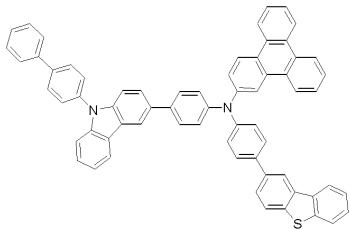


[0067]

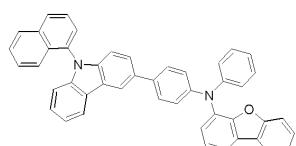
[A-108]



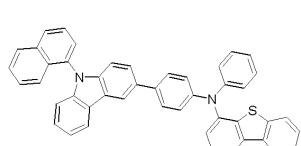
[A-109]



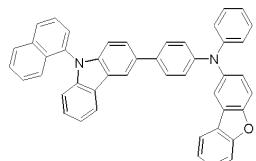
[A-110]



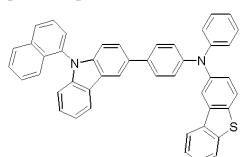
[A-111]



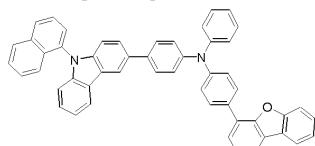
[A-112]



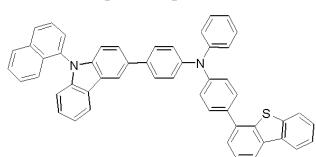
[A-113]



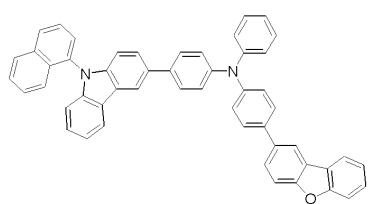
[A-114]



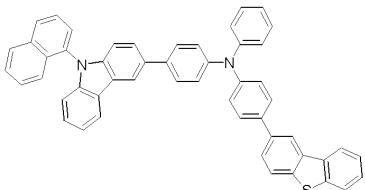
[A-115]



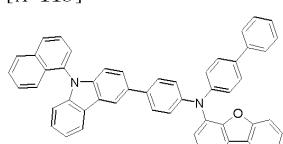
[A-116]



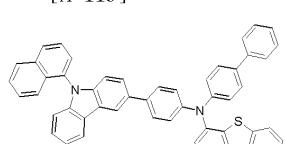
[A-117]



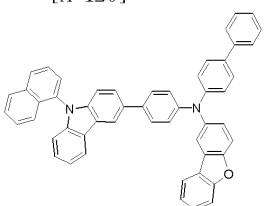
[A-118]



[A-119]

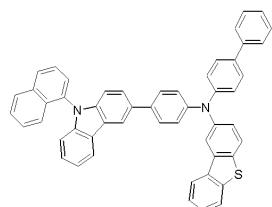


[A-120]

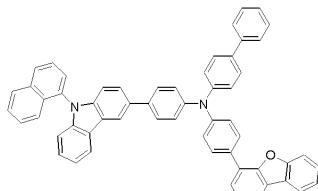


[0068]

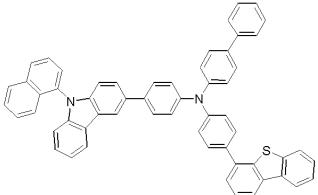
[A-121]



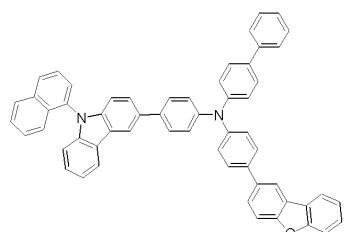
[A-122]



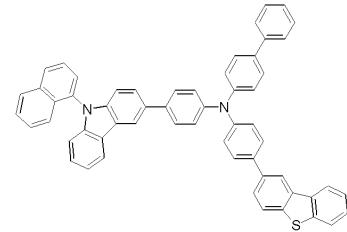
[A-123]



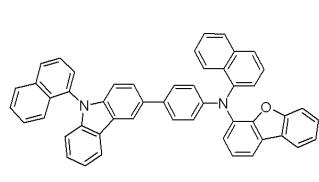
[A-124]



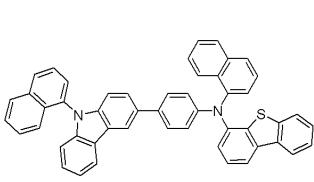
[A-125]



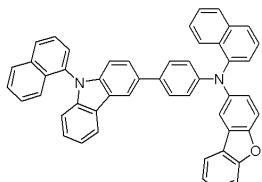
[A-126]



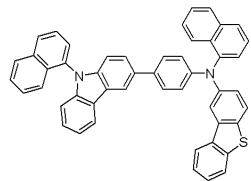
[A-127]



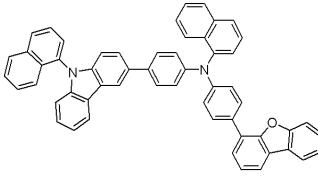
[A-128]



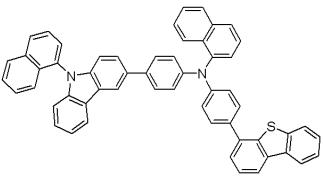
[A-129]



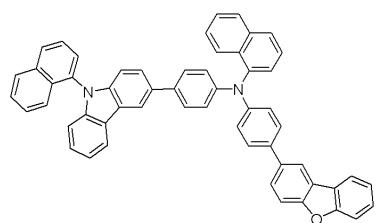
[A-130]



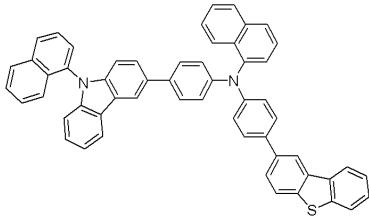
[A-131]



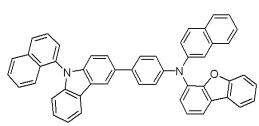
[A-132]



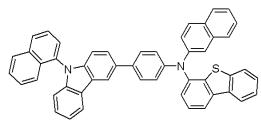
[A-133]



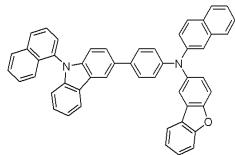
[A-134]



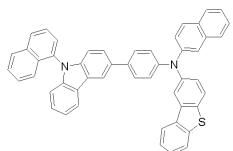
[A-135]



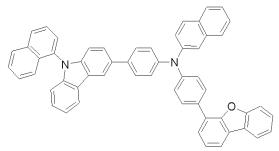
[A-136]



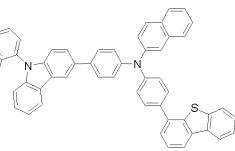
[A-137]



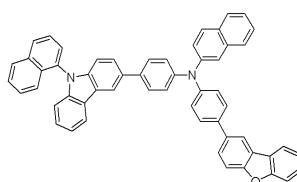
[A-138]



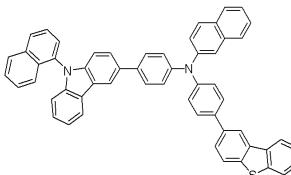
[A-139]



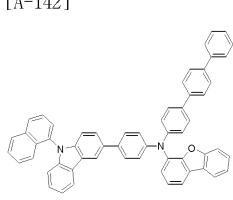
[A-140]



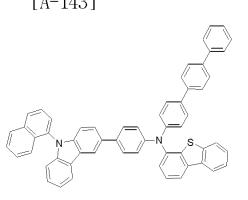
[A-141]



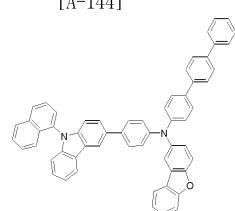
[A-142]



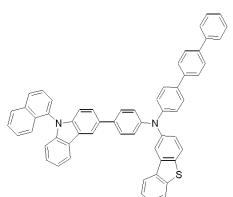
[A-143]



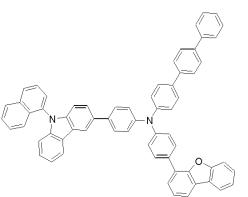
[A-144]



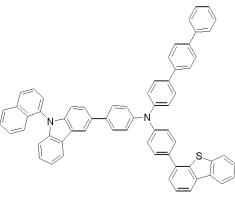
[A-145]



[A-146]

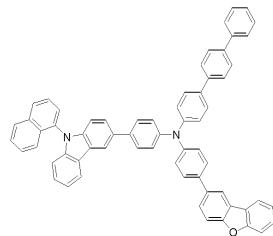


[A-147]

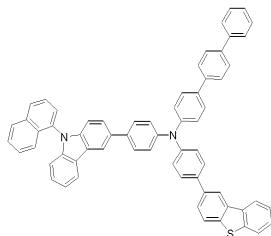


[0070]

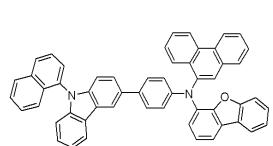
[A-148]



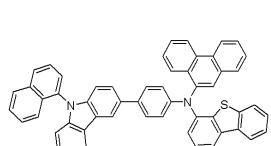
[A-149]



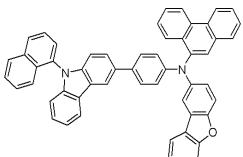
[A-150]



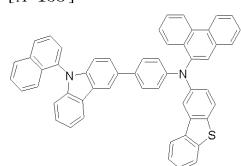
[A-151]



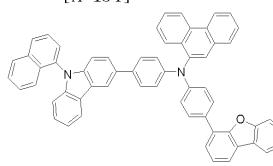
[A-152]



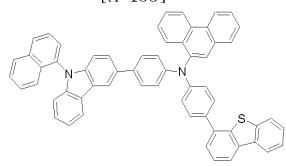
[A-153]



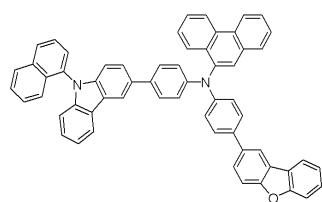
[A-154]



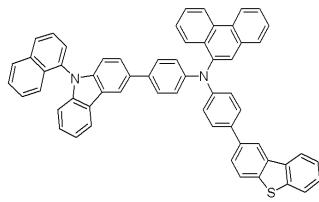
[A-155]



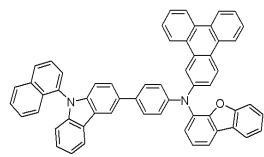
[A-156]



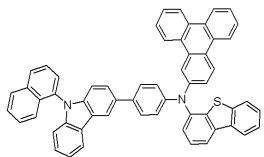
[A-157]



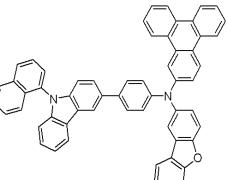
[A-158]



[A-159]

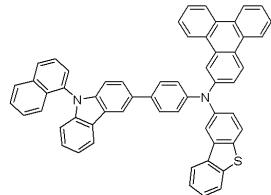


[A-160]

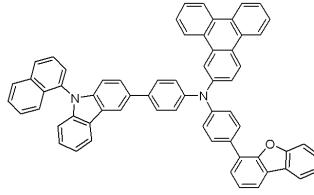


[0071]

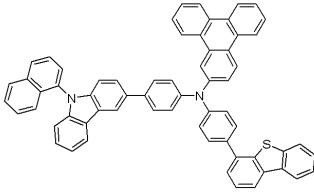
[A-161]



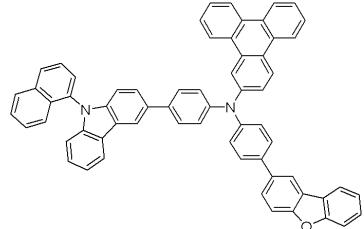
[A-162]



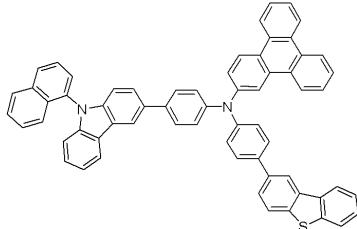
[A-163]



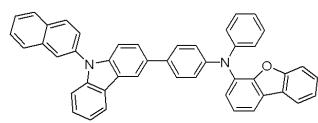
[A-164]



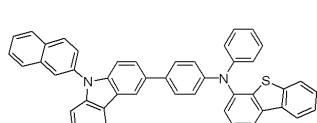
[A-165]



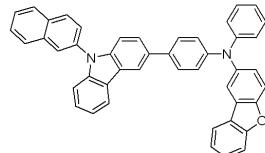
[A-166]



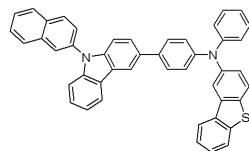
[A-167]



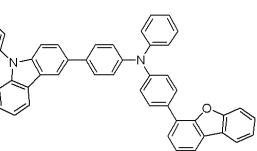
[A-168]



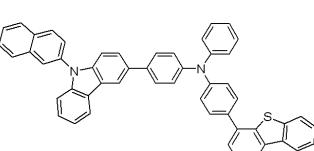
[A-169]



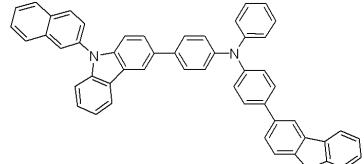
[A-170]



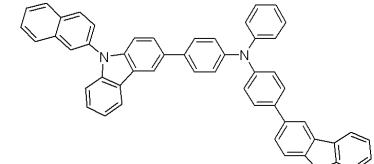
[A-171]



[A-172]

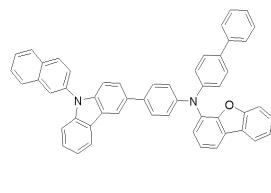


[A-173]

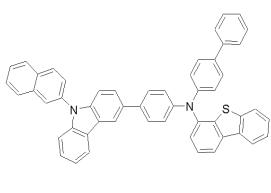


[0072]

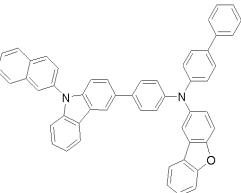
[A-174]



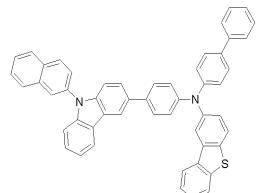
[A-175]



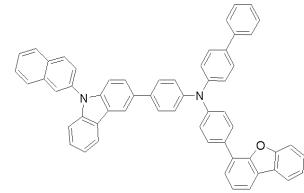
[A-176]



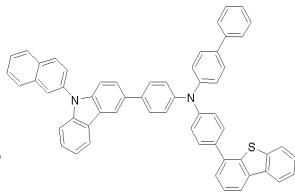
[A-177]



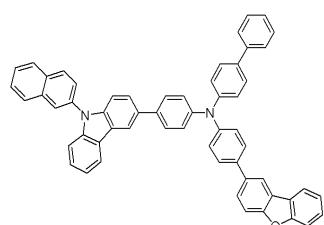
[A-178]



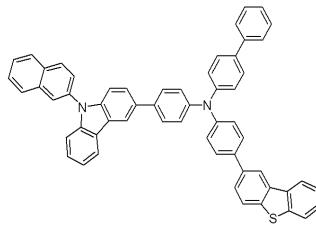
[A-179]



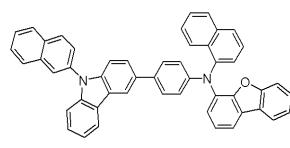
[A-180]



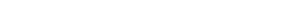
[A-181]



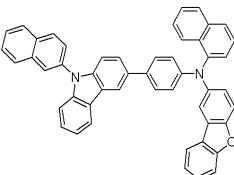
[A-182]



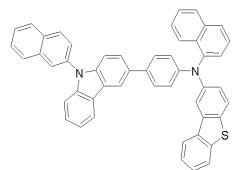
[A-183]



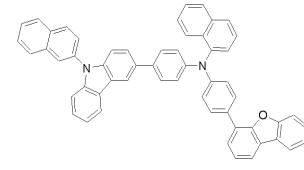
[A-184]



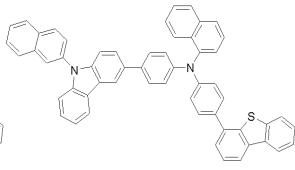
[A-185]



[A-186]

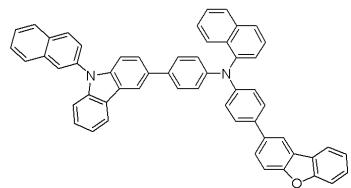


[A-187]

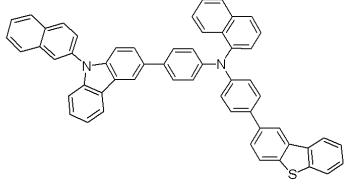


[0073]

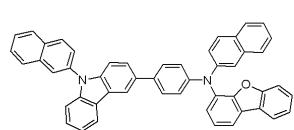
[A-188]



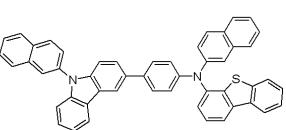
[A-189]



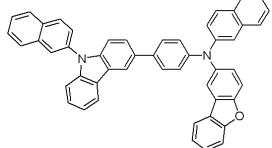
[A-190]



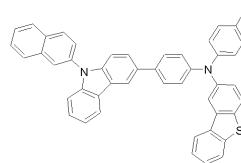
[A-191]



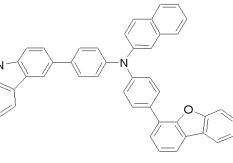
[A-192]



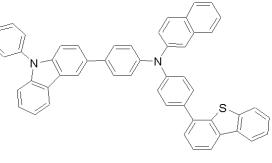
[A-193]



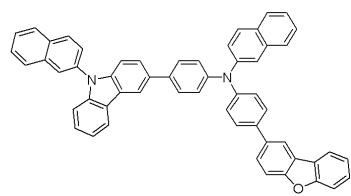
[A-194]



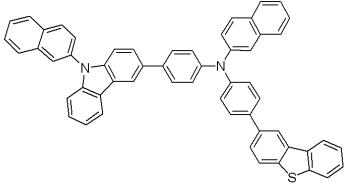
[A-195]



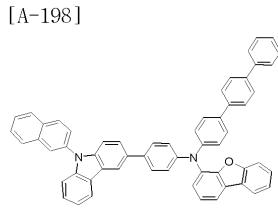
[A-196]



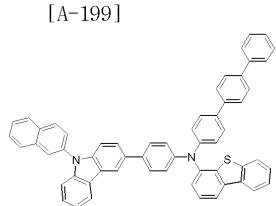
[A-197]



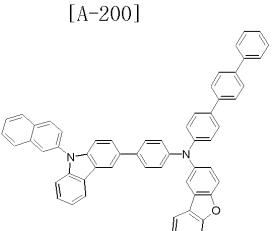
[A-198]



[A-199]

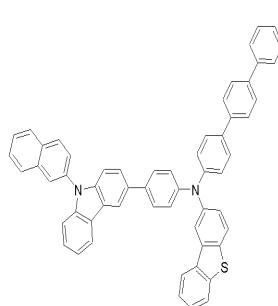


[A-200]

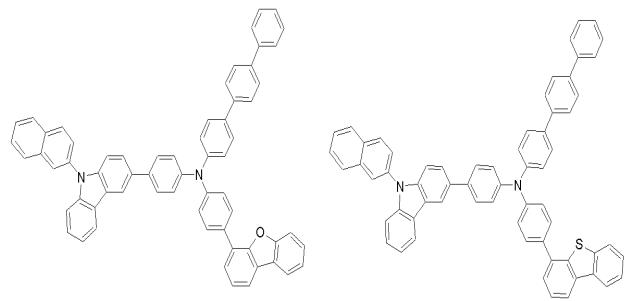


[0074]

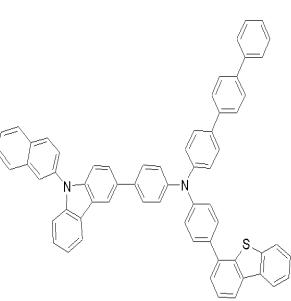
[A-201]



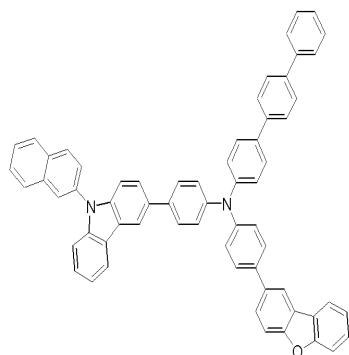
[A-202]



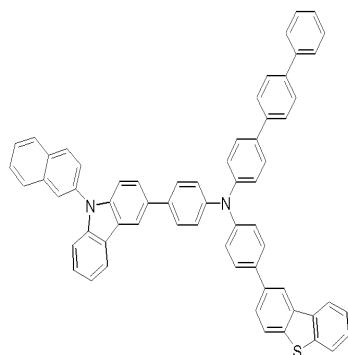
[A-203]



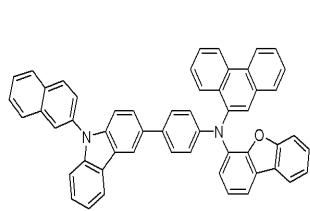
[A-204]



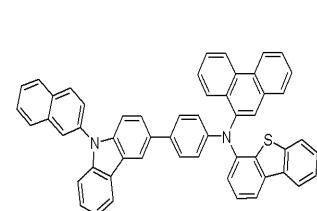
[A-205]



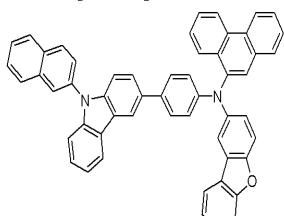
[A-206]



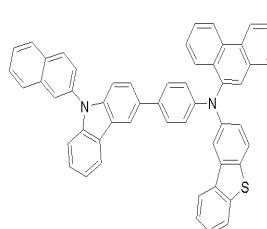
[A-207]



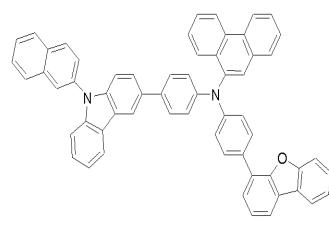
[A-208]



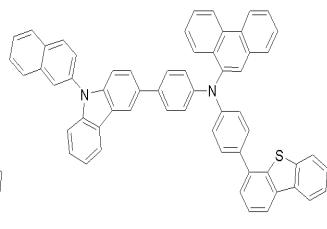
[A-209]



[A-210]

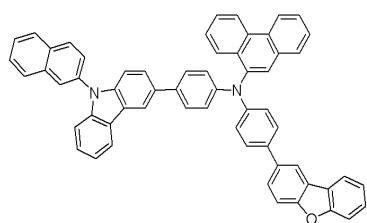


[A-211]

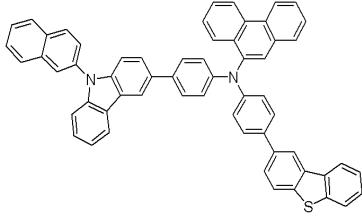


[0075]

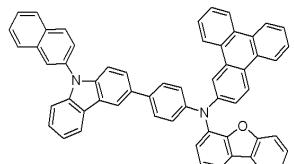
[A-212]



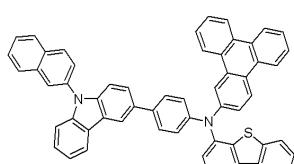
[A-213]



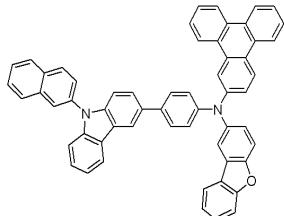
[A-214]



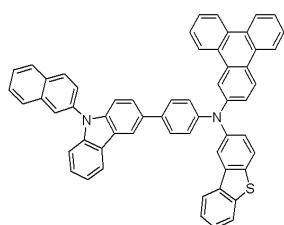
[A-215]



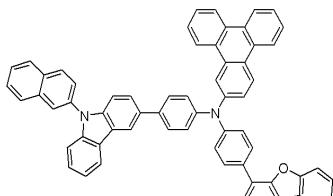
[A-216]



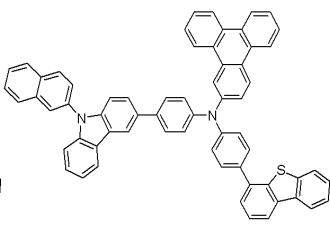
[A-217]



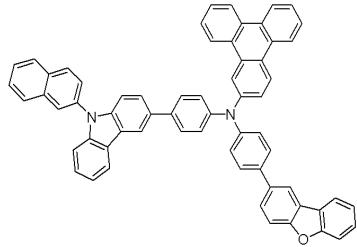
[A-218]



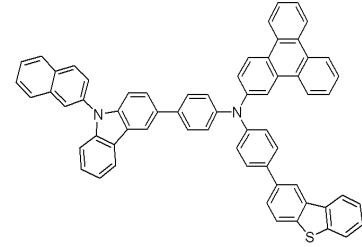
[A-219]



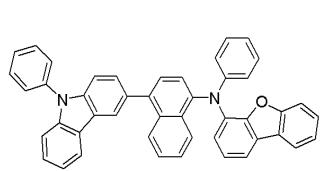
[A-220]



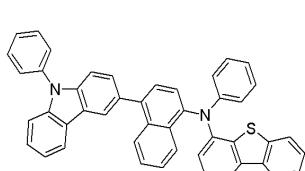
[A-221]



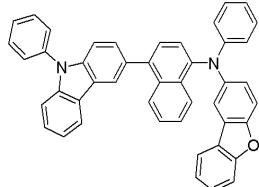
[A-222]



[A-223]

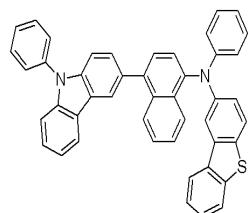


[A-224]

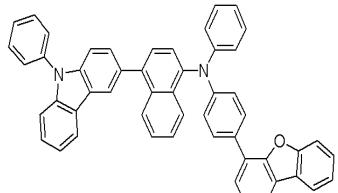


[0076]

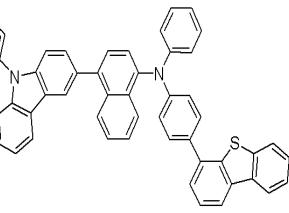
[A-225]



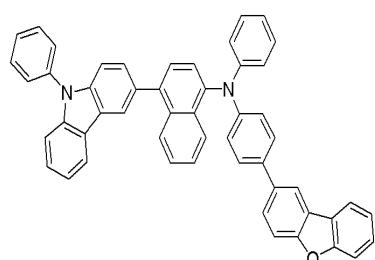
[A-226]



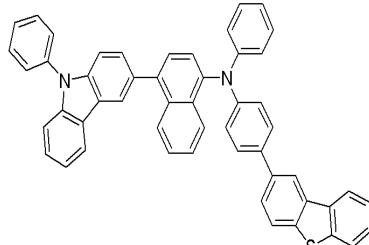
[A-227]



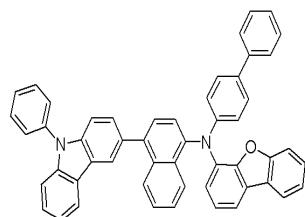
[A-228]



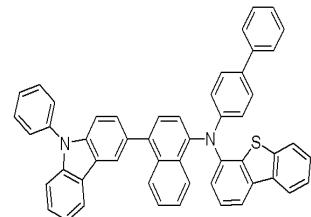
[A-229]



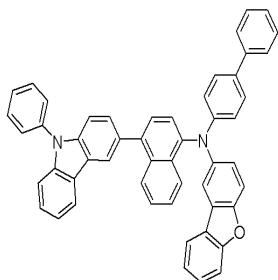
[A-230]



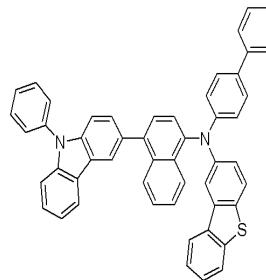
[A-231]



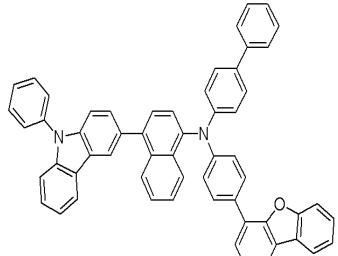
[A-232]



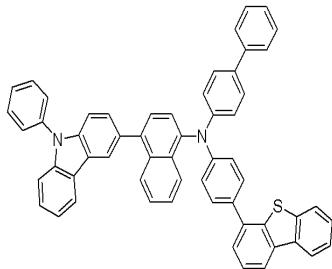
[A-233]



[A-234]

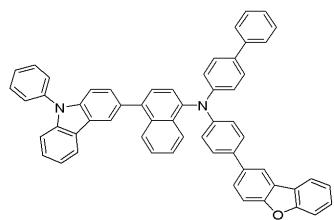


[A-235]

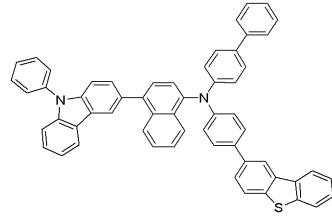


[0077]

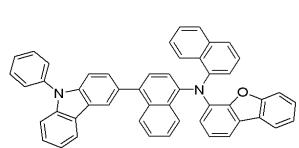
[A-236]



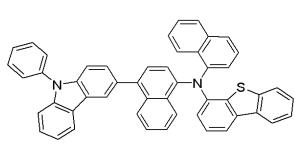
[A-237]



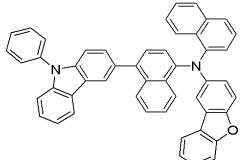
[A-238]



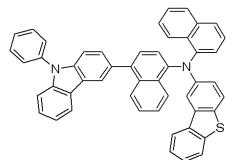
[A-239]



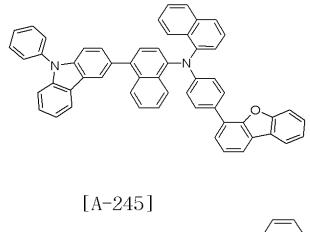
[A-240]



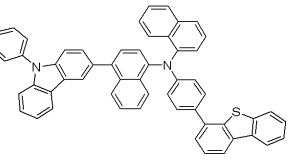
[A-241]



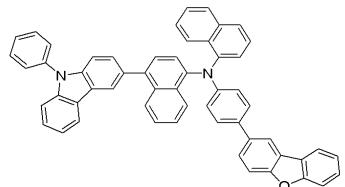
[A-242]



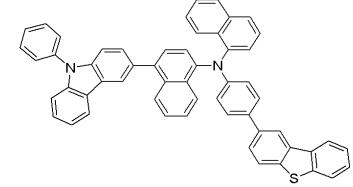
[A-243]



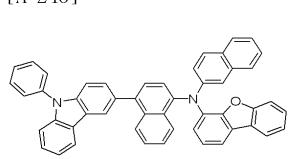
[A-244]



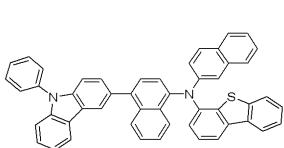
[A-245]



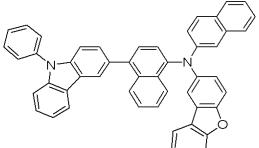
[A-246]



[A-247]

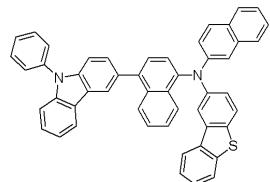


[A-248]

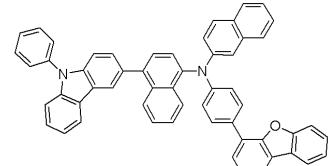


[0078]

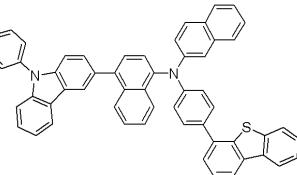
[A-249]



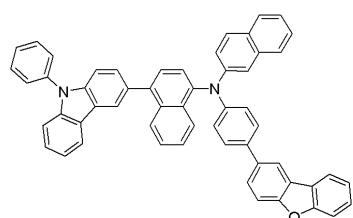
[A-250]



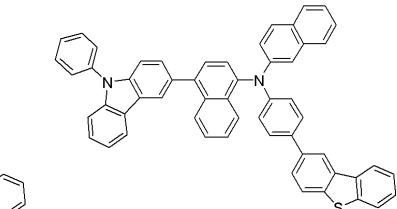
[A-251]



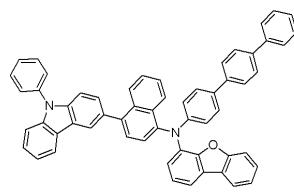
[A-252]



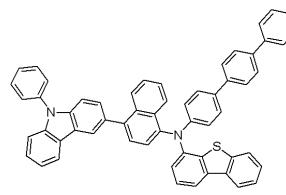
[A-253]



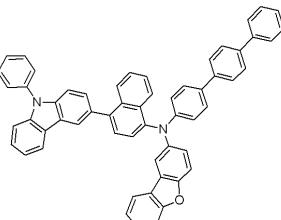
[A-254]



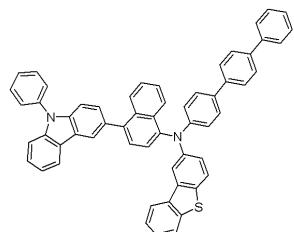
[A-255]



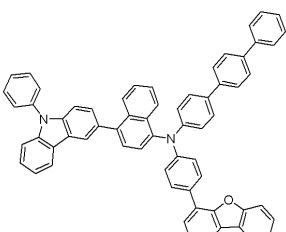
[A-256]



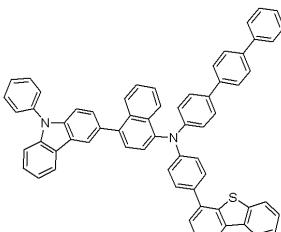
[A-257]



[A-258]

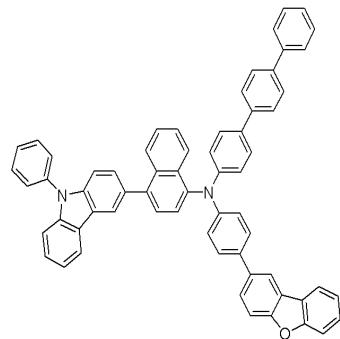


[A-259]

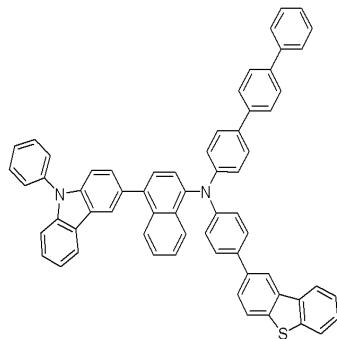


[0079]

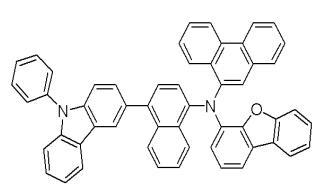
[A-260]



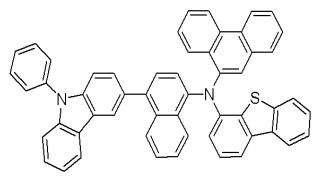
[A-261]



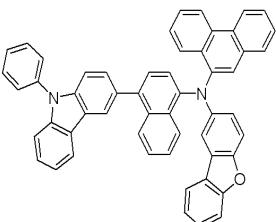
[A-262]



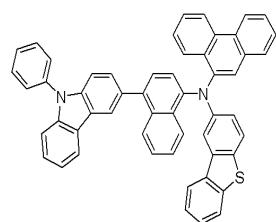
[A-263]



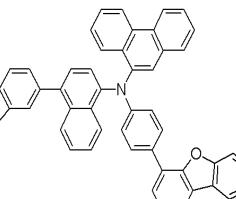
[A-264]



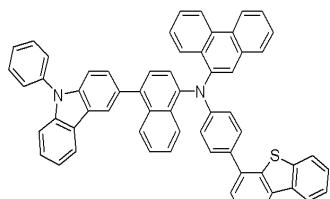
[A-265]



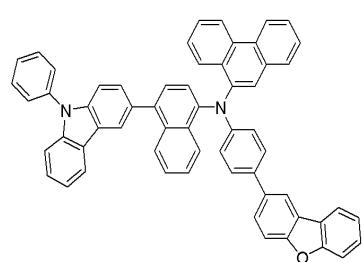
[A-266]



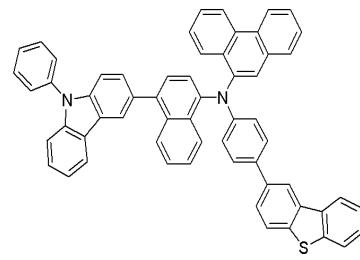
[A-267]



[A-268]

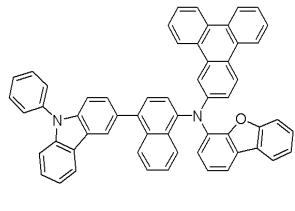


[A-269]

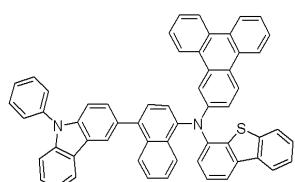


[0080]

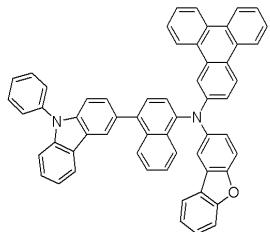
[A-270]



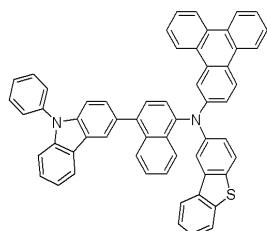
[A-271]



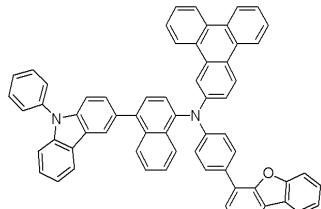
[A-272]



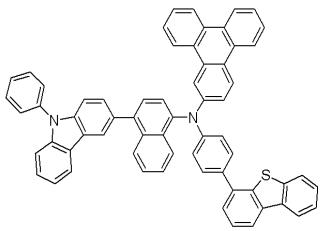
[A-273]



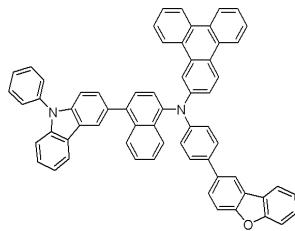
[A-274]



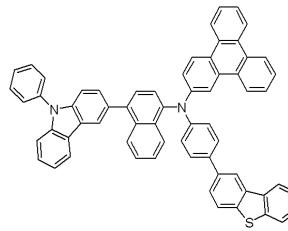
[A-275]



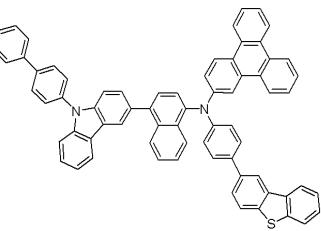
[A-276]



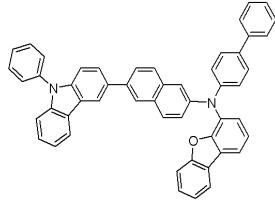
[A-277]



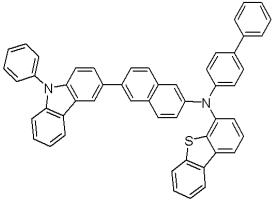
[A-278]



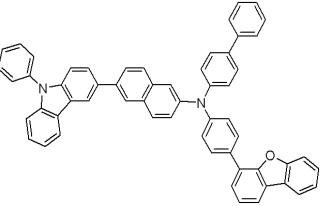
[A-279]



[A-280]

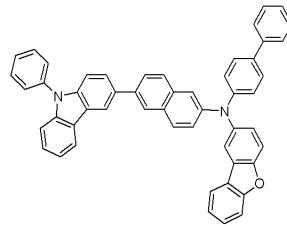


[A-281]

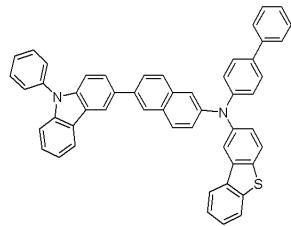


[0081]

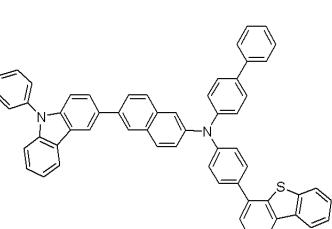
[A-282]



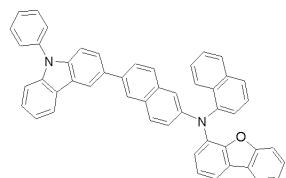
[A-283]



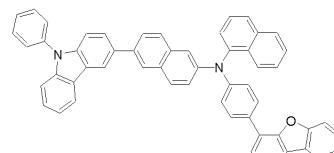
[A-284]



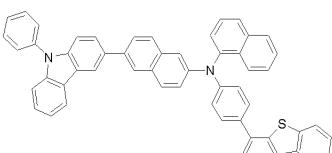
[A-285]



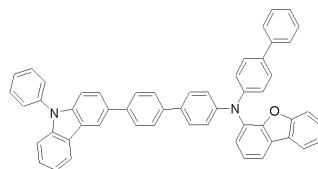
[A-286]



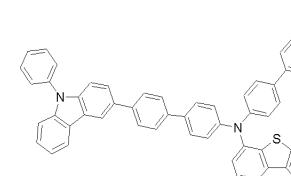
[A-287]



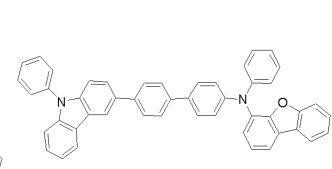
[A-288]



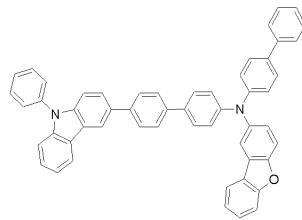
[A-289]



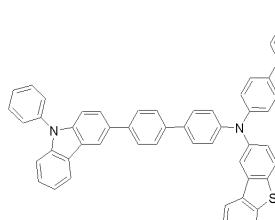
[A-290]



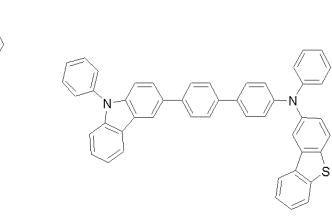
[A-291]



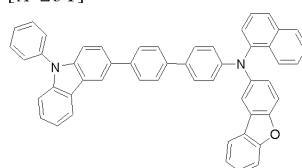
[A-292]



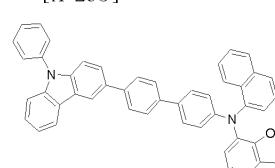
[A-293]



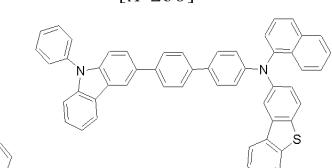
[A-294]



[A-295]

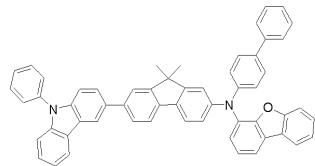


[A-296]

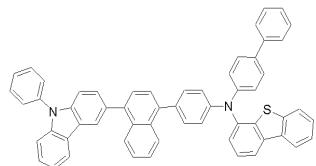


[0082]

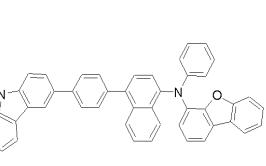
[A-297]



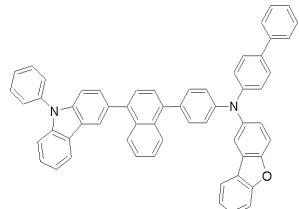
[A-298]



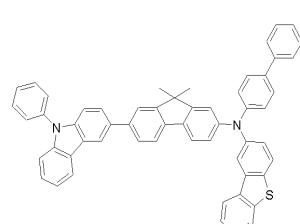
[A-299]



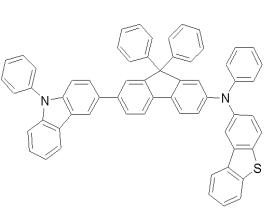
[A-300]



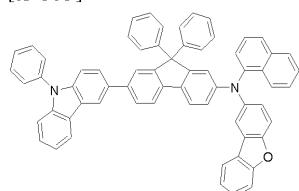
[A-301]



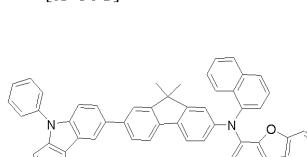
[A-302]



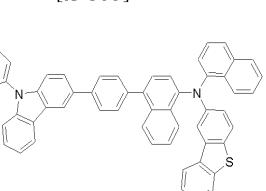
[A-303]



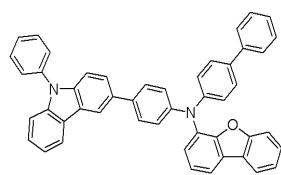
[A-304]



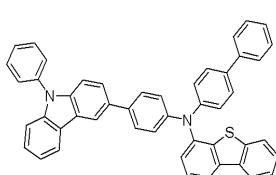
[A-305]



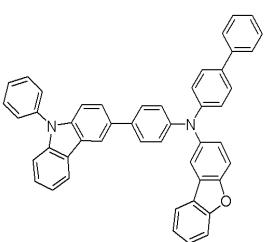
[A-414]



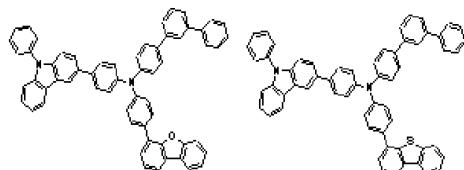
[A-415]



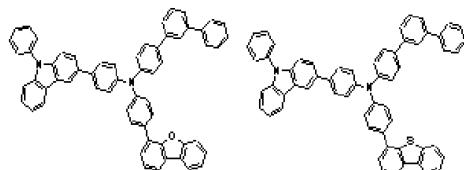
[A-416]



[A-457]

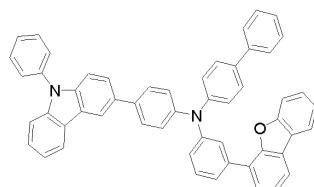


[A-458]

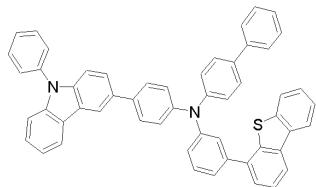


[0083]

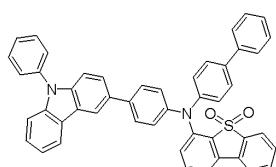
[A-469]



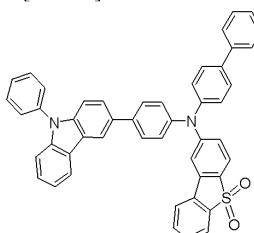
[A-470]



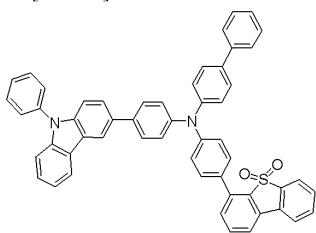
[A-471]



[A-472]



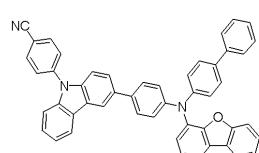
[A-473]



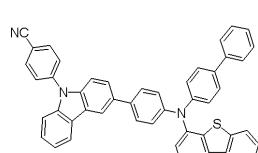
[0084]

[0085] 상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 A-417 내지 A-456 또는 A-459 내지 A-468 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

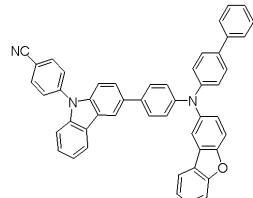
[A-417]



[A-418]



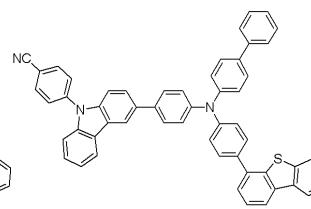
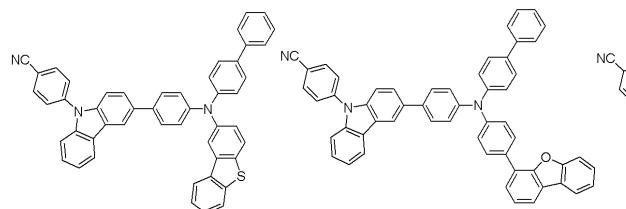
[A-419]



[A-420]

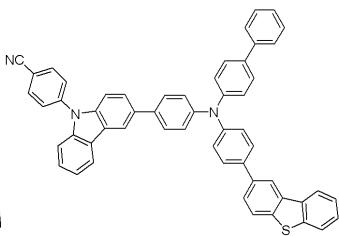
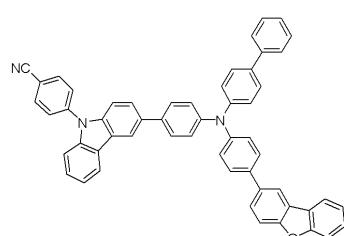
[A-421]

[A-422]



[A-423]

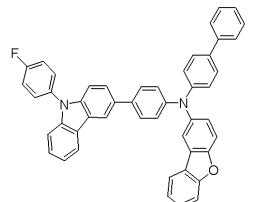
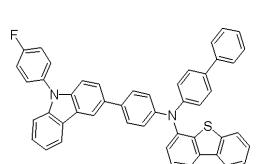
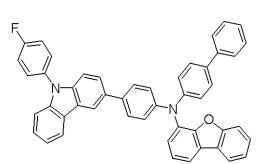
[A-424]



[A-425]

[A-426]

[A-427]

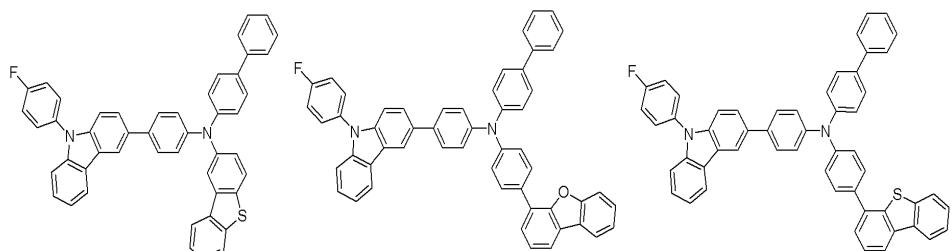


[0086]

[A-428]

[A-429]

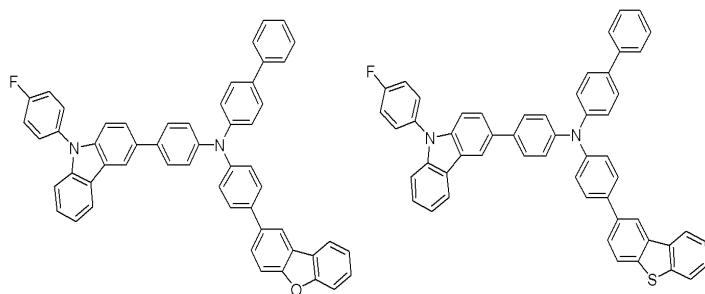
[A-430]



[A-431]

[A-432]

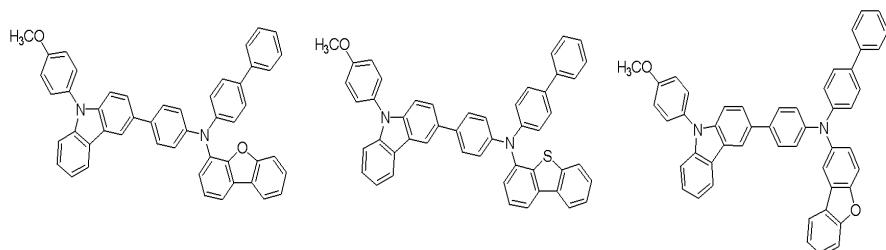
[A-430]



[A-433]

[A-434]

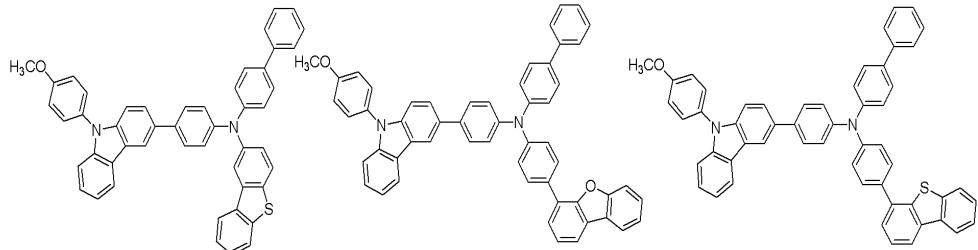
[A-435]



[A-436]

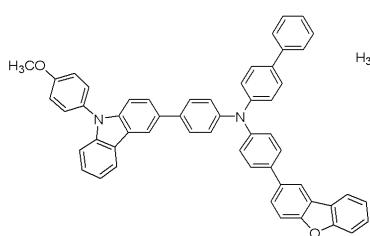
[A-437]

[A-438]

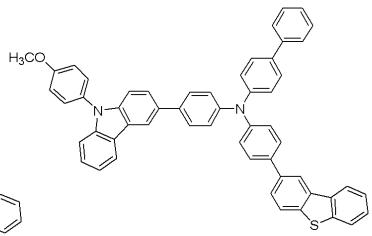


[0087]

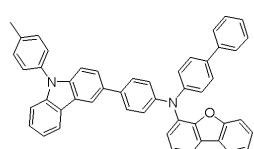
[A-439]



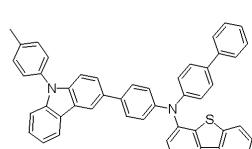
[A-440]



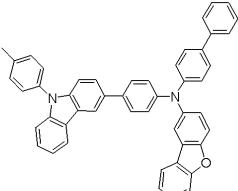
[A-441]



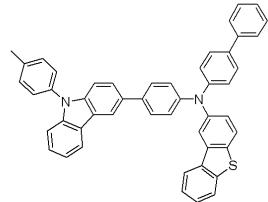
[A-442]



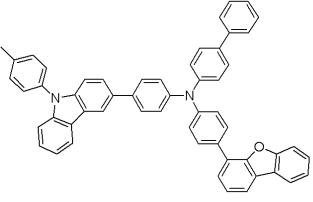
[A-443]



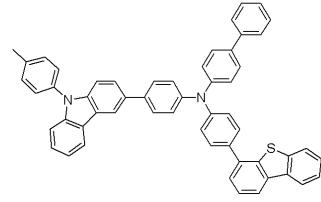
[A-444]



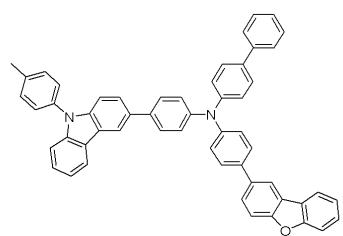
[A-445]



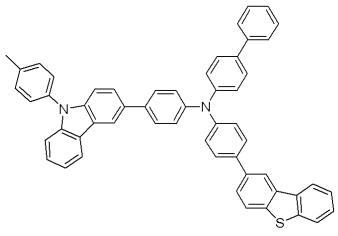
[A-446]



[A-447]

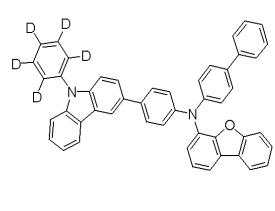


[A-448]

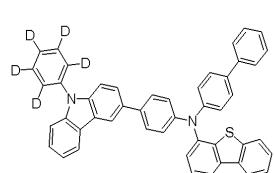


[0088]

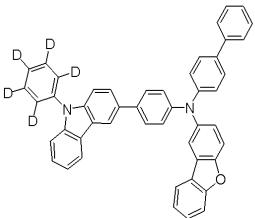
[A-449]



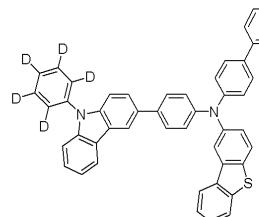
[A-450]



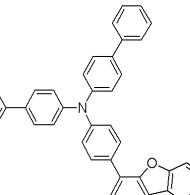
[A-451]



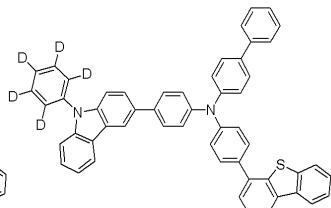
[A-452]



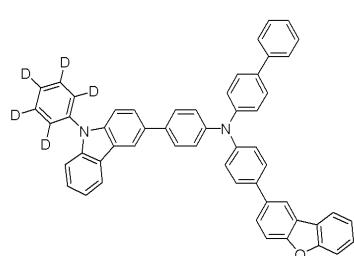
[A-453]



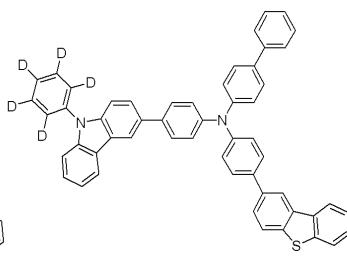
[A-454]



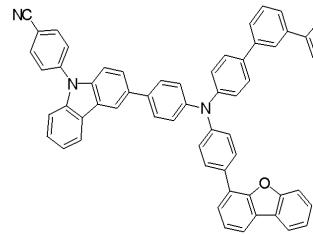
[A-455]



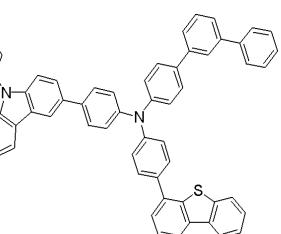
[A-456]



[A-459]

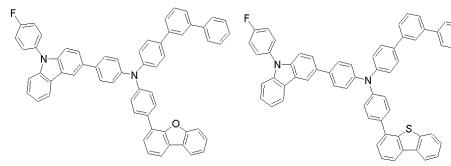


[A-460]

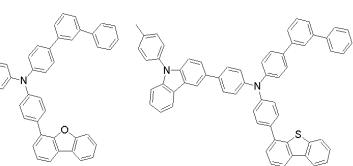


[0089]

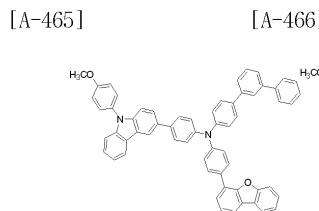
[A-461]



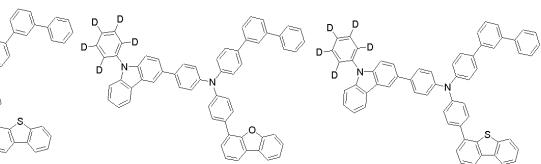
[A-463]



[A-464]



[A-467]

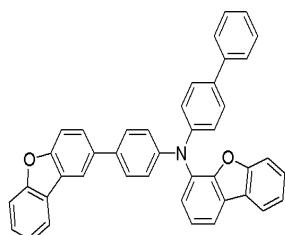


[A-468]

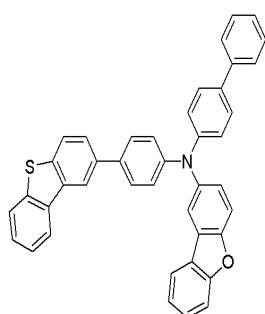
[0090]

[0091] 상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 A-324 내지 A-395 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

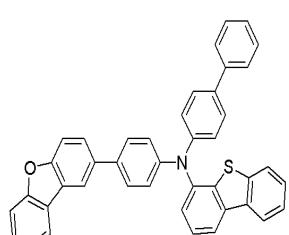
[A-324]



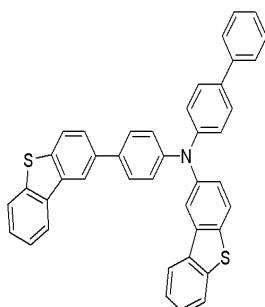
[A-327]



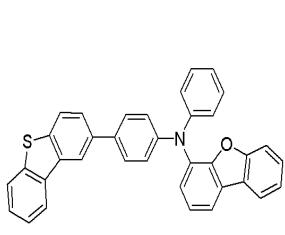
[A-325]



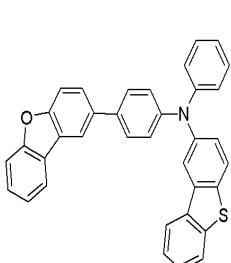
[A-328]



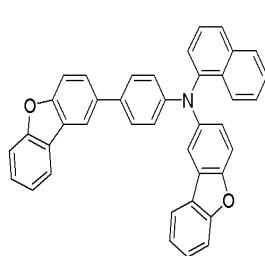
[A-326]



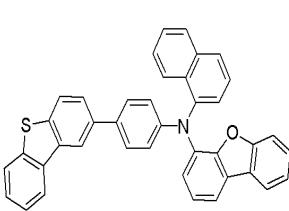
[A-329]



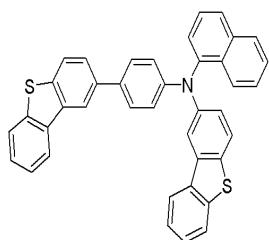
[A-330]



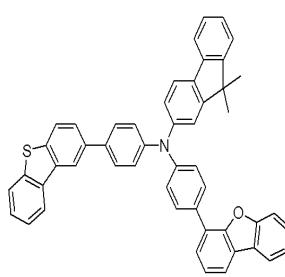
[A-331]



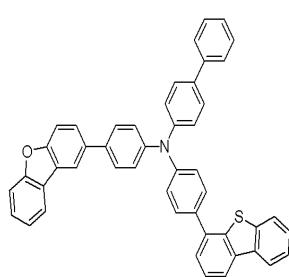
[A-332]



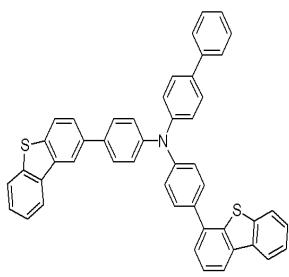
[A-333]



[A-334]

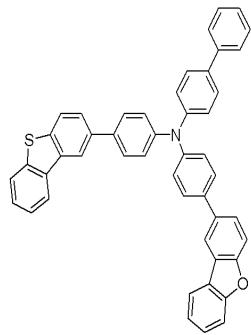


[A-335]

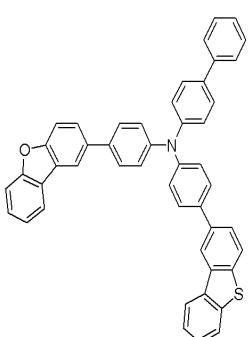


[0092]

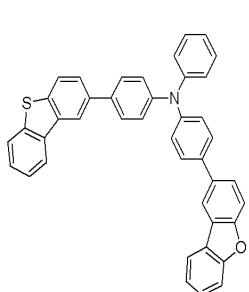
[A-336]



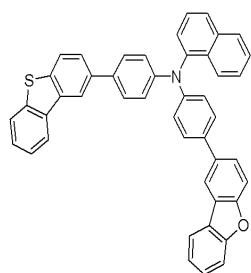
[A-337]



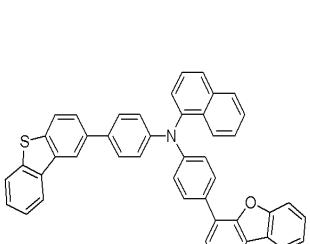
[A-338]



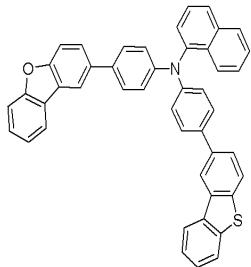
[A-339]



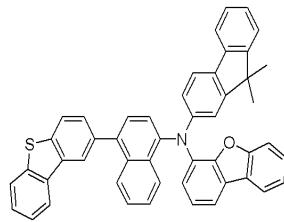
[A-340]



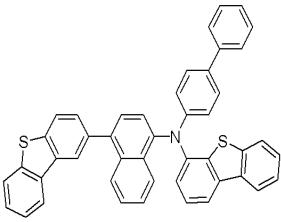
[A-341]



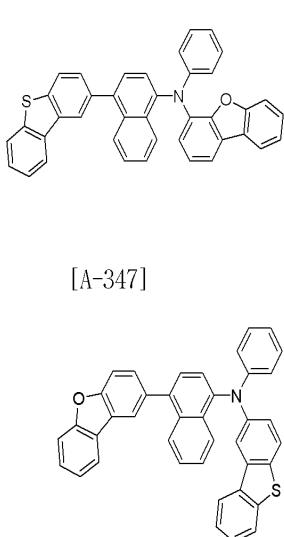
[A-342]



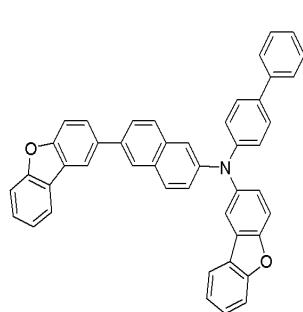
[A-343]



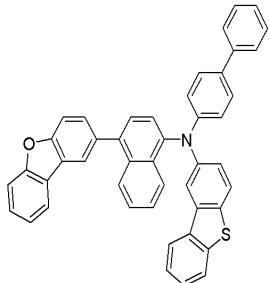
[A-344]



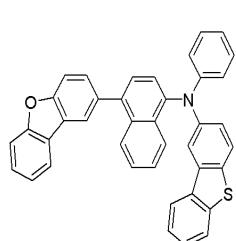
[A-345]



[A-346]

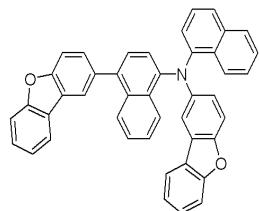


[A-347]

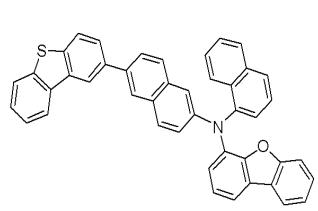


[0093]

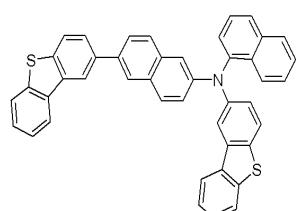
[A-348]



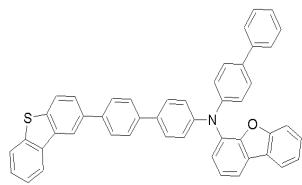
[A-349]



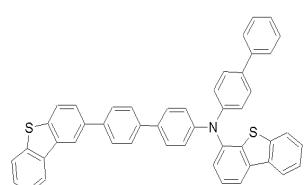
[A-350]



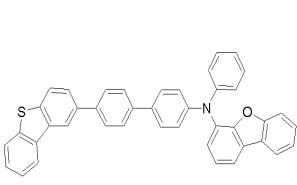
[A-351]



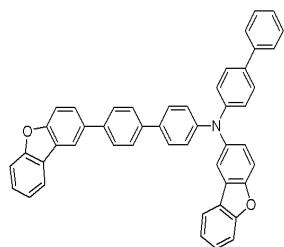
[A-352]



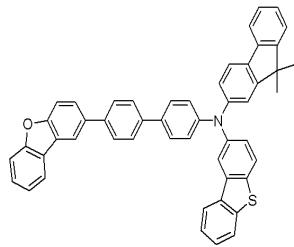
[A-353]



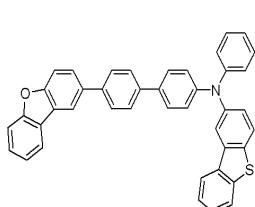
[A-354]



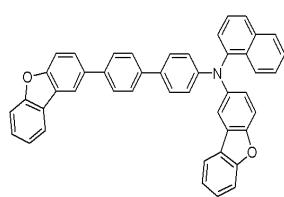
[A-355]



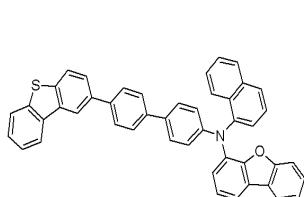
[A-356]



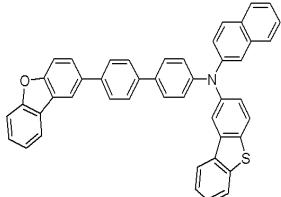
[A-357]



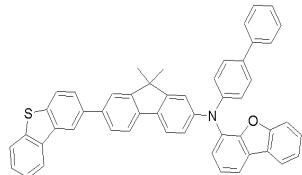
[A-358]



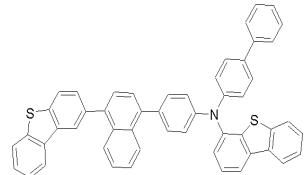
[A-359]



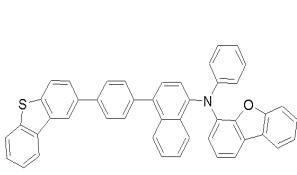
[A-360]



[A-361]

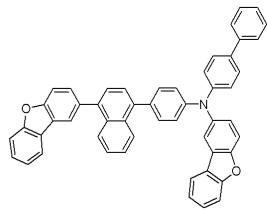


[A-362]

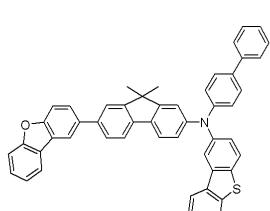


[0094]

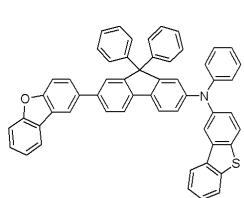
[A-363]



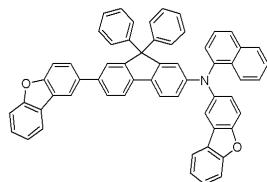
[A-364]



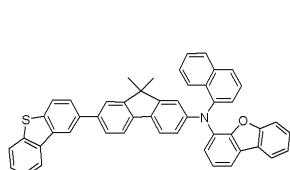
[A-365]



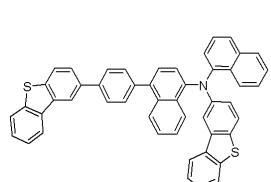
[A-366]



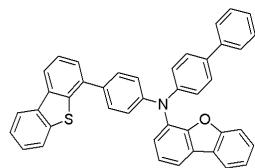
[A-367]



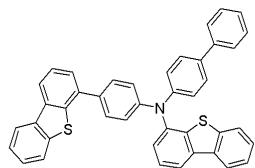
[A-368]



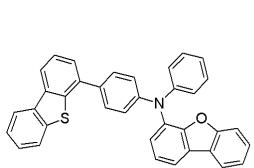
[A-369]



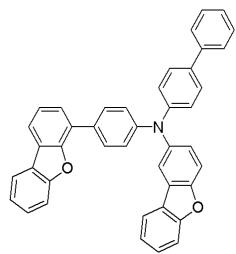
[A-370]



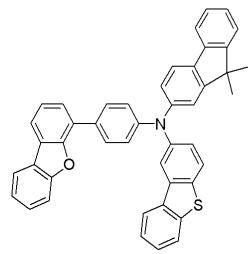
[A-371]



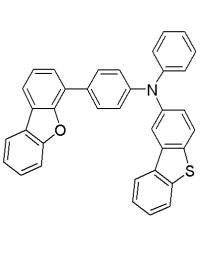
[A-372]



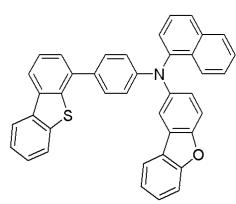
[A-373]



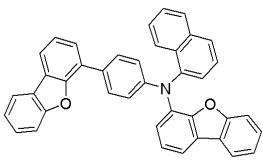
[A-374]



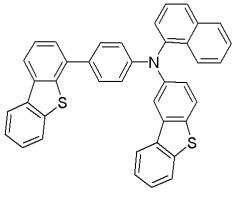
[A-375]



[A-376]

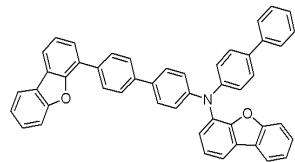


[A-377]

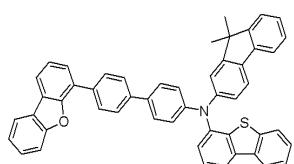


[0095]

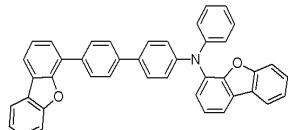
[A-378]



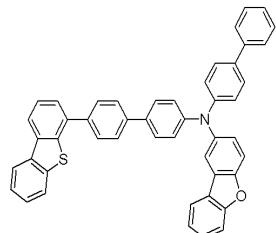
[A-379]



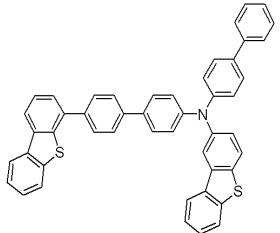
[A-380]



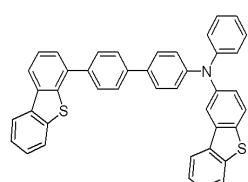
[A-381]



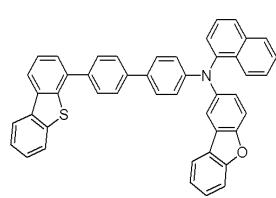
[A-382]



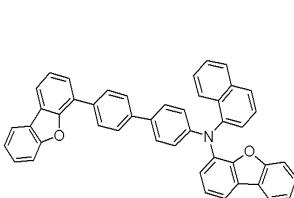
[A-383]



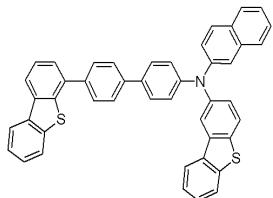
[A-384]



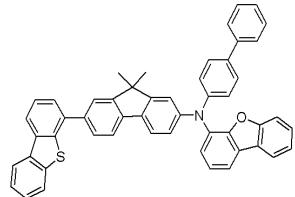
[A-385]



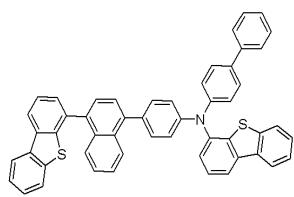
[A-386]



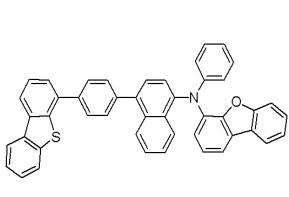
[A-387]



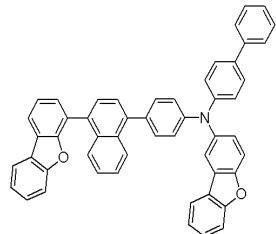
[A-388]



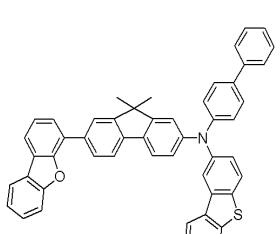
[A-389]



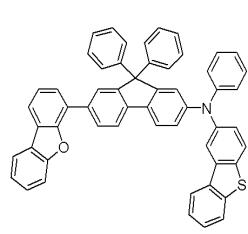
[A-390]



[A-391]

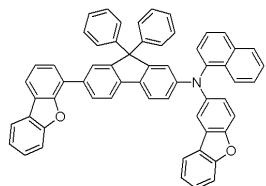


[A-392]

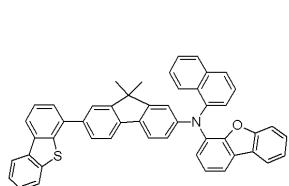


[0096]

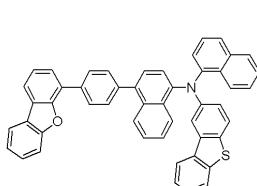
[A-393]



[A-394]



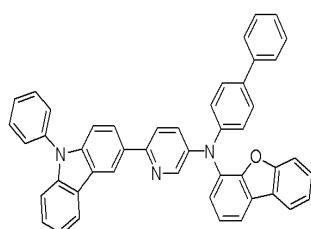
[A-395]



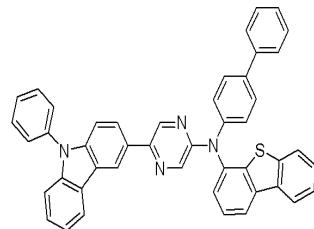
[0097]

[0098] 상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 A-306 내지 A-323 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

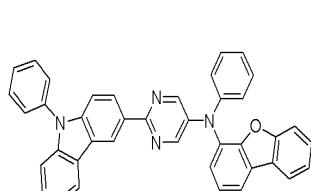
[A-306]



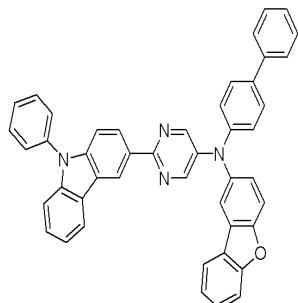
[A-307]



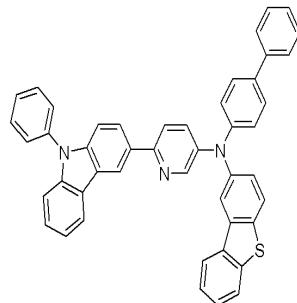
[A-308]



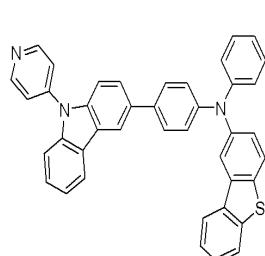
[A-309]



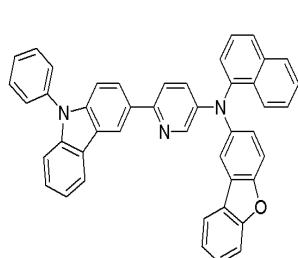
[A-310]



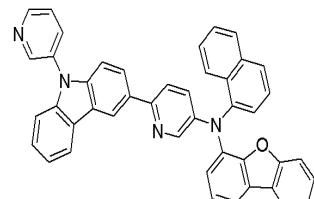
[A-311]



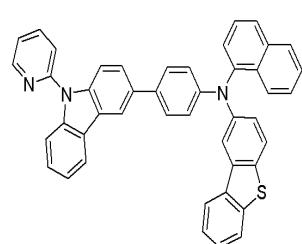
[A-312]



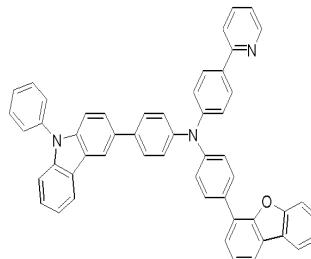
[A-313]



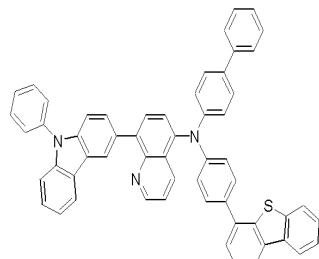
[A-314]



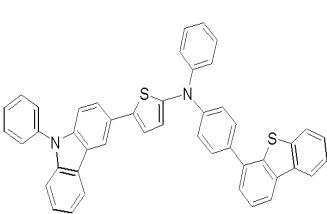
[A-315]



[A-316]

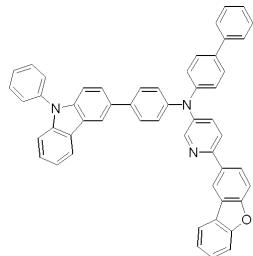


[A-317]

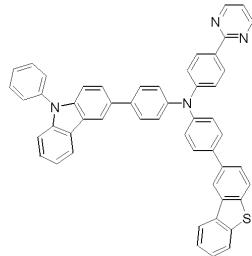


[0099]

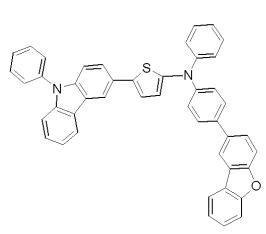
[A-318]



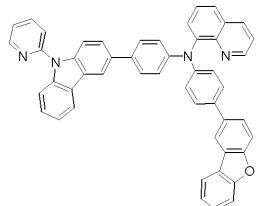
[A-319]



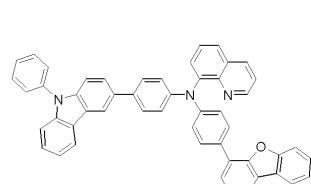
[A-320]



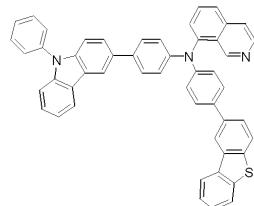
[A-321]



[A-322]



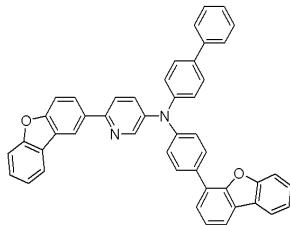
[A-323]



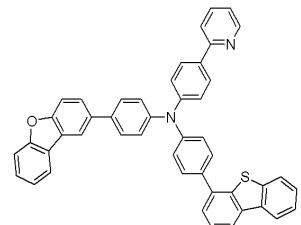
[0100]

[0101] 상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 A-396 내지 A-413 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

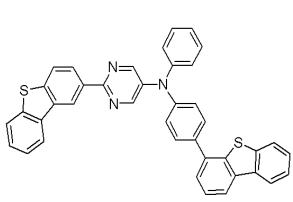
[A-396]



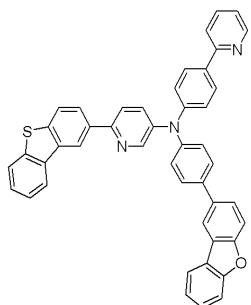
[A-397]



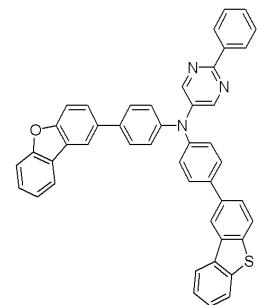
[A-398]



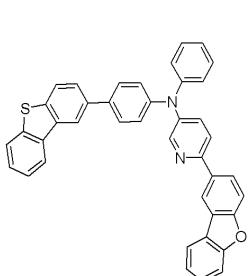
[A-399]



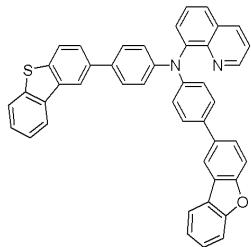
[A-400]



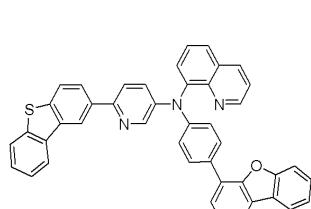
[A-401]



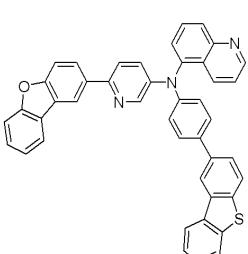
[A-402]



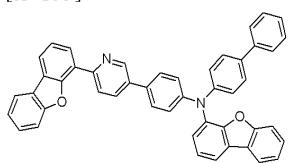
[A-403]



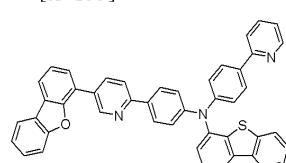
[A-404]



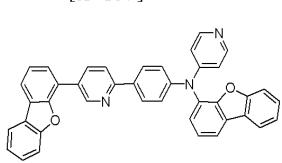
[A-405]



[A-406]

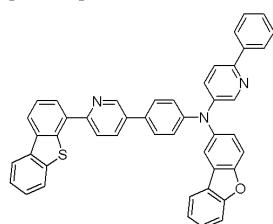


[A-407]

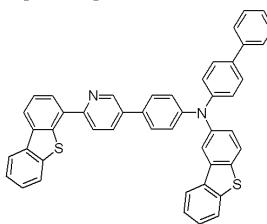


[0102]

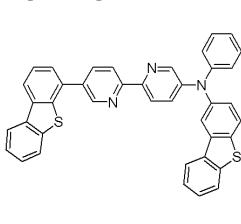
[A-408]



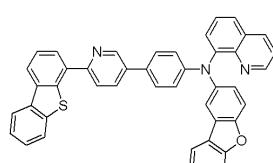
[A-409]



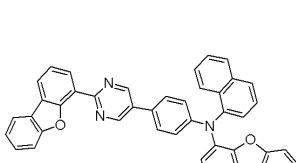
[A-410]



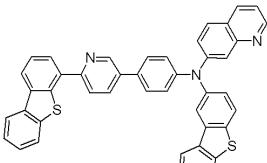
[A-411]



[A-412]



[A-413]



[0103]

[0104]

상기 유기광전소자용 화합물은 유기발광소자의 정공수송재료 또는 정공주입재료로 이용될 수 있는 것일 수

있다.

- [0105] 상기 유기광전소자용 화합물은 3중향 여기에너지(T1) 2.0eV 이상인 것일 수 있다.
- [0106] 상기 유기광전소자는 유기발광소자, 유기태양전지, 유기트랜지스터, 유기 감광체 드럼 및 유기메모리소자로 이루어진 군에서 선택되는 것일 수 있다.
- [0107] 본 발명의 또 다른 측면에서는, 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 적어도 한 층 이상의 유기박막층을 포함하는 유기발광소자에 있어서, 상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 전술한 유기광전소자용 화합물을 포함하는 것인 유기발광소자를 제공한다.
- [0108] 상기 유기박막층은 발광층, 정공수송층, 정공주입층, 전자수송층, 전자주입층, 정공차단층 및 이들의 조합을 이루어진 군에서 선택되는 것일 수 있다.
- [0109] 상기 유기광전소자용 화합물은 정공수송층, 정공주입층, 전자수송층 또는 전자주입층 내에 포함되는 것일 수 있다.
- [0110] 상기 유기광전소자용 화합물은 발광층 내에 포함되는 것일 수 있다.
- [0111] 상기 유기광전소자용 화합물은 발광층 내에 인광 또는 형광 호스트 재료로서 사용되는 것일 수 있다.
- [0112] 상기 유기광전소자용 화합물은 발광층 내에 형광 청색 도편트 재료로서 사용되는 것일 수 있다.
- [0113] 본 발명의 다른 측면에서는 전술한 유기발광소자를 포함하는 것인 표시장치를 제공한다.

발명의 효과

- [0114] 높은 정공 또는 전자 수송성, 막 안정성 열적 안정성 및 높은 3중향 여기에너지를 가지는 화합물을 제공할 수 있다.
- [0115] 이러한 화합물은 발광층의 정공 주입/수송 재료, 호스트 재료, 또는 전자 주입/수송 재료로 이용될 수 있다. 이를 이용한 유기광전소자는 우수한 전기화학적 및 열적 안정성을 가지게 되어 수명 특성이 우수하고, 낮은 구동전압에서도 높은 발광효율을 가질 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [0116] 도 1 내지 도 5는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물을 이용하여 제조될 수 있는 유기광전소자에 대한 다양한 구현예들을 나타내는 단면도이다.

도 6은 실시예 1의 A-414 화합물의 $^1\text{H-NMR}$ 결과 데이터이다.

도 7은 실시예 2의 A-415 화합물의 $^1\text{H-NMR}$ 결과 데이터이다.

도 8은 실시예 3의 A-9 화합물의 $^1\text{H-NMR}$ 결과 데이터이다.

도 9는 실시예 4의 A-10 화합물의 $^1\text{H-NMR}$ 결과 데이터이다.

도 10은 실시예 5의 A-11 화합물의 $^1\text{H-NMR}$ 결과 데이터이다.

도 11은 실시예 6의 A-18 화합물의 $^1\text{H-NMR}$ 결과 데이터이다.

도 12는 실시예 7의 A-19 화합물의 $^1\text{H-NMR}$ 결과 데이터이다.

도 13은 실시예 27의 A-469 화합물의 $^1\text{H-NMR}$ 결과 데이터이다.

도 14는 실시예 28의 A-470 화합물의 $^1\text{H-NMR}$ 결과 데이터이다.

도 15는 실시예 29의 A-457 화합물의 $^1\text{H-NMR}$ 결과 데이터이다.

도 16은 실시예 37의 A-416 화합물의 $^1\text{H-NMR}$ 결과 데이터이다.

도 17은 실시예 38의 A-12 화합물의 $^1\text{H-NMR}$ 결과 데이터이다.

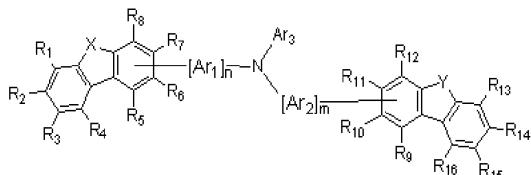
도 18은 실시예 39의 A-13 화합물의 $^1\text{H-NMR}$ 결과 데이터이다.

도 19는 실시예 3 내지 5의 PL(photoluminescence) 광장을 측정한 데이터이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0117] 이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할 청구범위의 범주에 의해 정의될 뿐이다.
- [0118] 본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기, 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.
- [0119] 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.
- [0120] 본 명세서에서 "이들의 조합"이란 별도의 정의가 없는 한, 둘 이상의 치환기가 연결기로 결합되어 있거나, 둘 이상의 치환기가 축합하여 결합되어 있는 것을 의미한다.
- [0121] 본 명세서에서 "알킬(alkyl)기"이란 별도의 정의가 없는 한, 지방족 탄화수소기를 의미한다. 알킬기는 어떠한 알켄기나 알킨기를 포함하고 있지 않음을 의미하는 "포화 알킬(saturated alkyl)기"일 수 있다. 알킬기는 적어도 하나의 알켄기 또는 알킨기를 포함하고 있음을 의미하는 "불포화 알킬(unsaturated alkyl)기"일 수도 있다. "알켄(alkene)기"는 적어도 두 개의 탄소원자가 적어도 하나의 탄소-탄소 이중 결합으로 이루어진 작용기를 의미하며, "알킨(alkyne)기"는 적어도 두 개의 탄소원자가 적어도 하나의 탄소-탄소 삼중 결합으로 이루어진 작용기를 의미한다. 포화이든 불포화이든 간에 알킬기는 분지형, 직쇄형 또는 환형일 수 있다.
- [0122] 알킬기는 C1 내지 C20인 알킬기일 수 있다. 알킬기는 C1 내지 C10인 중간 크기의 알킬기일 수도 있다. 알킬기는 C1 내지 C6인 저급 알킬기일 수도 있다.
- [0123] 예를 들어, C1 내지 C4 알킬기는 알킬쇄에 1 내지 4 개의 탄소원자, 즉, 알킬쇄는 메틸, 에틸, 프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소-부틸, sec-부틸 및 t-부틸로 이루어진 군에서 선택됨을 나타낸다.
- [0124] 전형적인 알킬기에는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등으로부터 개별적으로 그리고 독립적으로 선택된 하나 또는 그 이상의 그룹들로 치환될 수도 있는 작용기임을 의미한다.
- [0125] "방향족기"는 고리 형태인 작용기의 모든 원소가 p-오비탈을 가지고 있으며, 이를 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 작용기를 의미한다. 구체적인 예로 아릴기와 헤테로아릴기가 있다.
- [0126] "아릴(aryl)기"는 모노시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.
- [0127] "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헤테로아릴기가 융합고리인 경우, 각각의 고리마다 상기 헤테로 원자를 1 내지 3개 포함할 수 있다.
- [0128] "스피로(spiro) 구조"는 하나의 탄소를 접점으로 가지고 있는 고리 구조를 의미한다. 또한, 스피로 구조는 스피로 구조를 포함하는 화합물 또는 스피로 구조를 포함하는 치환기로도 쓰일 수 있다.
- [0129] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물은 두 개의 카바졸계 유도체가 질소원자에 각각 결합된 코어 구조를 가질 수 있다. 본 명세서에서 카바졸계 유도체라함은 치환 또는 비치환된 카바졸릴기의 질소원자가 질소가 아닌 헤테로 원자로 치환된 구조를 의미한다. 단, 두 개의 카바졸릴기가 결합된 구조는 본 발명의 일 구현예에서 제외된다.

- [0130] 상기 코어 구조는 정공 특성이 뛰어난 카바졸 유도체가 기본적으로 두 개 이상 존재하기 때문에 유기발광소자의 정공주입재료 또는 정공수송재료로 이용될 수 있다.
- [0131] 상기 코어에 결합된 치환기 중 적어도 하나는 전자 특성이 우수한 치환기일 수 있다.
- [0132] 따라서, 상기 화합물은 정공 특성이 우수한 카바졸 구조에 전자 특성을 보강하여 발광층에서 요구되는 조건을 만족시킬 수 있다. 보다 구체적으로 발광층의 호스트 재료로 이용이 가능하다.
- [0133] 또한, 상기 유기광전소자용 화합물은 코어 부분과 코어 부분에 치환된 치환기에 다양한 또 다른 치환기를 도입함으로써 다양한 에너지 밴드 갭을 갖는 화합물이 될 수 있다.
- [0134] 상기 화합물의 치환기에 따라 적절한 에너지 준위를 가지는 화합물을 유기광전소자에 사용함으로써, 정공전달 능력 또는 전자전달 능력이 강화되어 효율 및 구동전압 면에서 우수한 효과를 가지고, 전기화학적 및 열적 안정성이 뛰어나 유기광전소자 구동시 수명 특성을 향상시킬 수 있다.
- [0135] 이러한 본 발명의 일 구현예에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 유기광전소자용 화합물을 제공한다.
- [0136] [화학식 1]

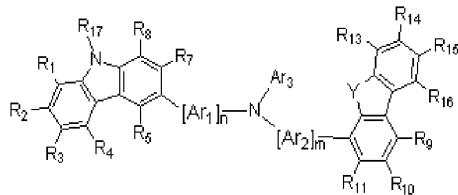


- [0137]
- [0138] 상기 화학식 1에서, R₁ 내지 R₁₆은 서로 동일하거나 상이하며, 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 카르복실기, 폐로세닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20의 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C20 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 술포모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 헤테로시클로로티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20의 우레이드기 및 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.
- [0139] 또한, R₁ 내지 R₈ 중 어느 하나는 Ar₁과의 결합을 나타내고, R₉ 내지 R₁₆ 중 어느 하나는 Ar₂와의 결합을 나타낸다. 즉, R₁ 내지 R₈의 치환 위치 중에 적어도 하나는 Ar₁과 시그마 결합으로 연결되어 있을 수 있으며, R₉ 내지 R₁₆의 치환 위치 중에 적어도 하나는 Ar₂과 시그마 결합으로 연결되어 있을 수 있다.
- [0140] 상기 치환기의 적절한 조합에 의해 정공 또는 전자 특성, 막 안정성, 열적 안정성 및 높은 3중향 여기에너지 (T1)을 가지는 유기광전소자용 화합물을 제조할 수 있다.
- [0141] 또한, 상기 치환기의 적절한 조합에 의해 열적 안정성 또는 산화에 대한 저항성이 우수한 구조의 화합물을 제조할 수 있게 된다.
- [0142] 치환기의 적절한 조합에 의해 비대칭 바이폴라(bipolar)특성의 구조를 제조할 수 있으며, 상기 비대칭 바이폴라 특성의 구조는 정공과 전자 전달 능력을 향상시켜 소자의 발광효율과 성능 향상을 기대할 수 있다.
- [0143] 또한, 치환기의 조절로 화합물의 구조를 별크하게 제조할 수 있으며, 이로 인해 결정화도를 낮출 수 있다. 화합물의 결정화도가 낮아지게 되면 소자의 수명이 길어질 수 있다.
- [0144] X는 NR₁₇, O, S 및 SO₂(O=S=O)로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 R₁₇는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 및 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택될 수 있고, Y는 O, S 또는 SO₂(O=S=O)일 수 있다.

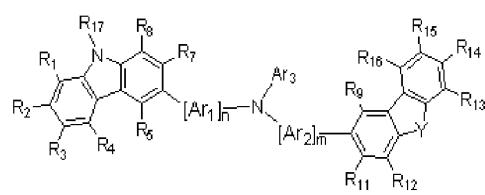
- [0145] 즉, 상기 화학식 1의 코어 구조에서 질소 원자의 양 치환기인 카바졸 유도체들의 헤테로 원자는 동시에 N(즉, 카바졸)일 수 없다. 이를 다시 말하면, 상기 화학식 1의 3차 아릴아민의 질소의 치환기로 둘 이상의 카바졸릴기가 존재할 수 없다. 이는 대칭성의 증가로 화합물의 결정화도가 증가할 수 있기 때문이다.
- [0146] 또한, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하며, 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, n 은 1 내지 4 중 어느 하나인 정수이고, m 은 0 내지 4 중 어느 하나인 정수일 수 있다. Ar_1 및 Ar_2 의 길이 조절로 인해 전체의 파이공액길이(π -conjugation length)가 조절되어, 이로 인해 삼중향 에너지 밴드갭을 조절함으로써 인광호스트로 유기광전소자의 발광층에 매우 유용하게 적용될 수 있도록 하는 역할을 할 수 있다. 또한 헤테로아릴기가 도입될 경우 분자구조에 바이폴라 특성이 구현되어 인광호스트로서 고효율을 나타낼 수 있다.
- [0147] Ar_3 은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이다. 단 상기 X가 NR₁₇인 경우 플루오레닐기는 제외된다.
- [0148] 또한, 상기 Ar_3 은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이다. 단 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨라닐기 및 치환 또는 비치환된 디벤조티오페닐기는 제외되고, 상기 X가 NR₁₇인 경우 플루오레닐기는 제외되는 것일 수 있다. 전술한 치환기가 제외되는 경우, 분자 내 대칭성의 감소로 결정화가 낮아질 수 있고 따라서 소자내에서 재결정화가 억제되는 장점이 있다.
- [0149] 구체적인 Ar₃의 예로는 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐일기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오페닐기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸일기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈옥사진일기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진일기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 폐나진일기, 치환 또는 비치환된 폐노티아진일기, 치환 또는 비치환된 폐녹사진일기 등이 있다.
- [0150] 상기 X는 NR₁₇, O, S 및 SO₂(O=S=O)로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 R₁₇는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이며, 여기서 "치환"이란, 상기 아릴기 또는 헤테로아릴기의 수소 중 적어도 하나가 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된 치환기로 치환된 것일 수 있다.
- [0151] 상기와 같이 R₁₇의 치환기 중 어느 하나가 수소가 아닌 전술한 치환기 중 어느 하나인 경우 치환기가 없는 화합물의 기본적인 특성을 유지하면서 유기광전소자용 재료로서 성능을 최적화하기 위한 전기광학적 특성, 박막 특성을 미세하게 조절할 수 있는 장점이 있다.

[0152] 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 7 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

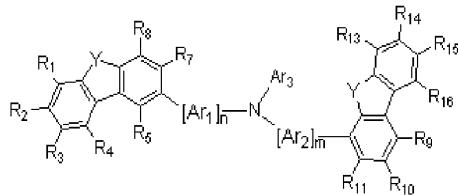
[화학식 2]



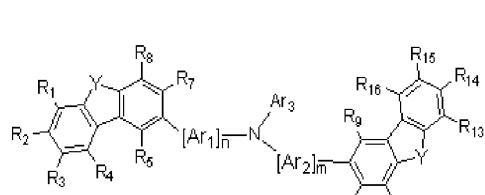
[화학식 3]



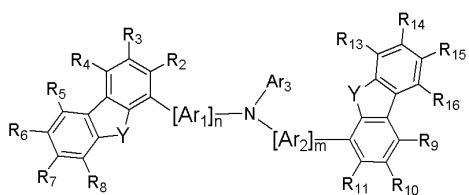
[화학식 4]



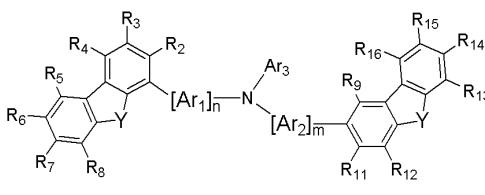
[화학식 5]



[화학식 6]



[화학식 7]

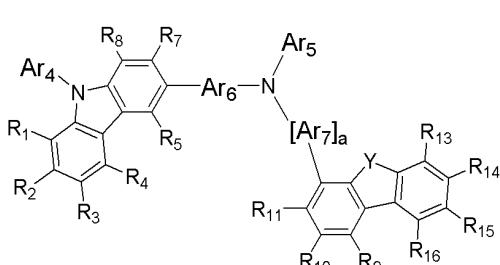


[0153]

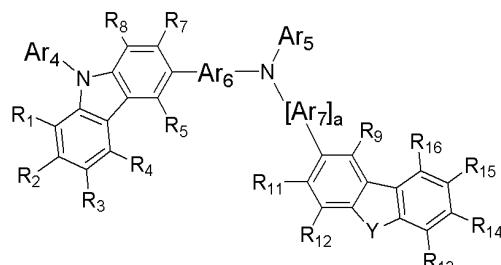
[0154] 상기 화학식 2 내지 7은 화학식 1의 구조 중 카바졸 유도체, 즉 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기 등의 치환기의 결합위치를 한정한 것이다. 상기 결합위치를 만족할 경우 실질적인 합성 측면에서 유리할 수 있다.

[0155] 상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 8 또는 9로 표시되는 것일 수 있다.

[화학식 8]



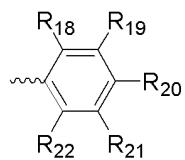
[화학식 9]



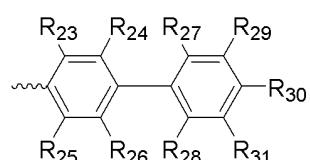
[0156]

[0157] 상기 화학식 8 및 9에서, Ar₄ 및 Ar₅은 서로 동일하거나 상이하며, 독립적으로 하기 화학식 10 내지 18로 표시되는 치환기 중 어느 하나로 선택되고,

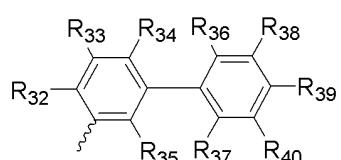
[화학식 10]



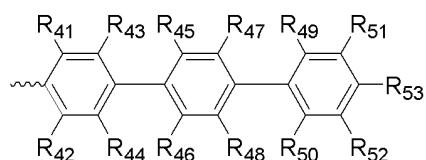
[화학식 11]



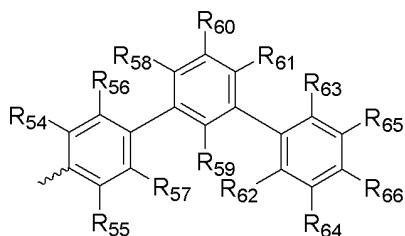
[화학식 12]



[화학식 13]



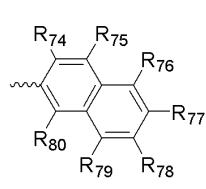
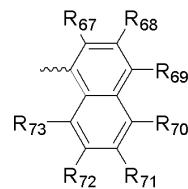
[화학식 14]



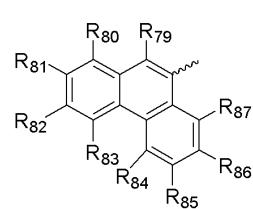
[0158]

[0159]

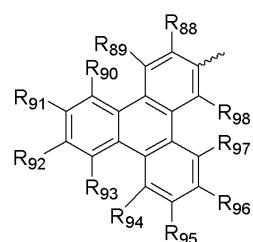
[화학식 15]



[화학식 17]



[화학식 18]



[0160]

[0161] 상기 R₁ 내지 R₅, R₇ 내지 R₁₆ 및 R₁₈ 내지 R₉₈은 서로 동일하거나 상이하며, 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기 및 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기로 이루어진 군에서 선택되고, Ar₆ 및 Ar₇은 서로 동일하거나 상이하며, 독립적으로 상기 화학식 10 내지 18로 표시되는 치환기 중 어느 하나로 선택되며, 상기 선택된 치환기의 상기 R₁₈ 내지 R₉₈ 중 어느 하나는 인접한 원자와의 결합을 나타내고, a는 0 또는 1이다.

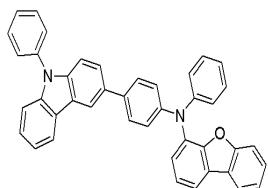
[0162] 상기 화학식 8 또는 9로 표시되는 화합물은 카바졸릴기의 질소에 결합된 치환기 및/또는 아민에 결합된 치환기가 치환 또는 비치환된 아릴기인 경우이다. 이러한 구조의 경우 카바졸릴기의 우수한 정공 수송성과 더불어 분자 전체의 비대칭성에 의해 재결정화가 쉽게 일어나지 않아 유기전계발광소자의 정공주입 및 정공수송층에 사용할 경우 장수명, 고효율을 나타내는 효과가 있다.

[0163] 또한, 상기 Ar₄는 상기 화학식 10 내지 18로 표시되는 치환기 중 어느 하나에서 선택되나, 상기 Ar₄로 선택된 치환기의 R₁₈ 내지 R₉₈ 중 적어도 어느 하나는 수소가 아닌 것일 수 있으며, 구체적으로는 중수소, 할로겐기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기 및 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

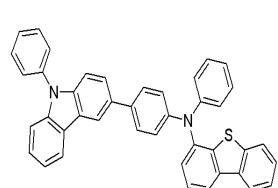
[0164] 즉, Ar₄의 치환기 중 어느 하나는 전술한 치환기 중 어느 하나로 치환된 구조일 수 있다. 이러한 구조의 경우 화합물의 기본적인 특성을 유지하면서 유기광전소자용 재료로서 성능을 최적화하기 위한 전기광학적 특성, 박막 특성을 미세하게 조절할 수 있는 효과가 있다.

[0165] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 A-1 내지 A-305, A-414 내지 A-416, A-457, A-458 또는 A-469 내지 A-473 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 하기와 같은 구조는 카바졸릴의 우수한 정공 수송성과 더불어 분자 전체의 비대칭성에 의해 박막 특성이 우수하고 열적안정성이 증가하여 유기전계발광소자의 정공주입 및 정공수송층에 사용할 경우 장수명, 고효율을 나타내는 장점이 있다.

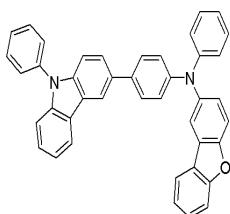
[A-1]



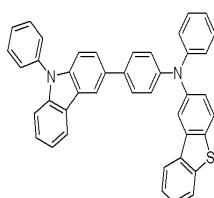
[A-2]



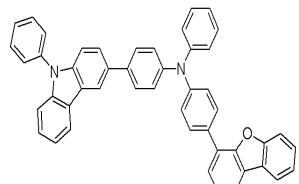
[A-3]



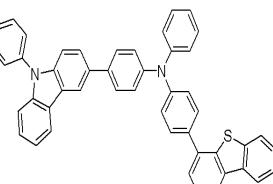
[A-4]



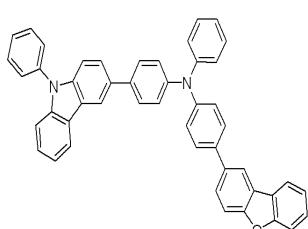
[A-5]



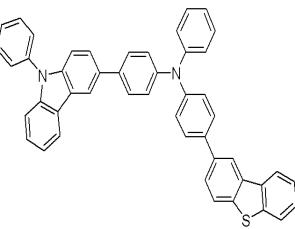
[A-6]



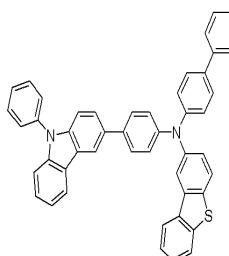
[A-7]



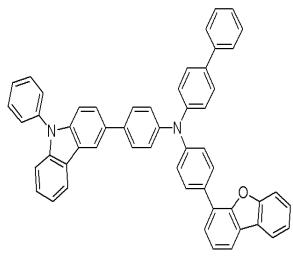
[A-8]



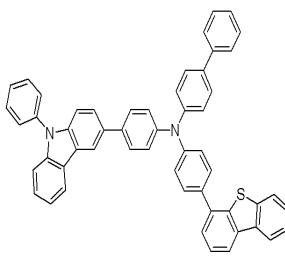
[A-9]



[A-10]

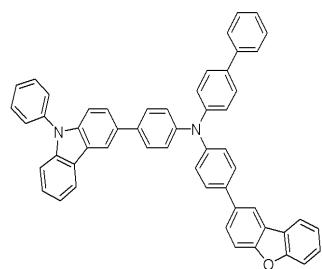


[A-11]

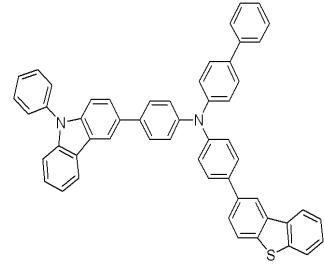


[0166]

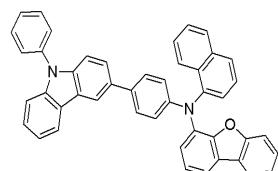
[A-12]



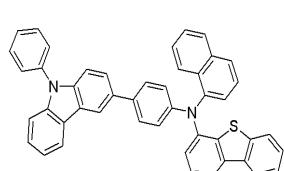
[A-13]



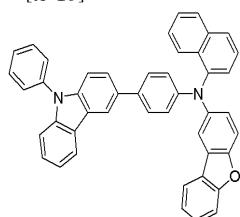
[A-14]



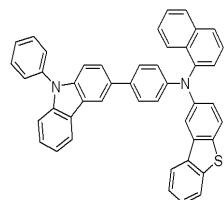
[A-15]



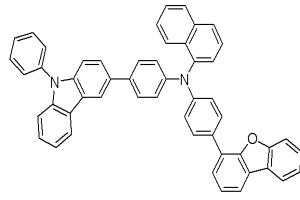
[A-16]



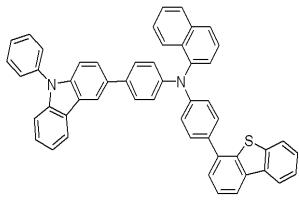
[A-17]



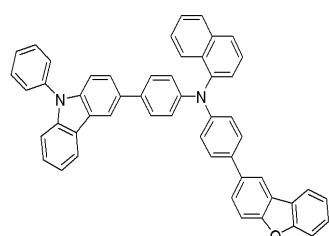
[A-18]



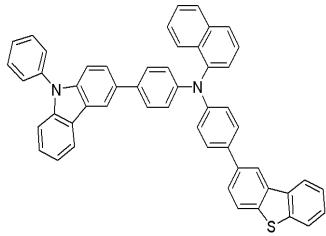
[A-19]



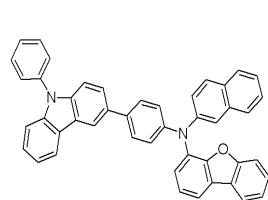
[A-20]



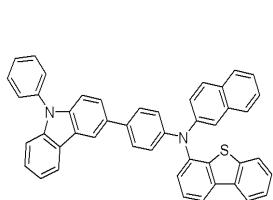
[A-21]



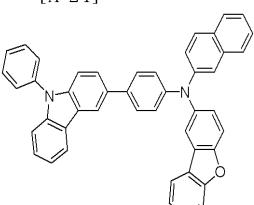
[A-22]



[A-23]

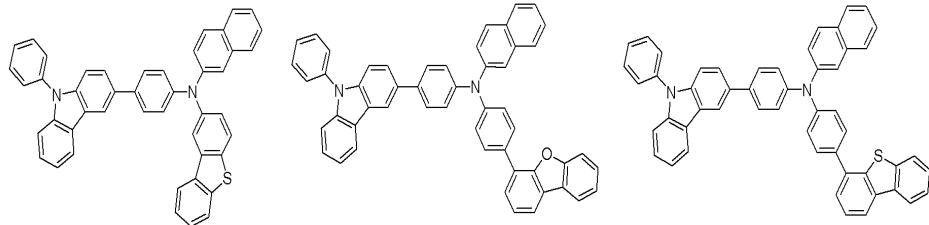


[A-24]



[0167]

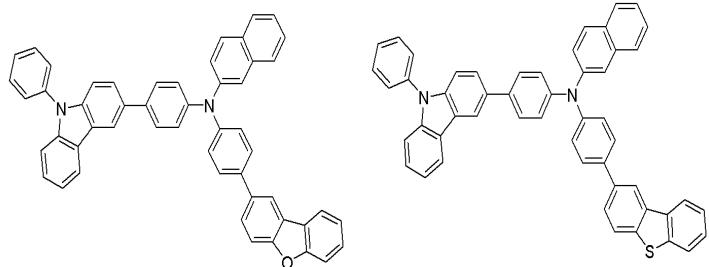
[A-25]



[A-26]

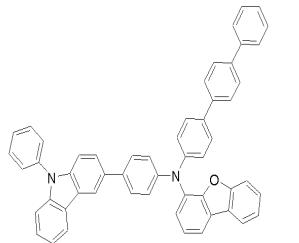
[A-27]

[A-28]

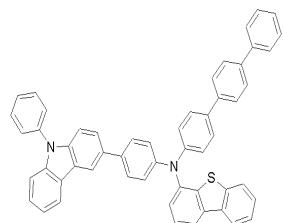


[A-29]

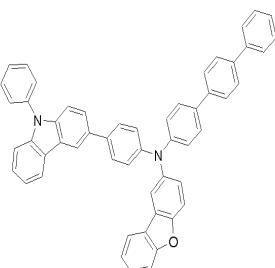
[A-30]



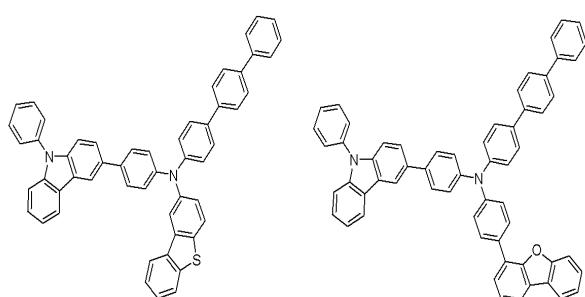
[A-31]



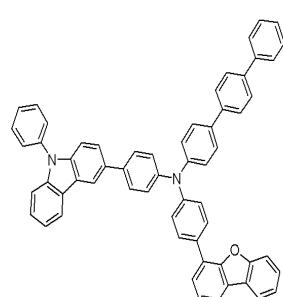
[A-32]



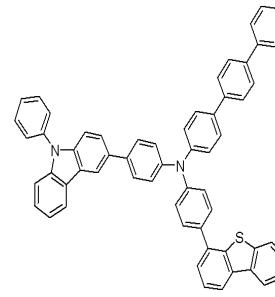
[A-33]



[A-34]

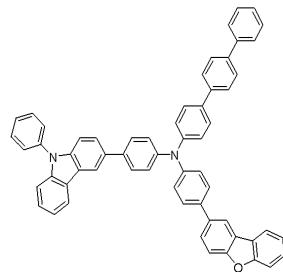


[A-35]

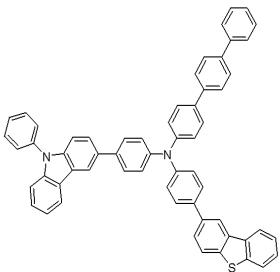


[0168]

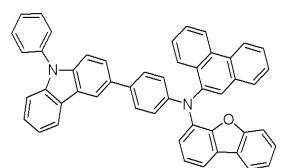
[A-36]



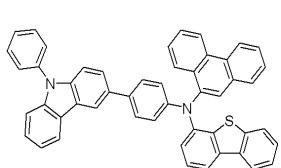
[A-37]



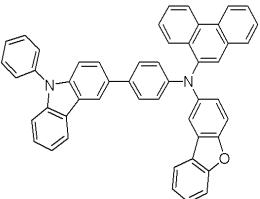
[A-38]



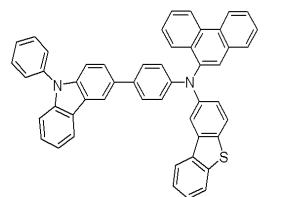
[A-39]



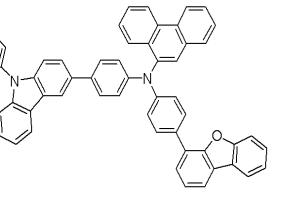
[A-40]



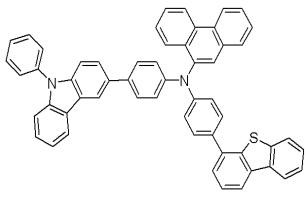
[A-41]



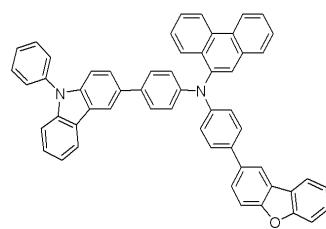
[A-42]



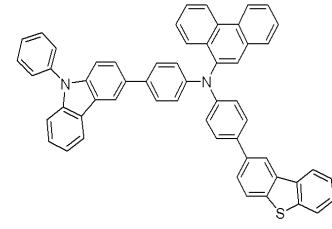
[A-43]



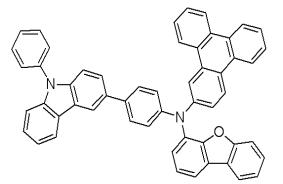
[A-44]



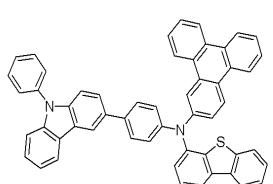
[A-45]



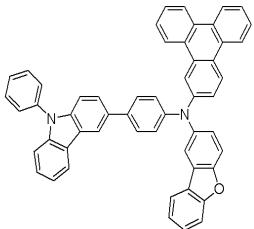
[A-46]



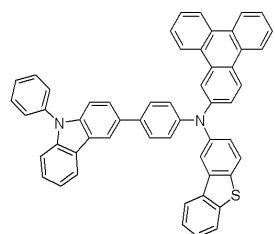
[A-47]



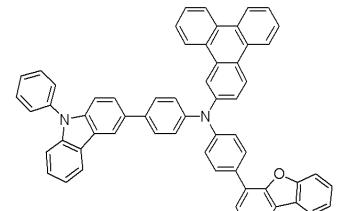
[A-48]



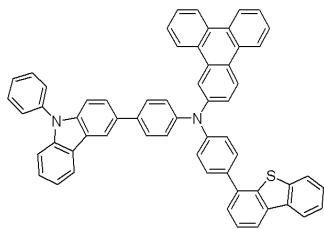
[A-49]



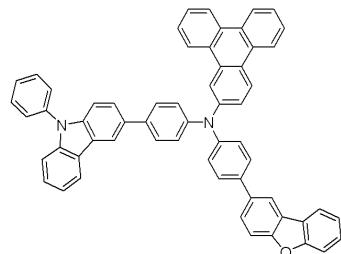
[A-50]



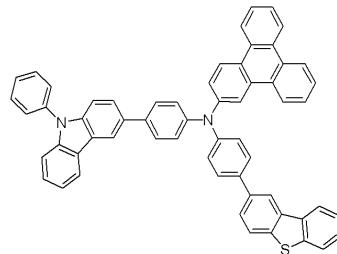
[A-51]



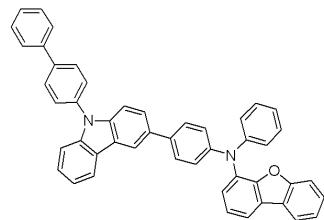
[A-52]



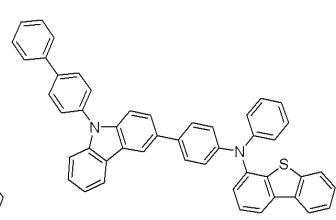
[A-53]



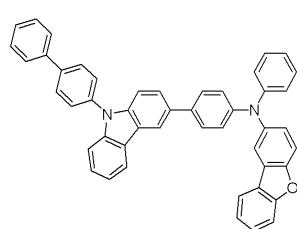
[A-54]



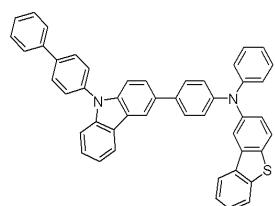
[A-55]



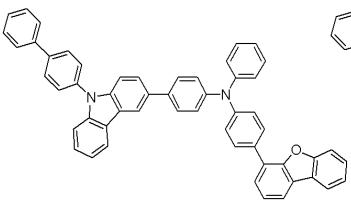
[A-56]



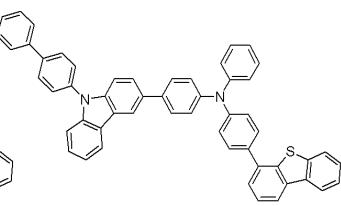
[A-57]



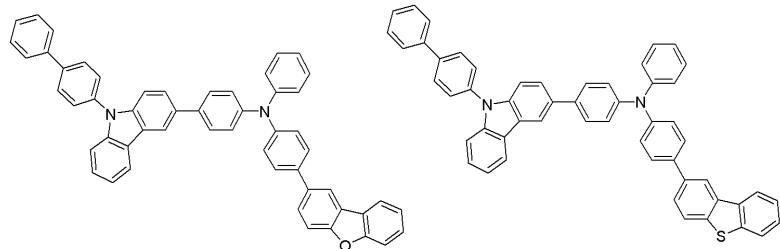
[A-58]



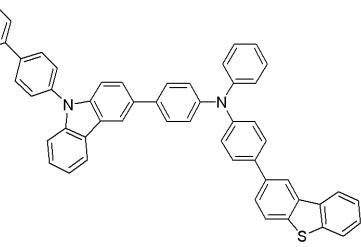
[A-59]



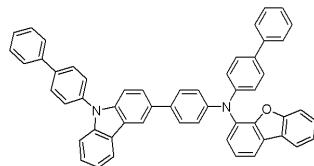
[A-60]



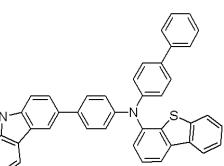
[A-61]



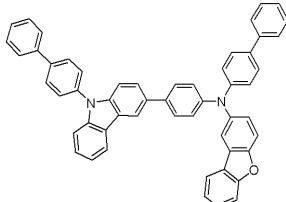
[A-62]



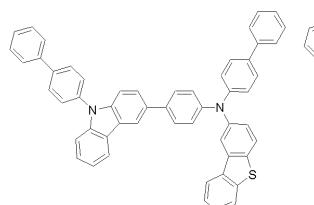
[A-63]



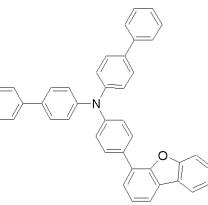
[A-64]



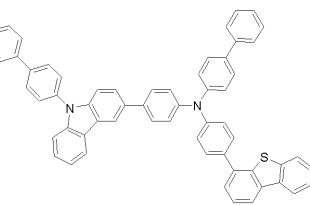
[A-65]



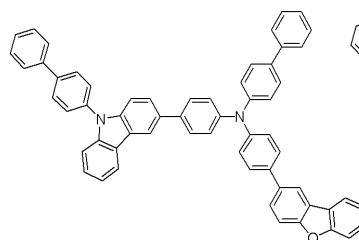
[A-66]



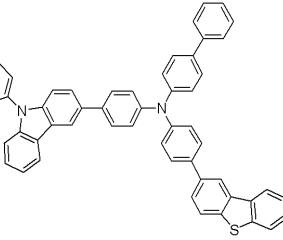
[A-67]



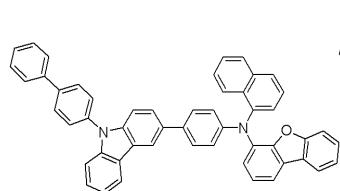
[A-68]



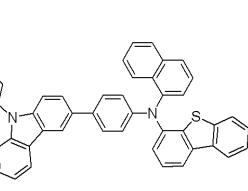
[A-69]



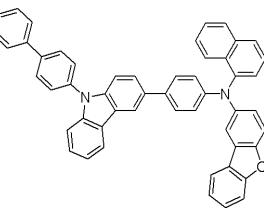
[A-70]



[A-71]

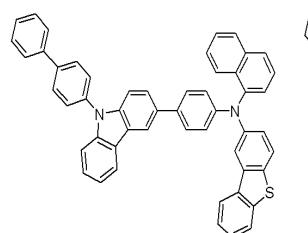


[A-72]

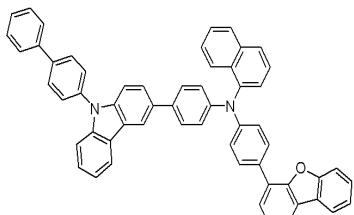


[0171]

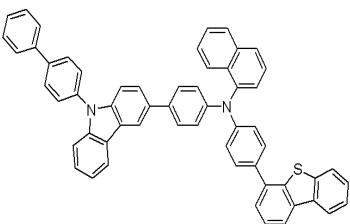
[A-73]



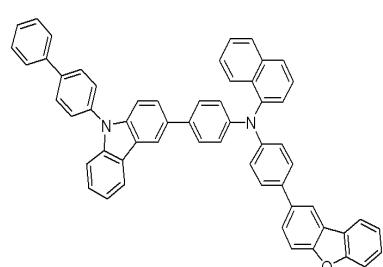
[A-74]



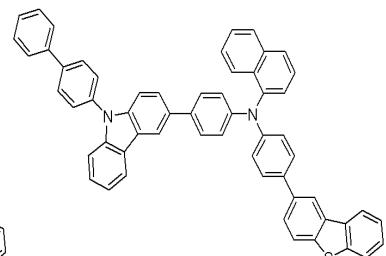
[A-75]



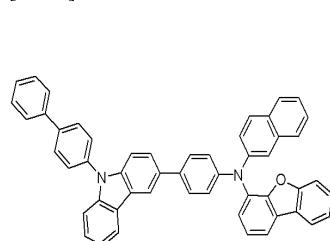
[A-76]



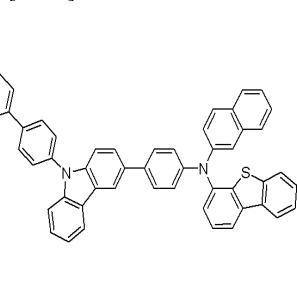
[A-77]



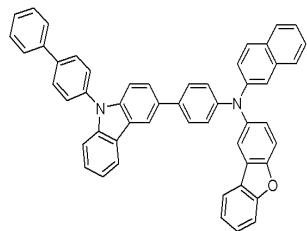
[A-78]



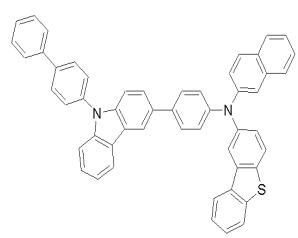
[A-79]



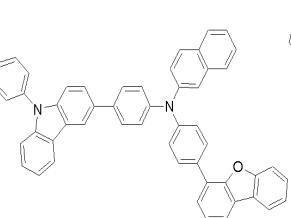
[A-80]



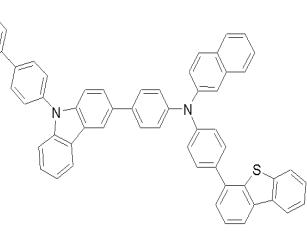
[A-81]



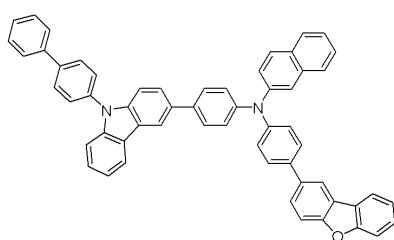
[A-82]



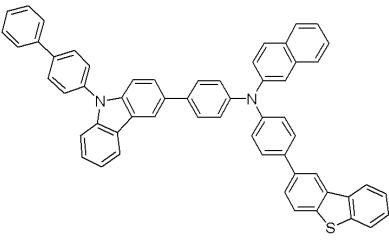
[A-83]



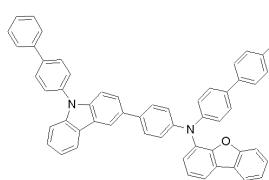
[A-84]



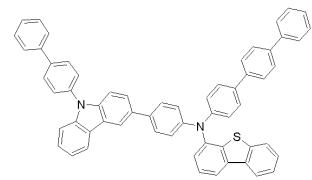
[A-85]



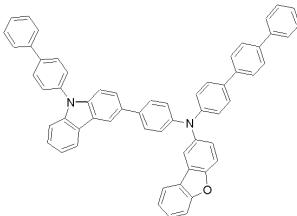
[A-86]



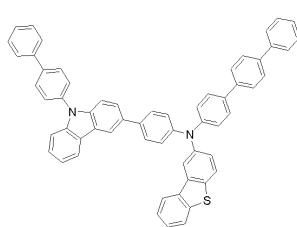
[A-87]



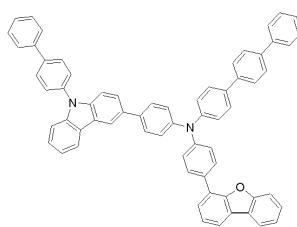
[A-88]



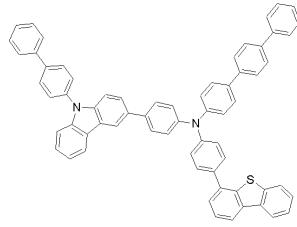
[A-89]



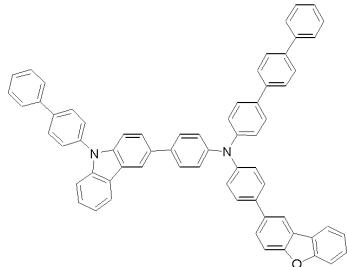
[A-90]



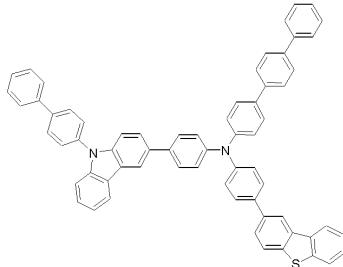
[A-91]



[A-92]

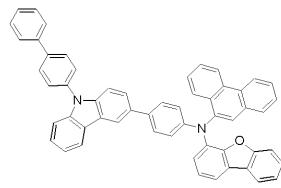


[A-93]

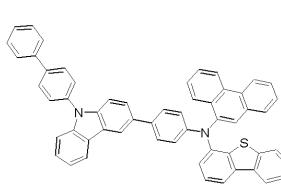


[0173]

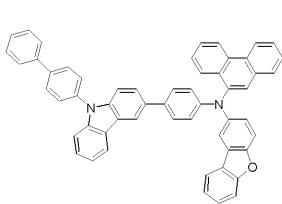
[A-94]



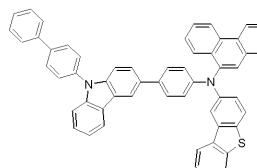
[A-95]



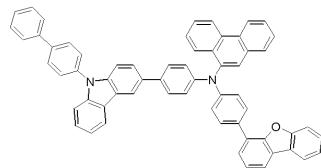
[A-96]



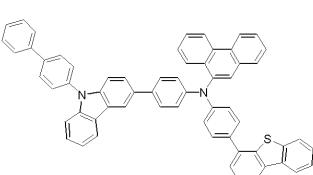
[A-97]



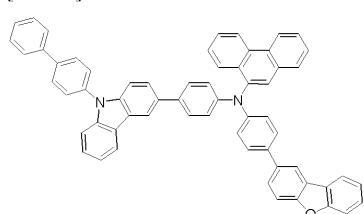
[A-98]



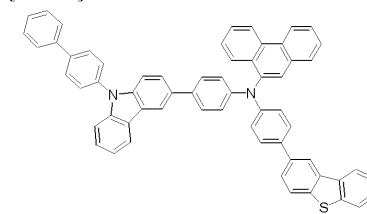
[A-99]



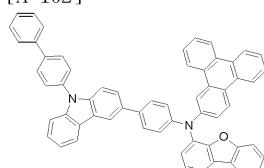
[A-100]



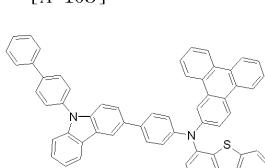
[A-101]



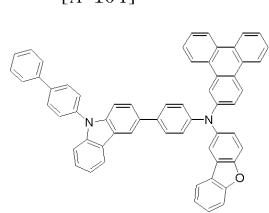
[A-102]



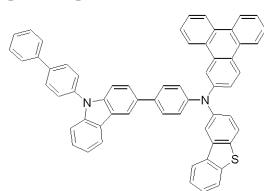
[A-103]



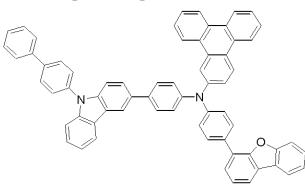
[A-104]



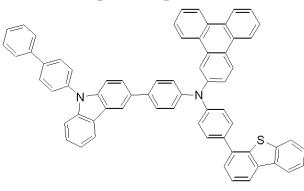
[A-105]



[A-106]

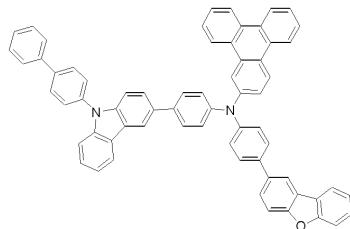


[A-107]

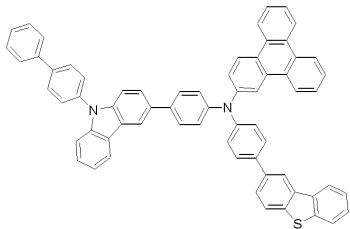


[0174]

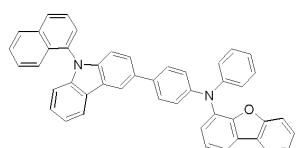
[A-108]



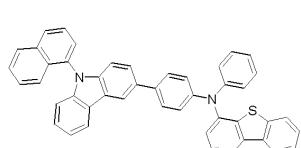
[A-109]



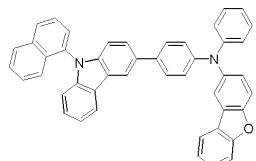
[A-110]



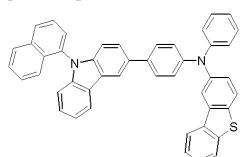
[A-111]



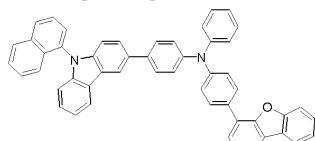
[A-112]



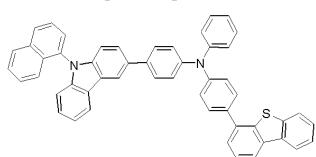
[A-113]



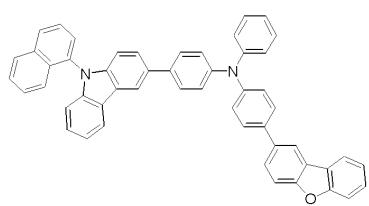
[A-114]



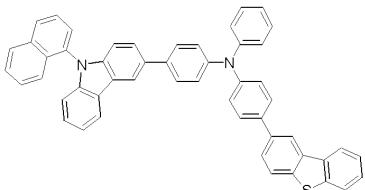
[A-115]



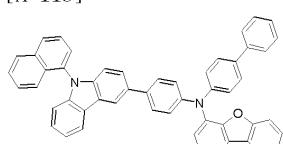
[A-116]



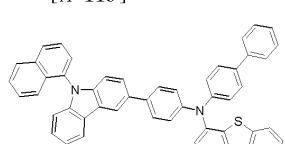
[A-117]



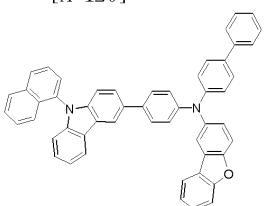
[A-118]



[A-119]

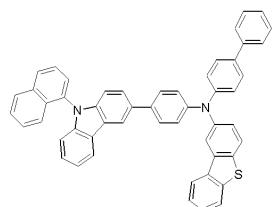


[A-120]

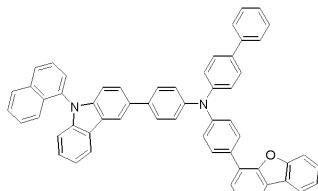


[0175]

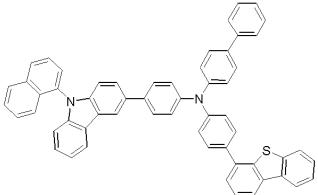
[A-121]



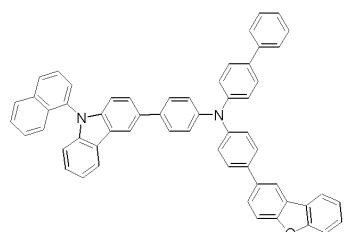
[A-122]



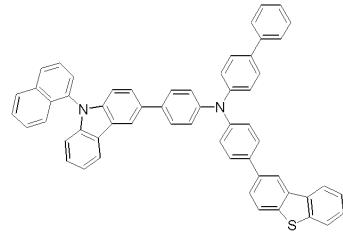
[A-123]



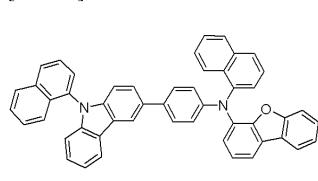
[A-124]



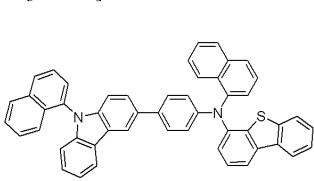
[A-125]



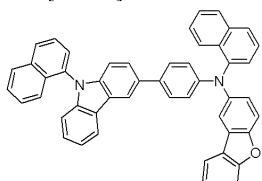
[A-126]



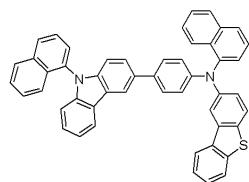
[A-127]



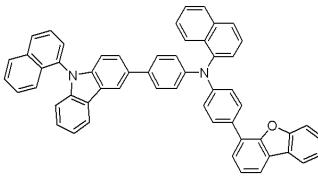
[A-128]



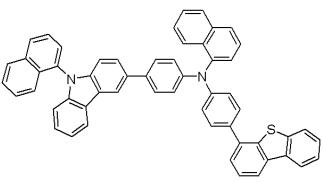
[A-129]



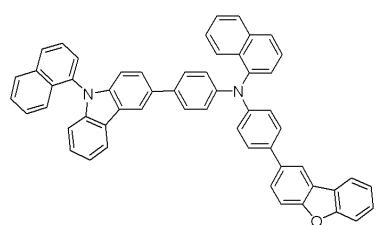
[A-130]



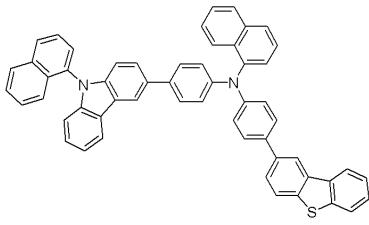
[A-131]



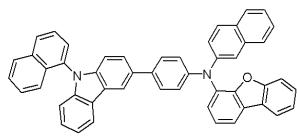
[A-132]



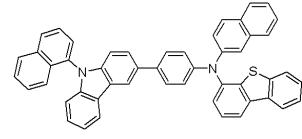
[A-133]



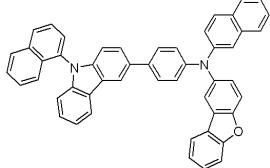
[A-134]



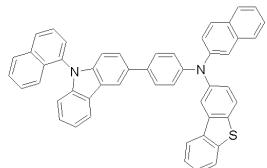
[A-135]



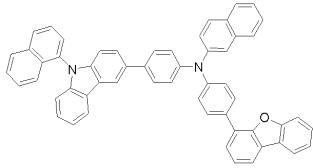
[A-136]



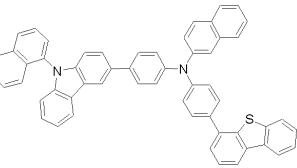
[A-137]



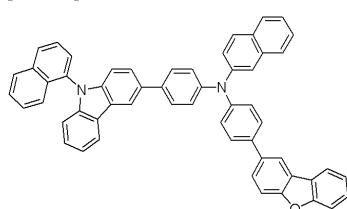
[A-138]



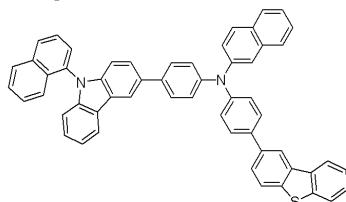
[A-139]



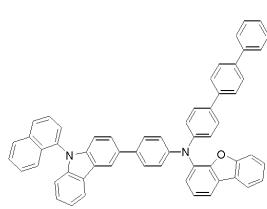
[A-140]



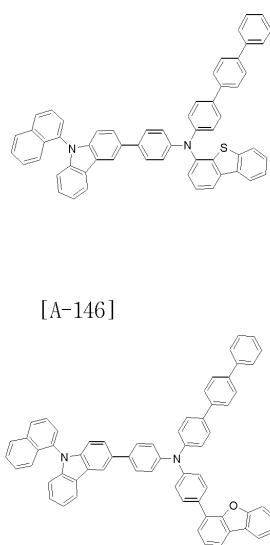
[A-141]



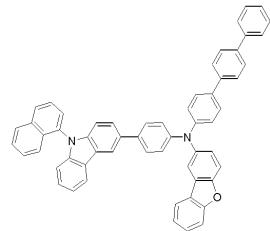
[A-142]



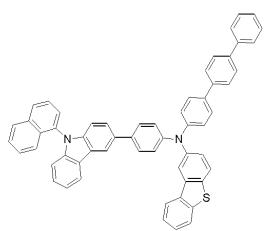
[A-143]



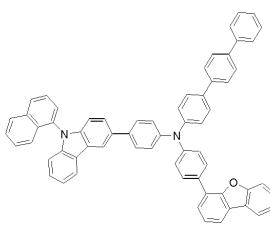
[A-144]



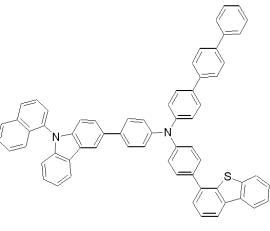
[A-145]



[A-146]

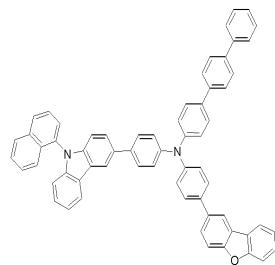


[A-147]

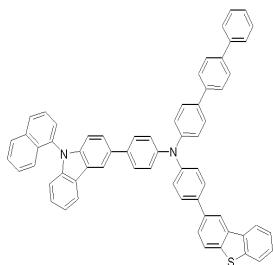


[0177]

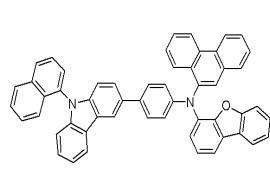
[A-148]



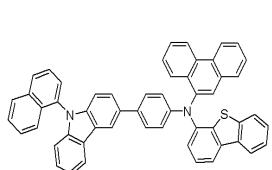
[A-149]



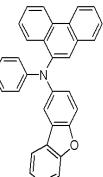
[A-150]



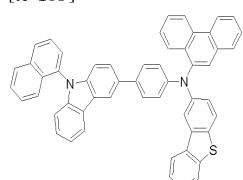
[A-151]



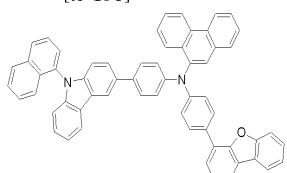
[A-152]



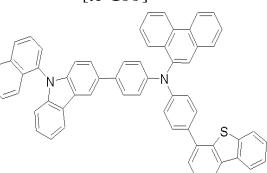
[A-153]



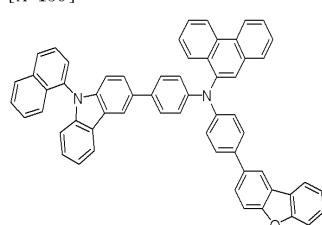
[A-154]



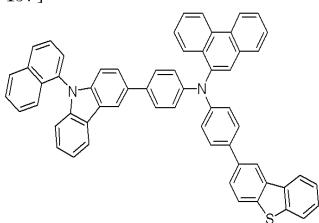
[A-155]



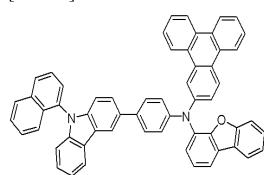
[A-156]



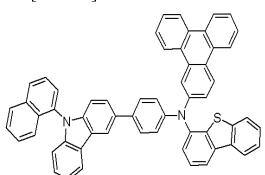
[A-157]



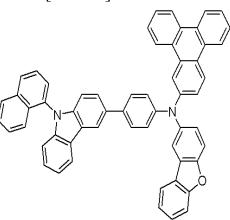
[A-158]



[A-159]

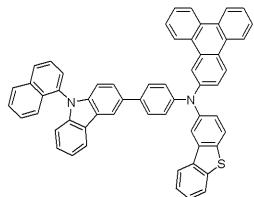


[A-160]

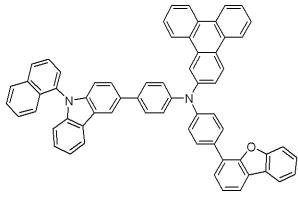


[0178]

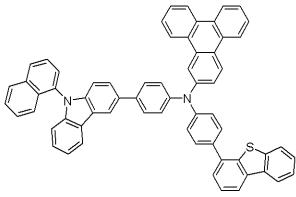
[A-161]



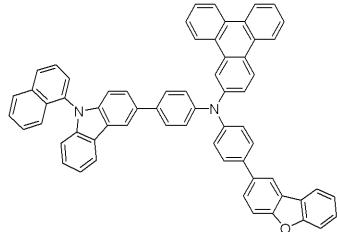
[A-162]



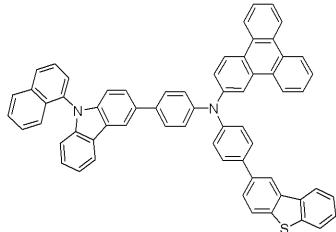
[A-163]



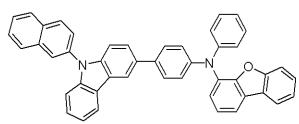
[A-164]



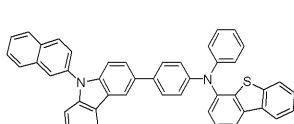
[A-165]



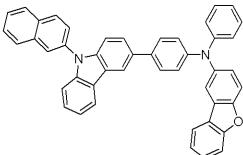
[A-166]



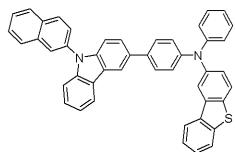
[A-167]



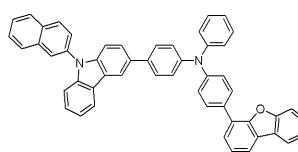
[A-168]



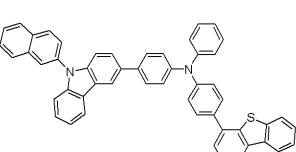
[A-169]



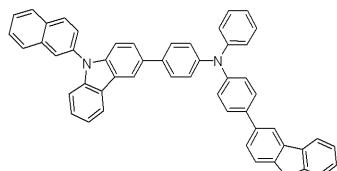
[A-170]



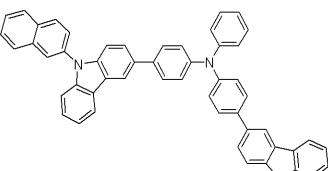
[A-171]



[A-172]

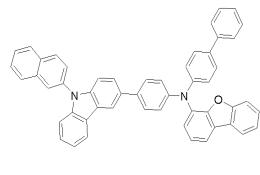


[A-173]

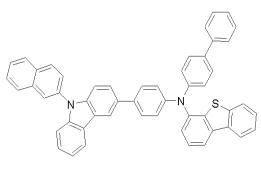


[0179]

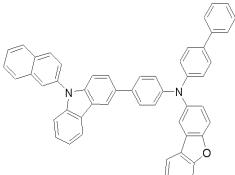
[A-174]



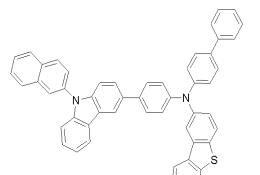
[A-175]



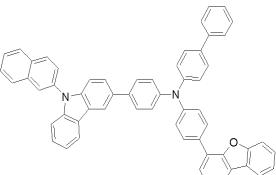
[A-176]



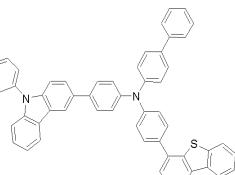
[A-177]



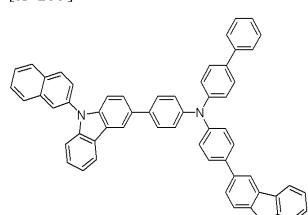
[A-178]



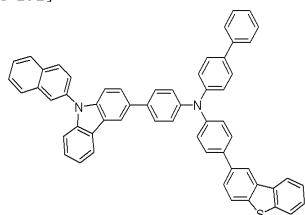
[A-179]



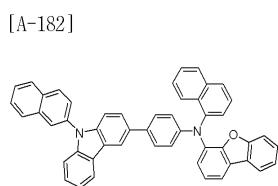
[A-180]



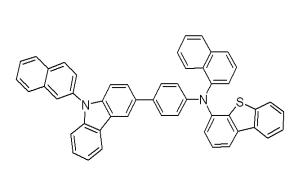
[A-181]



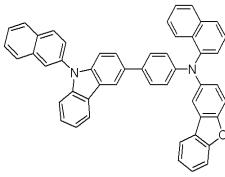
[A-182]



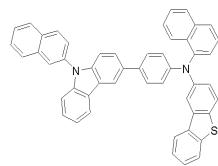
[A-183]



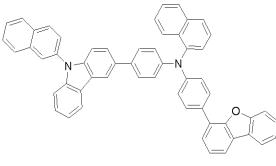
[A-184]



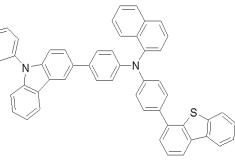
[A-185]



[A-186]

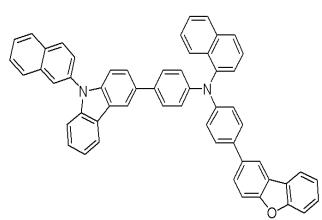


[A-187]

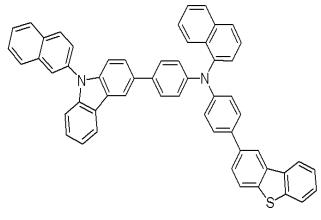


[0180]

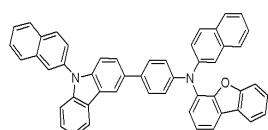
[A-188]



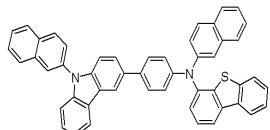
[A-189]



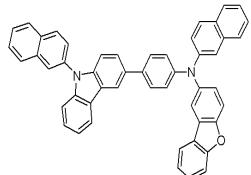
[A-190]



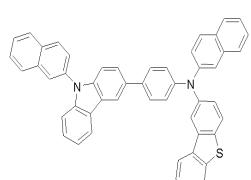
[A-191]



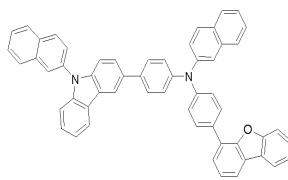
[A-192]



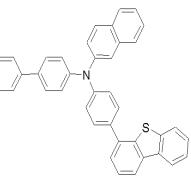
[A-193]



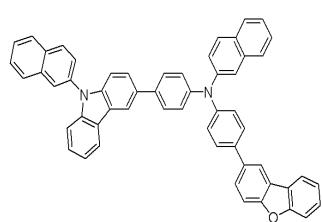
[A-194]



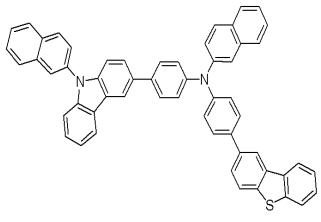
[A-195]



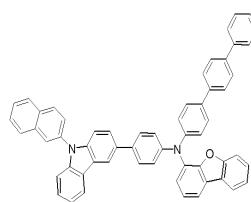
[A-196]



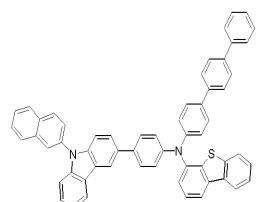
[A-197]



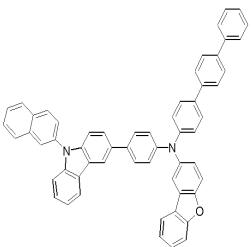
[A-198]



[A-199]

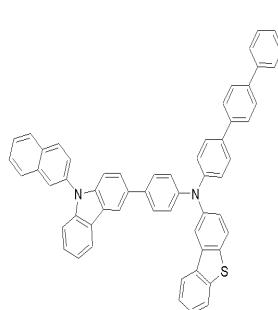


[A-200]

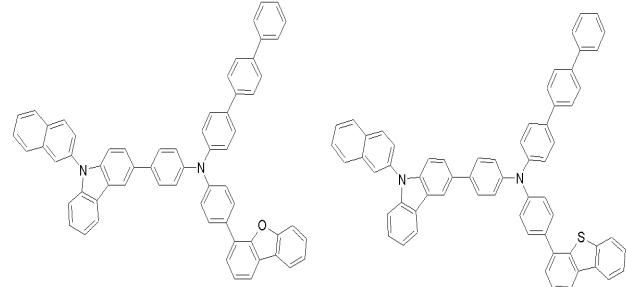


[0181]

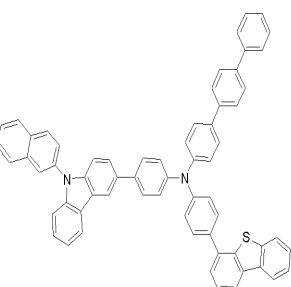
[A-201]



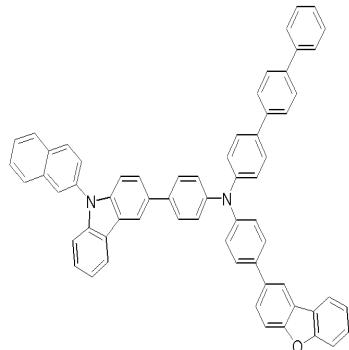
[A-202]



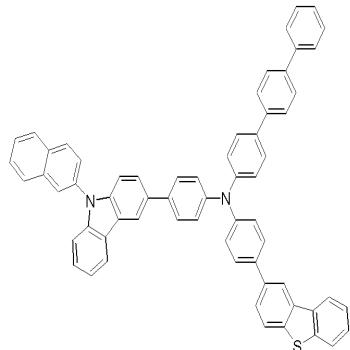
[A-203]



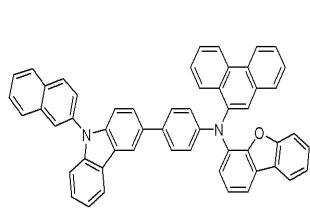
[A-204]



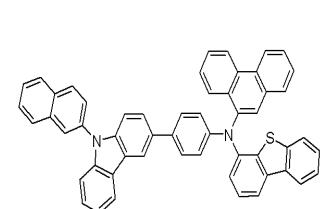
[A-205]



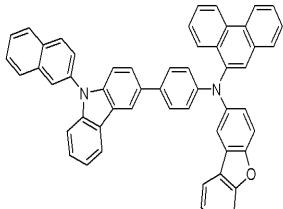
[A-206]



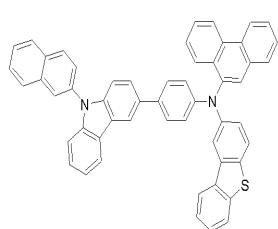
[A-207]



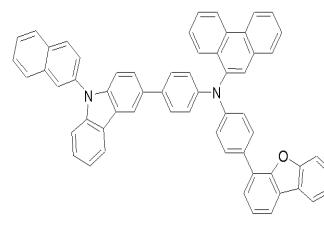
[A-208]



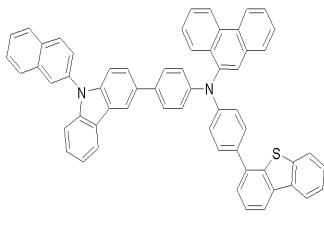
[A-209]



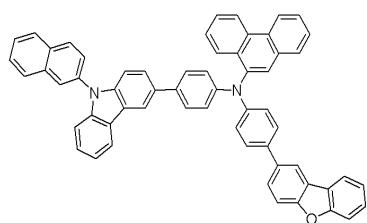
[A-210]



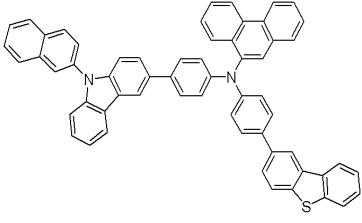
[A-211]



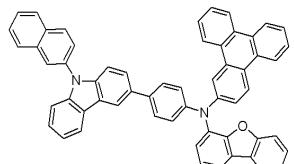
[A-212]



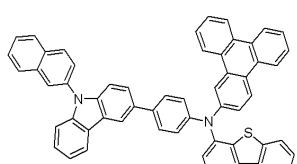
[A-213]



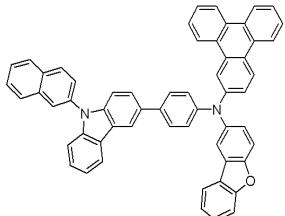
[A-214]



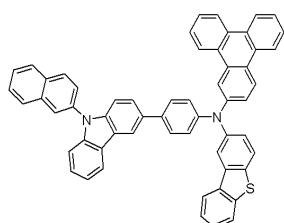
[A-215]



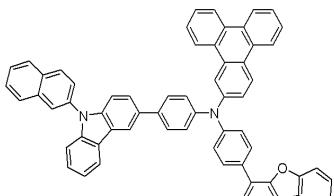
[A-216]



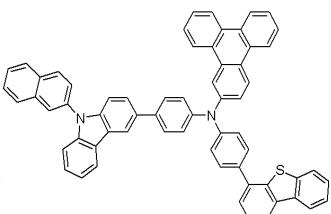
[A-217]



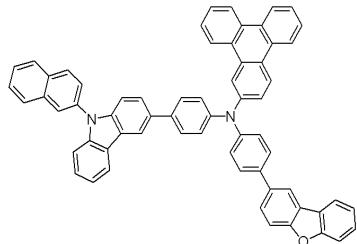
[A-218]



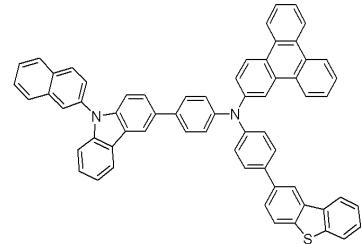
[A-219]



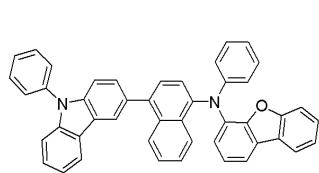
[A-220]



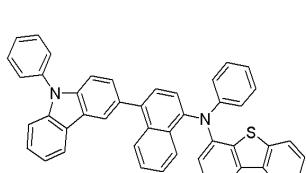
[A-221]



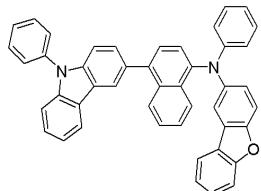
[A-222]



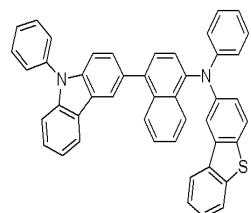
[A-223]



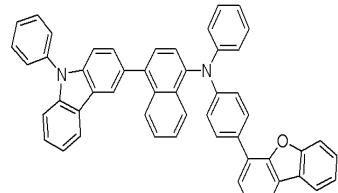
[A-224]



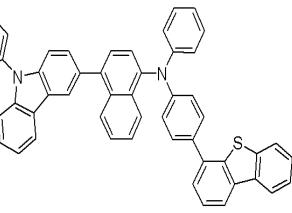
[A-225]



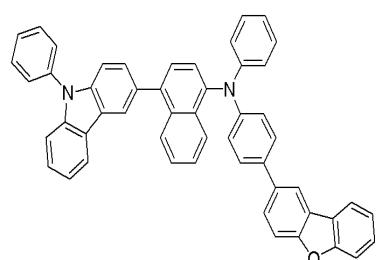
[A-226]



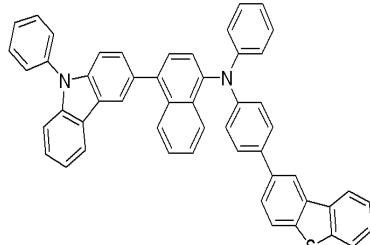
[A-227]



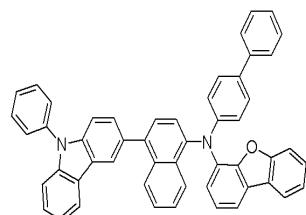
[A-228]



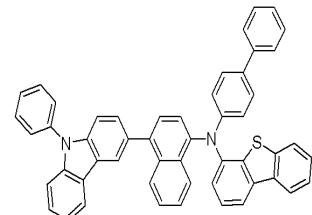
[A-229]



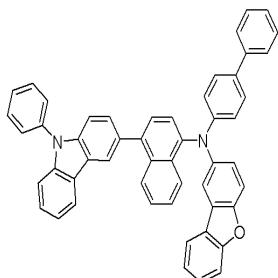
[A-230]



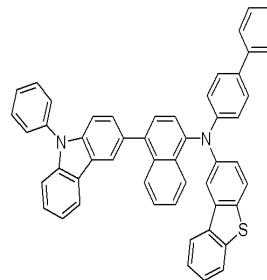
[A-231]



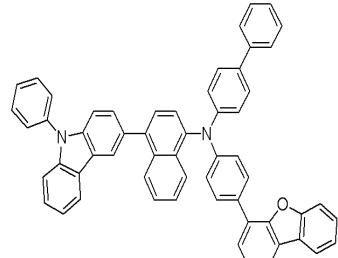
[A-232]



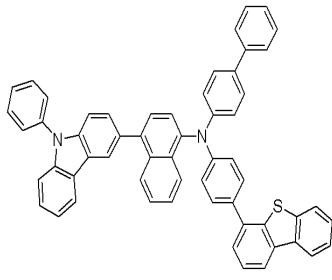
[A-233]



[A-234]

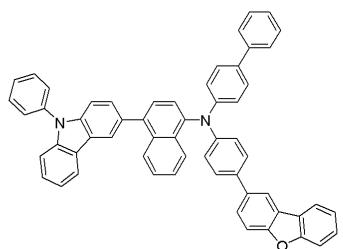


[A-235]

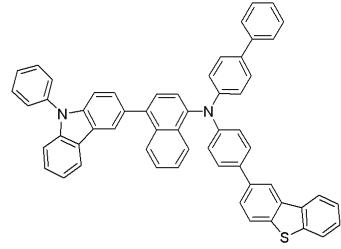


[0184]

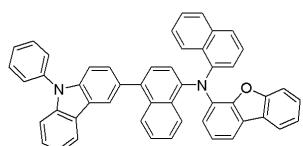
[A-236]



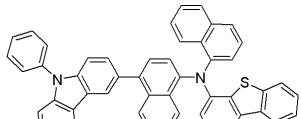
[A-237]



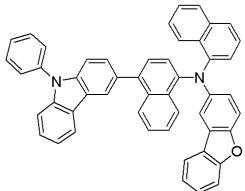
[A-238]



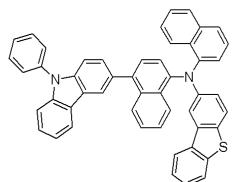
[A-239]



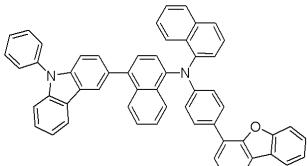
[A-240]



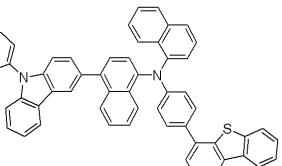
[A-241]



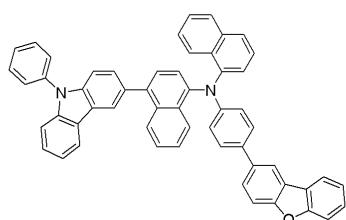
[A-242]



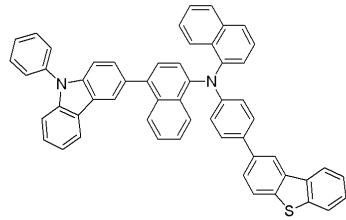
[A-243]



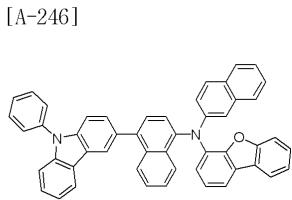
[A-244]



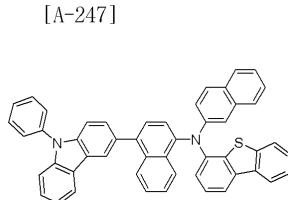
[A-245]



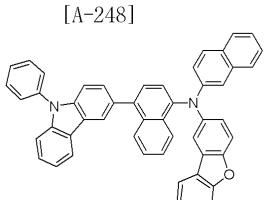
[A-246]



[A-247]

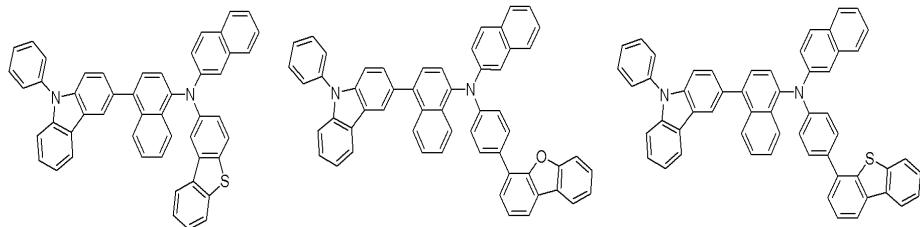


[A-248]

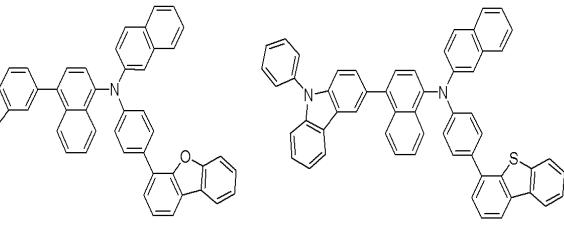


[0185]

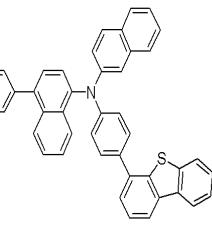
[A-249]



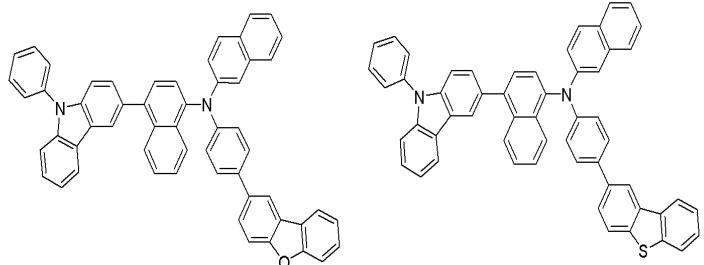
[A-250]



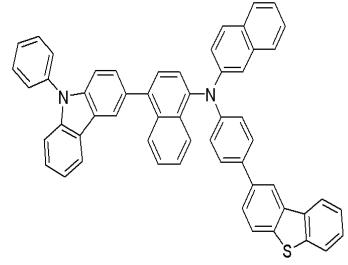
[A-251]



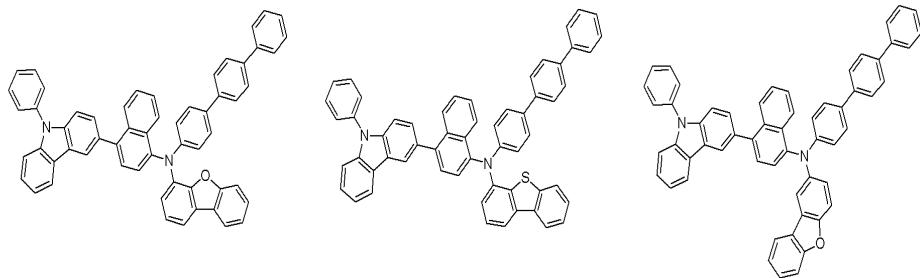
[A-252]



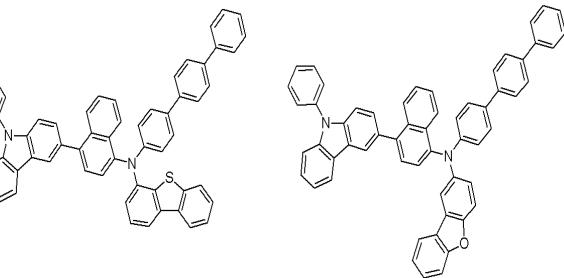
[A-253]



[A-254]

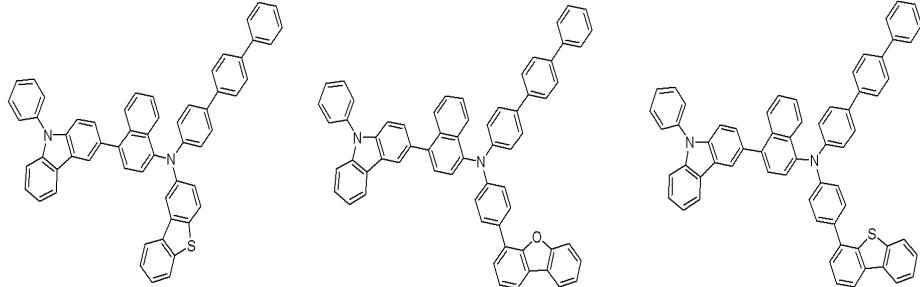


[A-255]

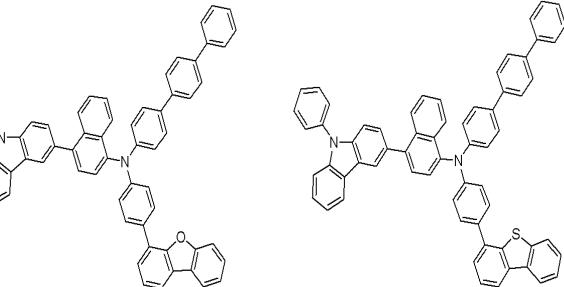


[A-256]

[A-257]



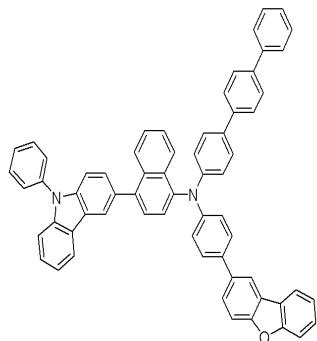
[A-258]



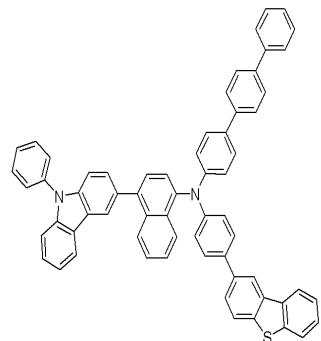
[A-259]

[0186]

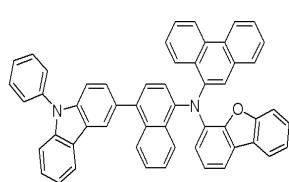
[A-260]



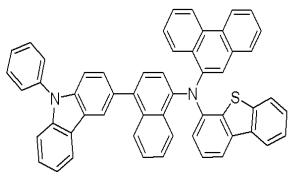
[A-261]



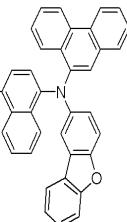
[A-262]



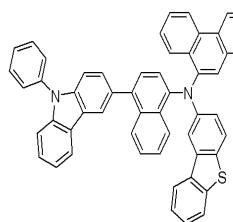
[A-263]



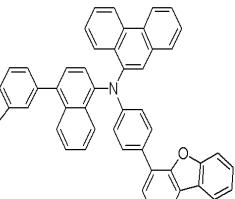
[A-264]



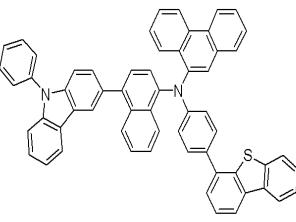
[A-265]



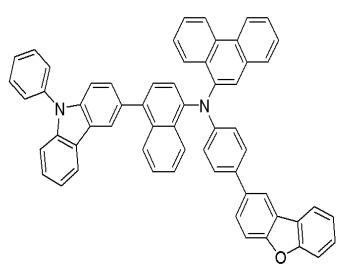
[A-266]



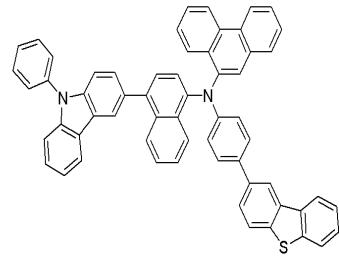
[A-267]



[A-268]

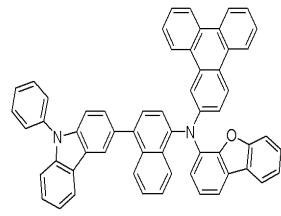


[A-269]

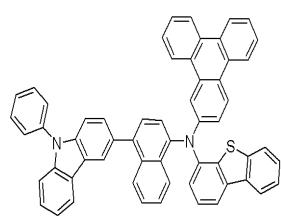


[0187]

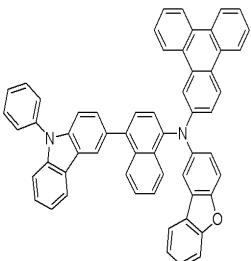
[A-270]



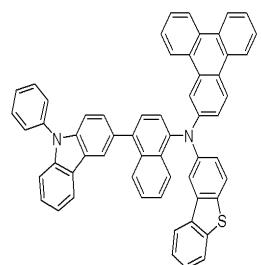
[A-271]



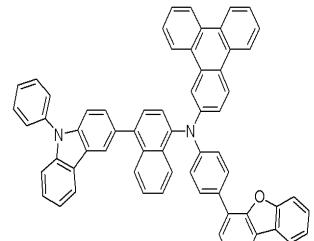
[A-272]



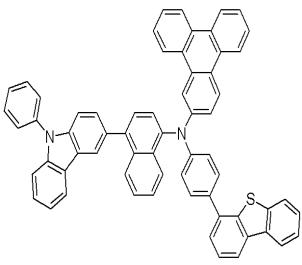
[A-273]



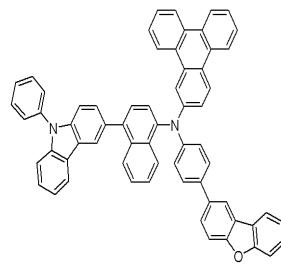
[A-274]



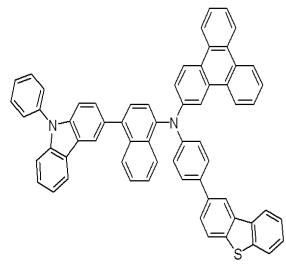
[A-275]



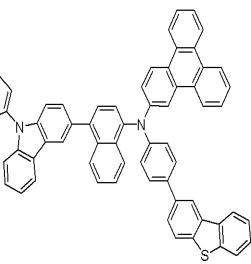
[A-276]



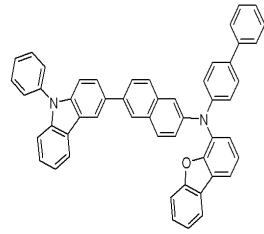
[A-277]



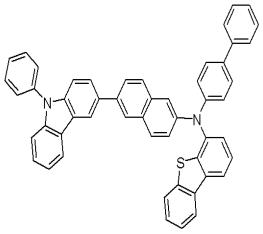
[A-278]



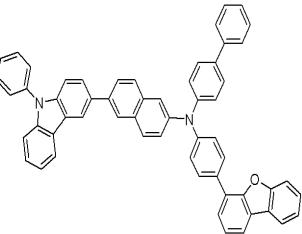
[A-279]



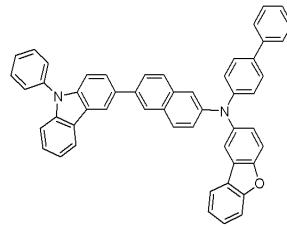
[A-280]



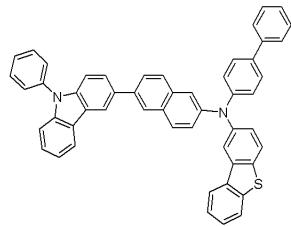
[A-281]



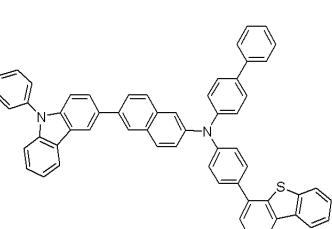
[A-282]



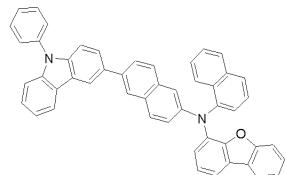
[A-283]



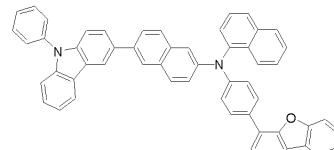
[A-284]



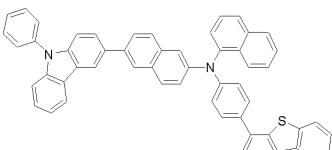
[A-285]



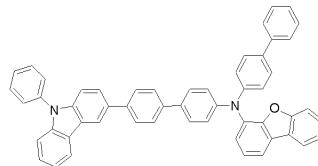
[A-286]



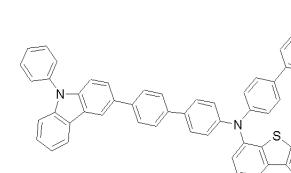
[A-287]



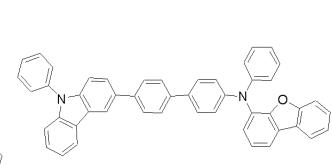
[A-288]



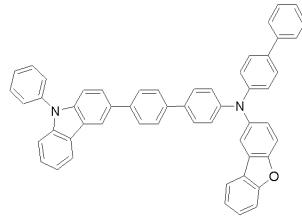
[A-289]



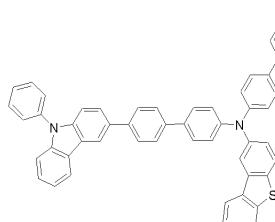
[A-290]



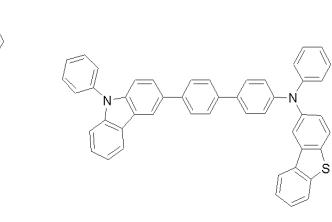
[A-291]



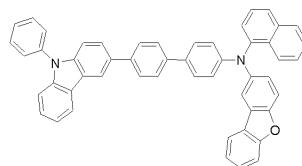
[A-292]



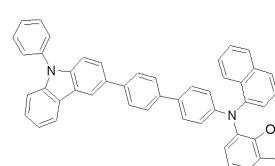
[A-293]



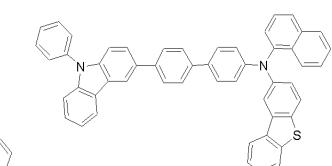
[A-294]



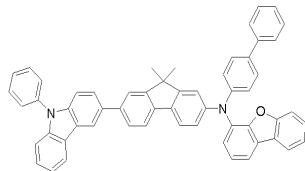
[A-295]



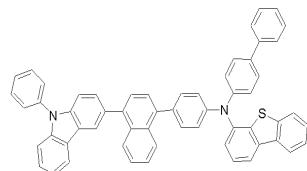
[A-296]



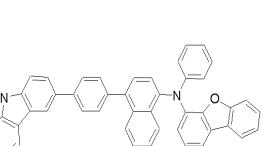
[A-297]



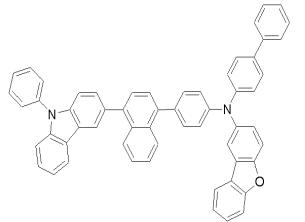
[A-298]



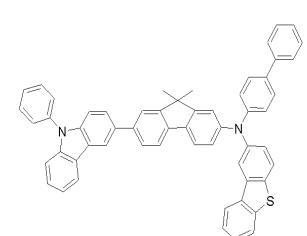
[A-299]



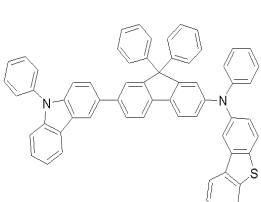
[A-300]



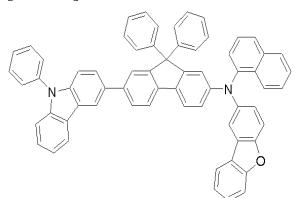
[A-301]



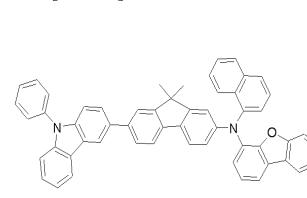
[A-302]



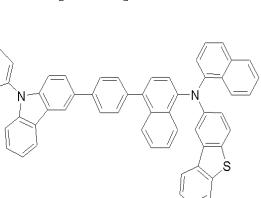
[A-303]



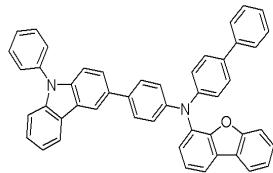
[A-304]



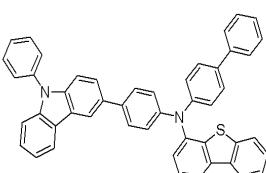
[A-305]



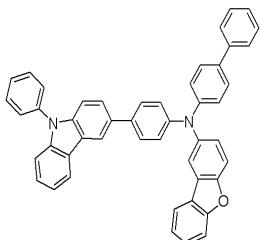
[A-414]



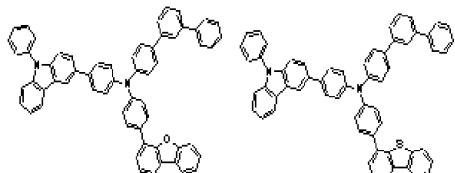
[A-415]



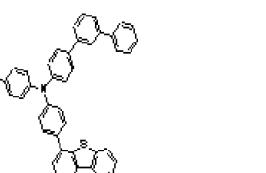
[A-416]



[A-457]

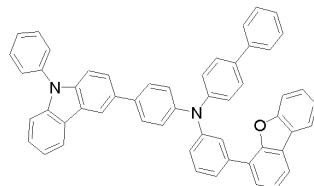


[A-458]

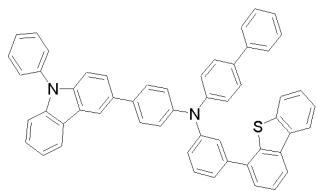


[0190]

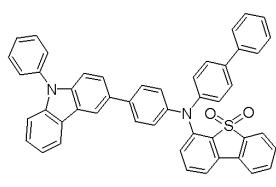
[A-469]



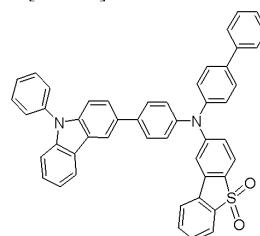
[A-470]



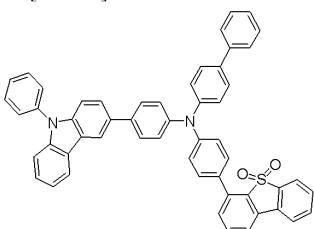
[A-471]



[A-472]



[A-473]



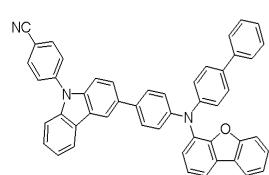
[0191]

[0192] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 A-417 내지 A-456 또는 A-459 내지 A-468 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 하기와 같은 구조는 화합물의 기본적인 특성을 유지하면서 유기광전소자용 재료로서 성능을 최적화하기 위한 전기광학적 특성, 박막 특성을 미세하게 조절할 수 있는 장점이 있다.

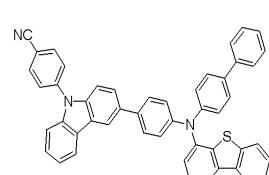
[A-417]

[A-418]

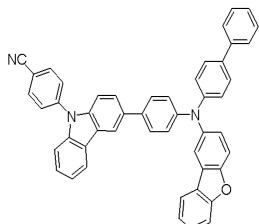
[A-419]



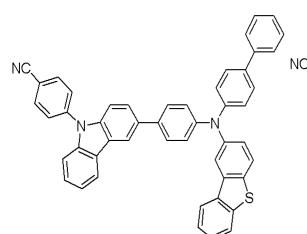
[A-420]



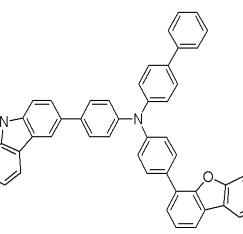
[A-421]



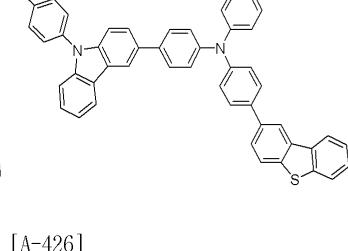
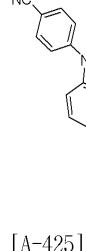
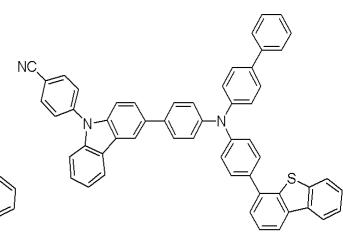
[A-422]



[A-423]



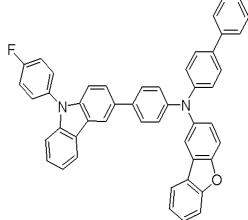
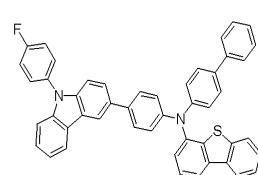
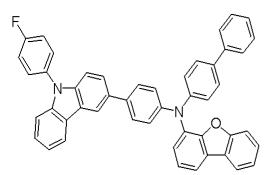
[A-424]



[A-425]

[A-426]

[A-427]

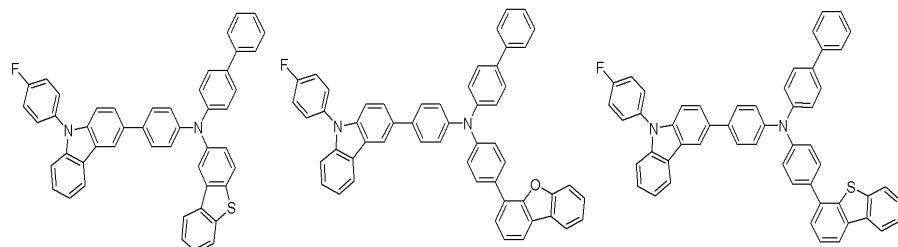


[0193]

[A-428]

[A-429]

[A-430]



[A-431]

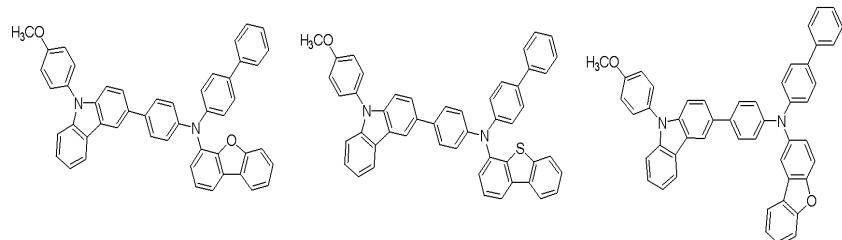
[A-432]



[A-433]

[A-434]

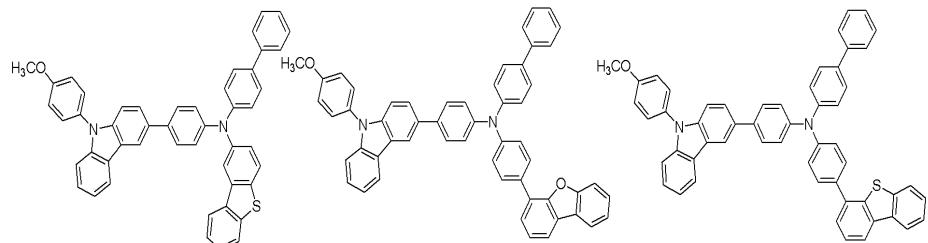
[A-435]



[A-436]

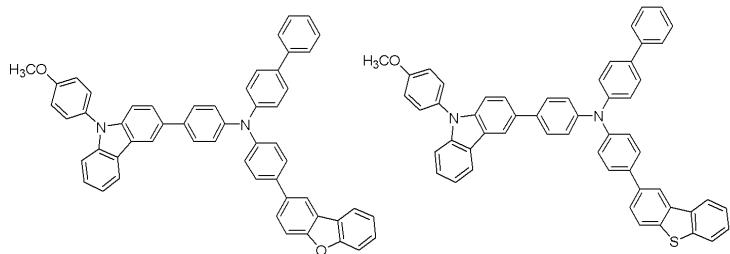
[A-437]

[A-438]



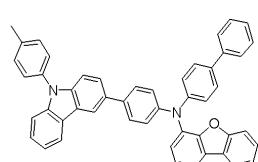
[0194]

[A-439]

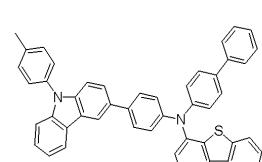


[A-440]

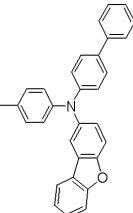
[A-441]



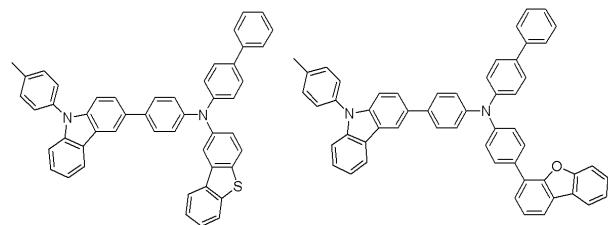
[A-442]



[A-443]



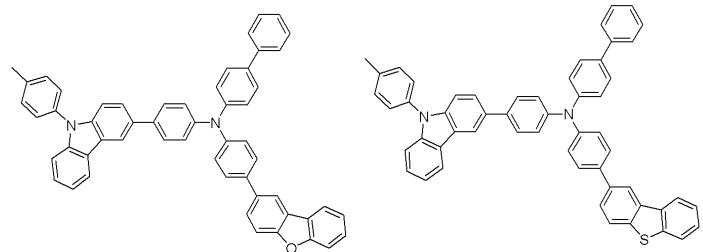
[A-444]



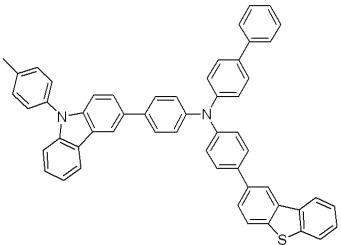
[A-445]



[A-447]

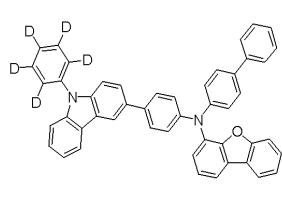


[A-448]

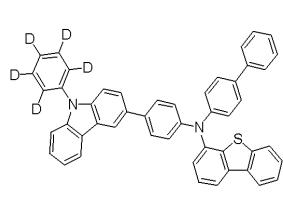


[0195]

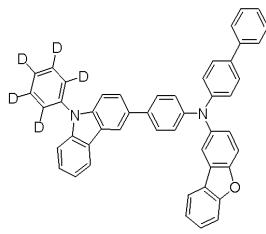
[A-449]



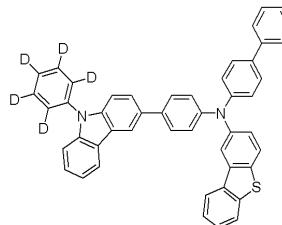
[A-450]



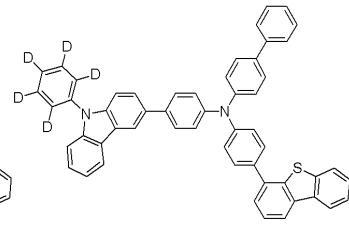
[A-451]



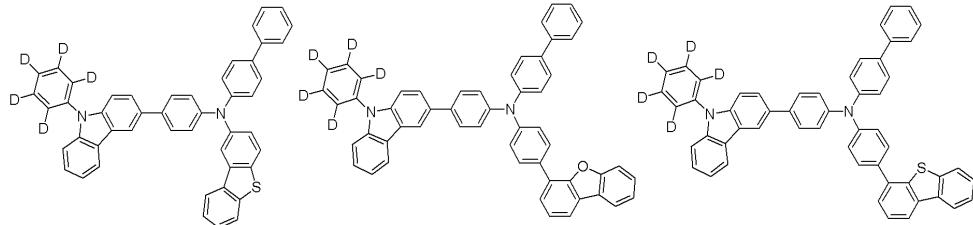
[A-452]



[A-453]

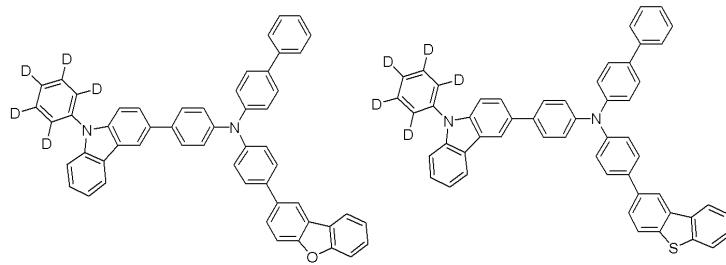


[A-454]



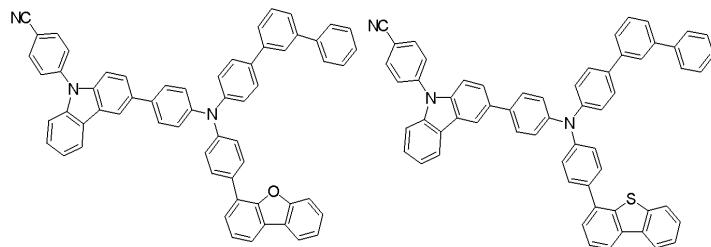
[A-455]

[A-456]



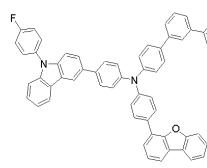
[A-459]

[A-460]

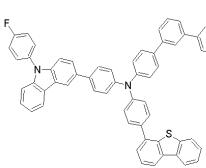


[0196]

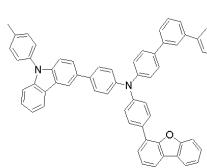
[A-461]



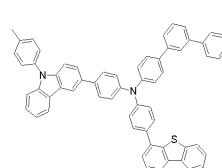
[A-462]



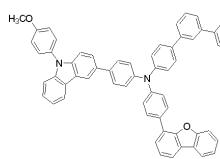
[A-463]



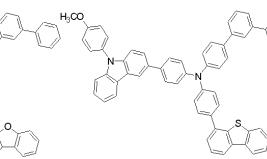
[A-464]



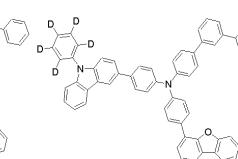
[A-465]



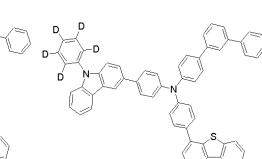
[A-466]



[A-467]



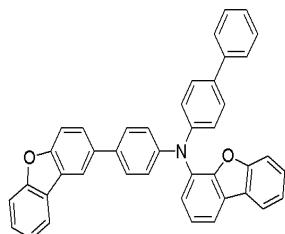
[A-468]



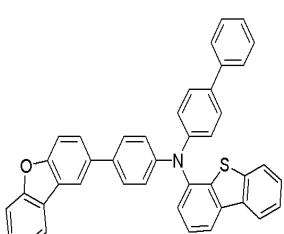
[0197]

[0198] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 A-324 내지 A-395 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 하기와 같은 구조는 정공수송성을 나타내는 디벤조퓨란과 디벤조티오펜이 3차 아릴아민 구조와 비대칭적으로 결합하여 우수한 정공 수송성과 박막 안정성을 나타내는 장점이 있다.

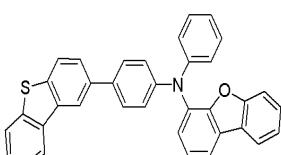
[A-324]



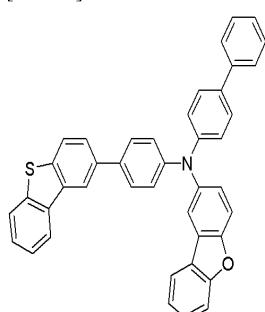
[A-325]



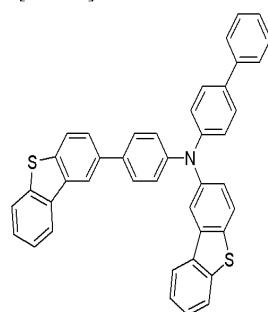
[A-326]



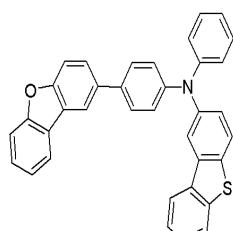
[A-327]



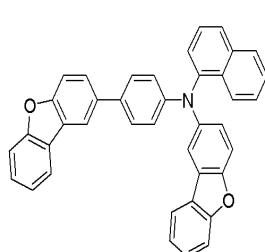
[A-328]



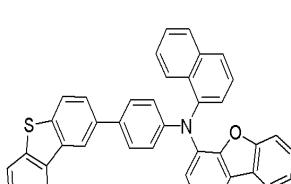
[A-329]



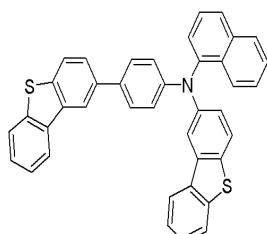
[A-330]



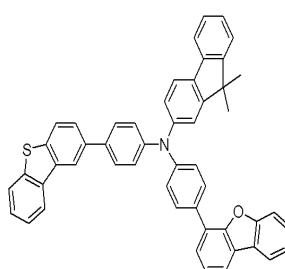
[A-331]



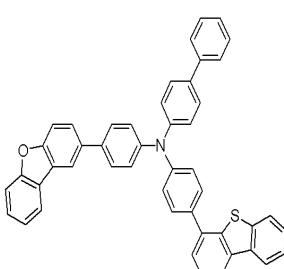
[A-332]



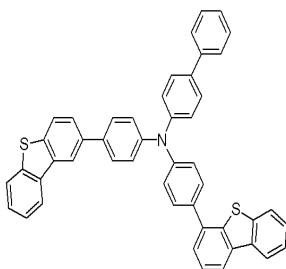
[A-333]



[A-334]

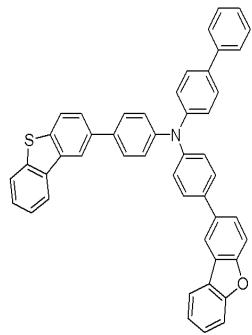


[A-335]

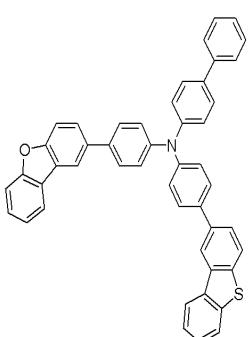


[0199]

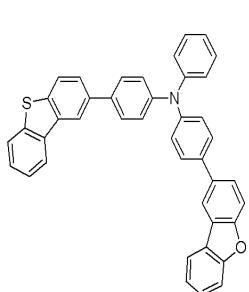
[A-336]



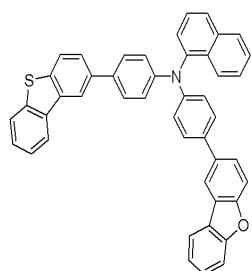
[A-337]



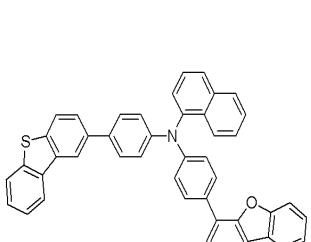
[A-338]



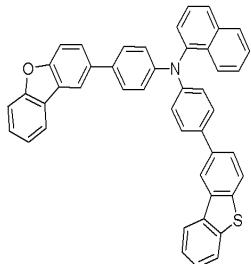
[A-339]



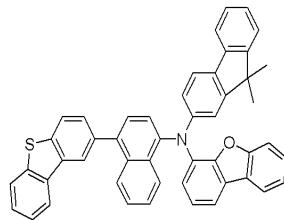
[A-340]



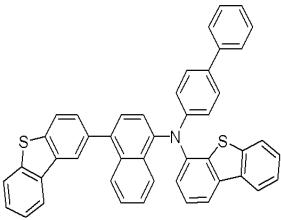
[A-341]



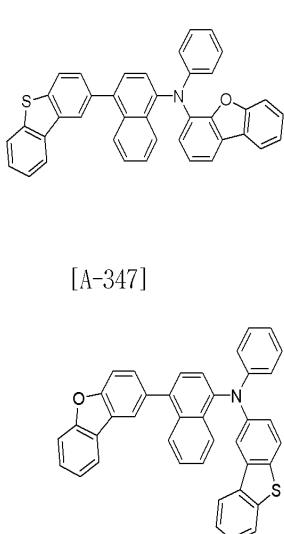
[A-342]



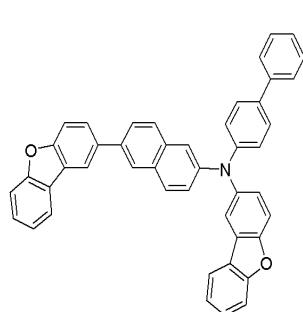
[A-343]



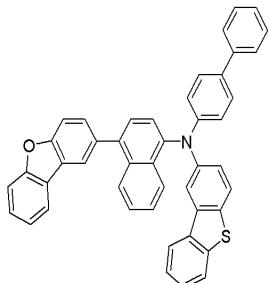
[A-344]



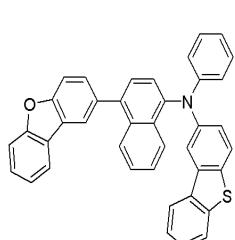
[A-345]



[A-346]

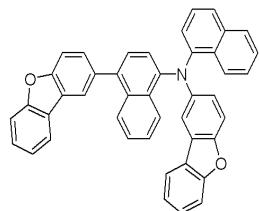


[A-347]

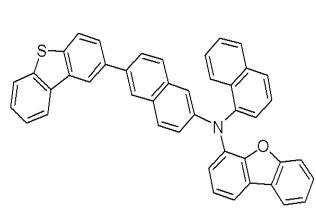


[0200]

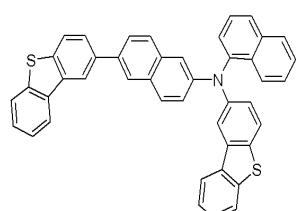
[A-348]



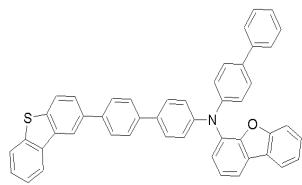
[A-349]



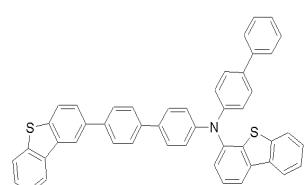
[A-350]



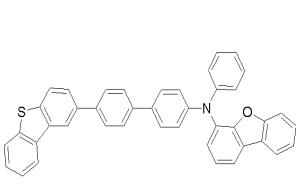
[A-351]



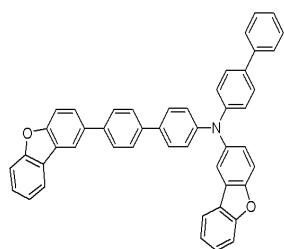
[A-352]



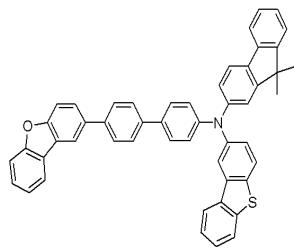
[A-353]



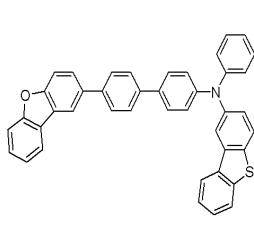
[A-354]



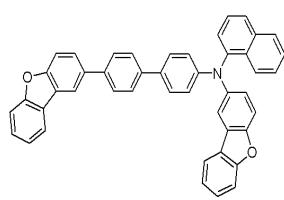
[A-355]



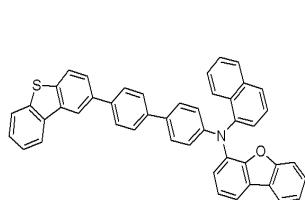
[A-356]



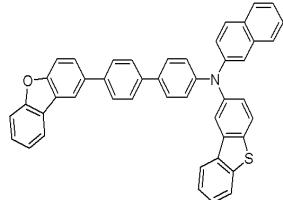
[A-357]



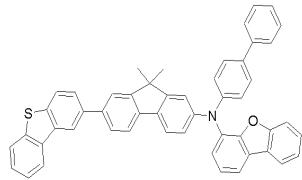
[A-358]



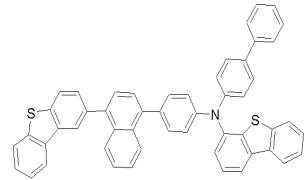
[A-359]



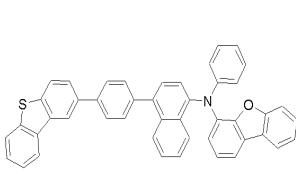
[A-360]



[A-361]

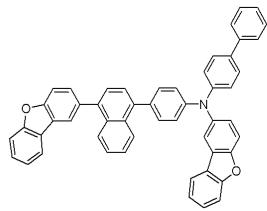


[A-362]

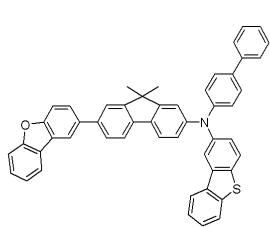


[0201]

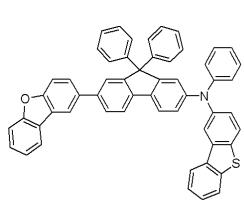
[A-363]



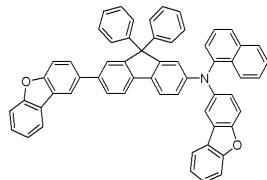
[A-364]



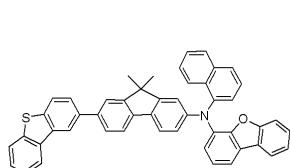
[A-365]



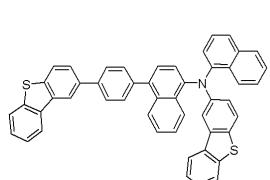
[A-366]



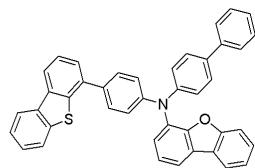
[A-367]



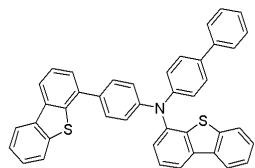
[A-368]



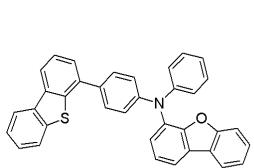
[A-369]



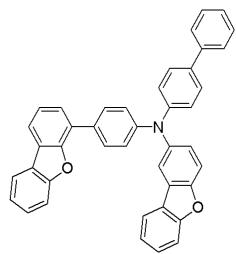
[A-370]



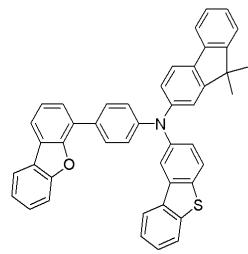
[A-371]



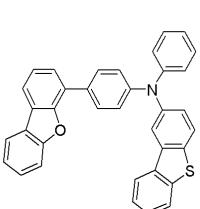
[A-372]



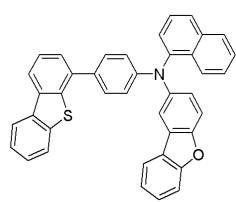
[A-373]



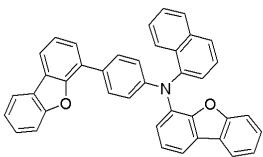
[A-374]



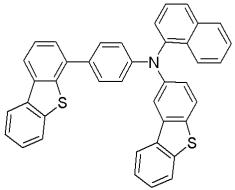
[A-375]



[A-376]

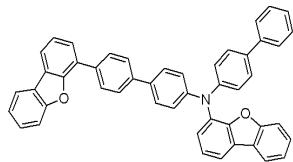


[A-377]

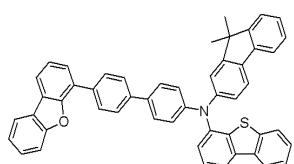


[0202]

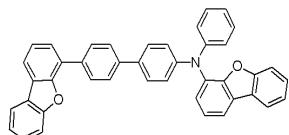
[A-378]



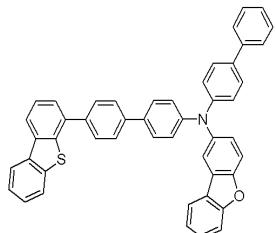
[A-379]



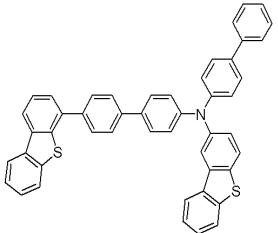
[A-380]



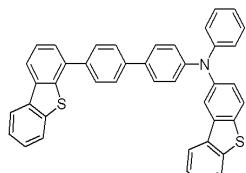
[A-381]



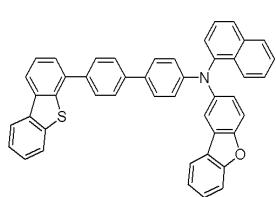
[A-382]



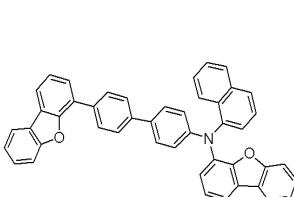
[A-383]



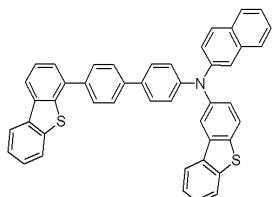
[A-384]



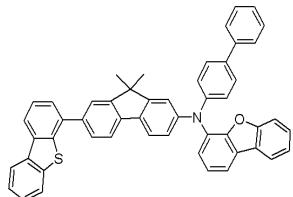
[A-385]



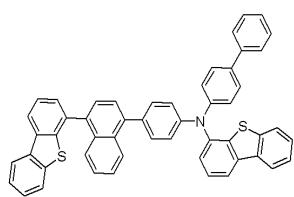
[A-386]



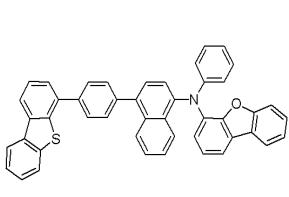
[A-387]



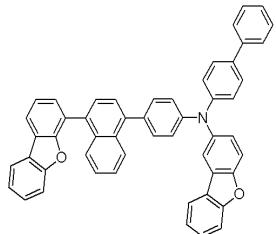
[A-388]



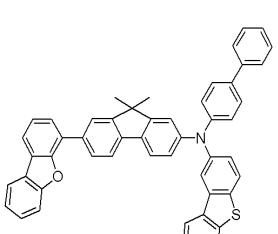
[A-389]



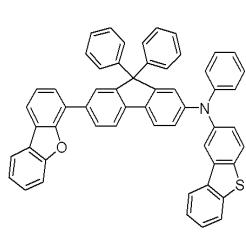
[A-390]



[A-391]

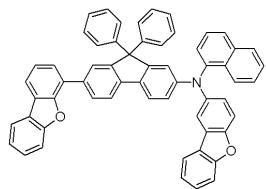


[A-392]

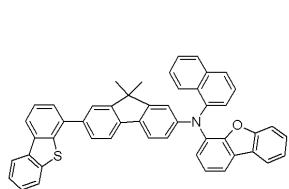


[0203]

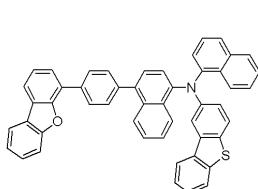
[A-393]



[A-394]



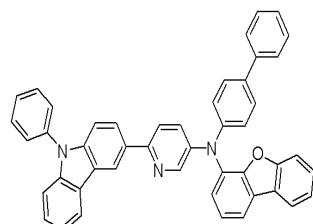
[A-395]



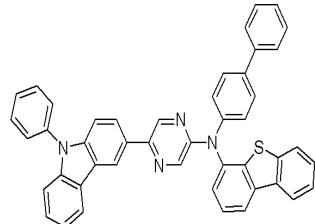
[0204]

[0205] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 A-306 내지 A-323 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 하기와 같은 구조는 정공수송성을 나타내는 디벤조퓨란 또는 디벤조티오펜이 카바졸 구조와 삼차아릴아민 형태로 비대칭적으로 결합하여 전자흡인성의 헤테로 방향족 고리를 함유하여 분자 전체적으로 비대칭적인 바이폴라 특성을 나타내어 인광호스트 재료, 정공 차단층 재료로 사용할 때 고효율을 나타낼 수 있는 장점이 있다.

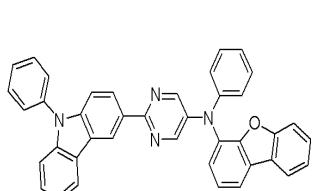
[A-306]



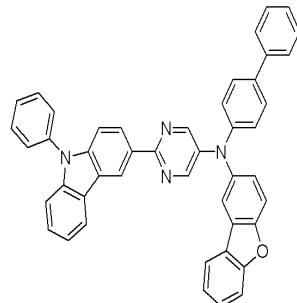
[A-307]



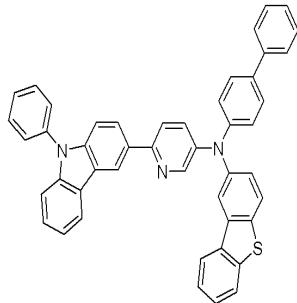
[A-308]



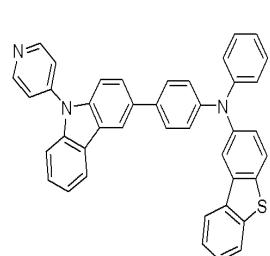
[A-309]



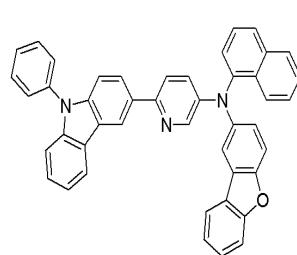
[A-310]



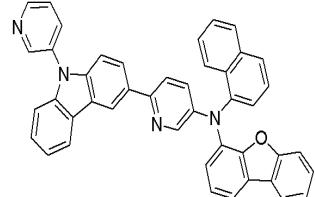
[A-311]



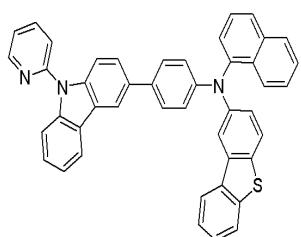
[A-312]



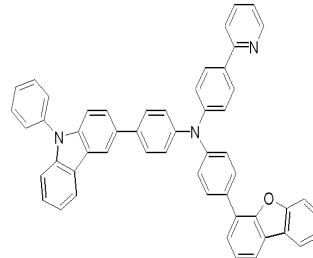
[A-313]



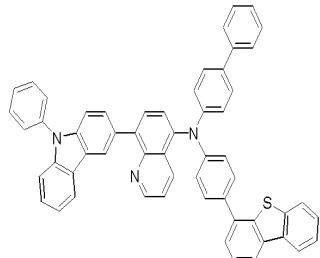
[A-314]



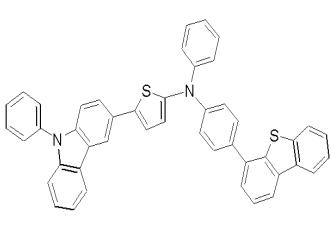
[A-315]



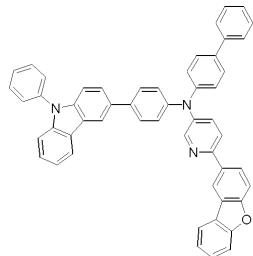
[A-316]



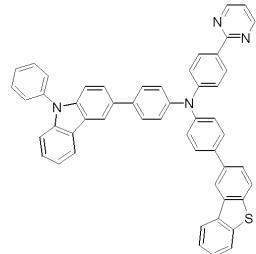
[A-317]



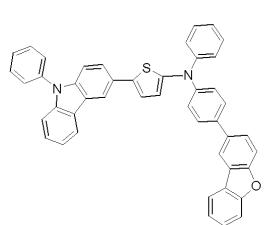
[A-318]



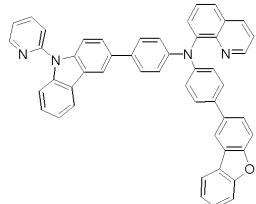
[A-319]



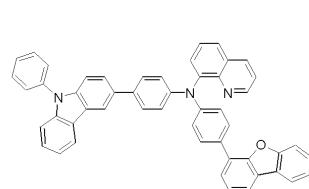
[A-320]



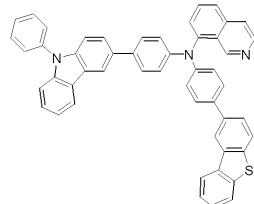
[A-321]



[A-322]



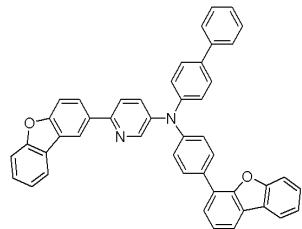
[A-323]



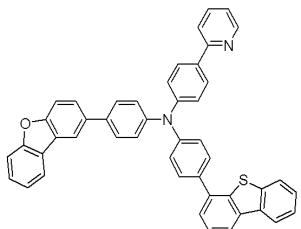
[0207]

[0208] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 A-396 내지 A-413 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 하기와 같은 구조는 정공수송성을 나타내는 디벤조퓨란 또는 디벤조티오펜이 삼차아릴아민 형태로 비대칭적으로 결합하되 전자흡인성의 헤테로 방향족 고리를 함유하여 분자 전체적으로 비대칭적인 바이풀라 특성을 나타내어 인광호스트 재료, 정공 차단층 재료로 사용할 때 고효율을 나타낼 수 있는 장점이 있다.

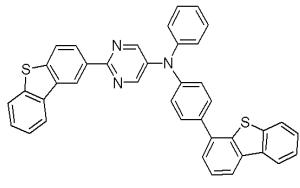
[A-396]



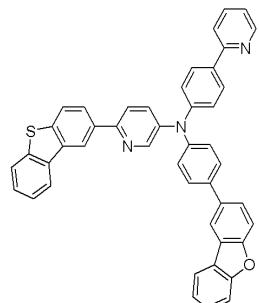
[A-397]



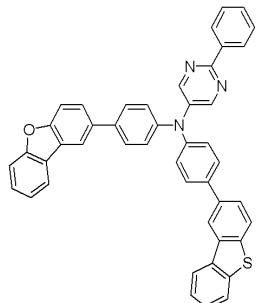
[A-398]



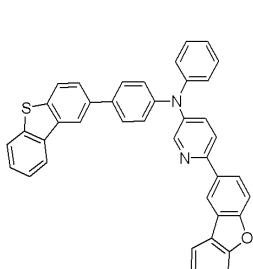
[A-399]



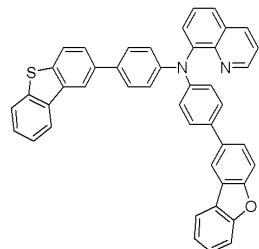
[A-400]



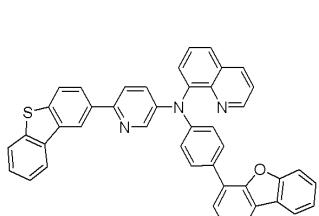
[A-401]



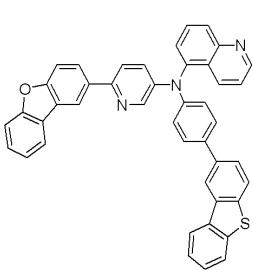
[A-402]



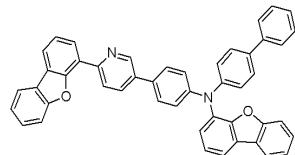
[A-403]



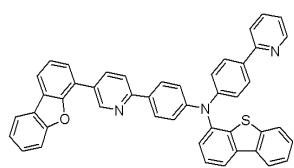
[A-404]



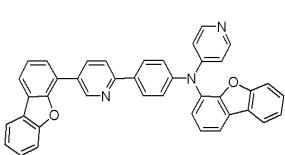
[A-405]



[A-406]

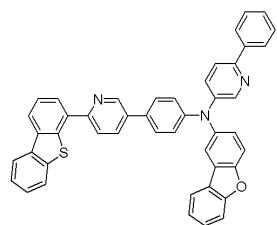


[A-407]

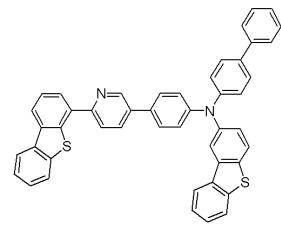


[0209]

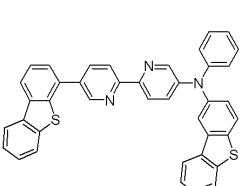
[A-408]



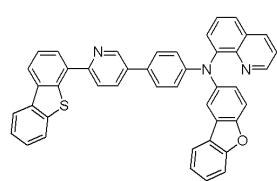
[A-409]



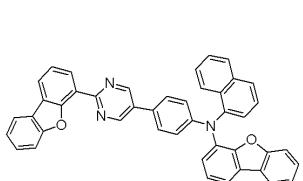
[A-410]



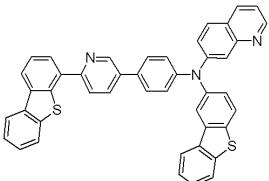
[A-411]



[A-412]



[A-413]



[0210]

[0211]

전술한 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물이 유기발광소자의 전자차단층(또는 정공수송층)에 사용되는 경우, 이 때 필요한 중요한 특성 중의 하나인 전자차단성은 분자 내의 전자 특성을 가지는 작용기에

의하여 전자차단성이 저하되는 경향이 있다. 이로 인해 전자차단층으로 사용되기 위해서는, 상기 화합물이 전자 특성을 가지는 작용기를 포함하지 않는 것이 바람직하다. 전자특성을 가지는 작용기의 일 예로는 벤조이미다졸, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 트리아진, 퀴놀린, 이소퀴놀린 등을 예시할 수 있다. 다만, 이는 전자차단층 또는 정공수송층(또는 정공주입층)으로 사용될 때에 제한되는 설명이다.

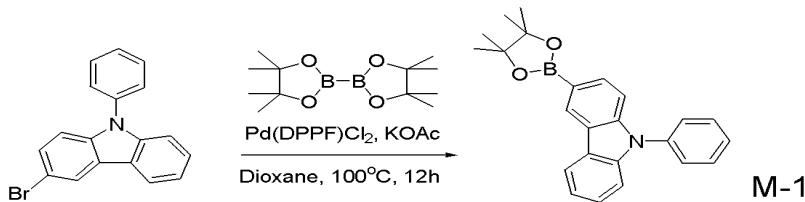
- [0212] 전술한 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물이 전자특성, 정공특성 양쪽을 모두 요구하는 경우에는 상기 전자특성을 가지는 작용기를 도입하는 것이 유기발광소자의 수명 향상 및 구동 전압 감소에 효과적이다.
- [0213] 전술한 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물은 최대 발광 파장이 약 320 nm 내지 500 nm 범위를 나타내고, 3중향 여기에너지(T1)가 2.0 eV 이상, 보다 구체적으로 2.0 내지 4.0 eV 범위인 것으로, 높은 3중향 여기 에너지를 가지는 호스트의 전하가 도판트에 잘 전달되어 도판트의 발광효율을 높일 수 있고, 재료의 호모(HOMO)와 루모(LUMO) 에너지 준위를 자유롭게 조절하여 구동전압을 낮출 수 있는 이점이 있기 때문에 호스트 재료 또는 전하수송재료로 매우 유용하게 사용될 수 있다.
- [0214] 뿐만 아니라, 상기 유기광전소자용 화합물은 광활성 및 전기적인 활성을 갖고 있으므로, 비선형 광학소재, 전극 재료, 변색재료, 광 스위치, 센서, 모듈, 웨이브 가이드, 유기 트랜지스터, 레이저, 광 흡수체, 유전체 및 분리막(membrane) 등의 재료로도 매우 유용하게 적용될 수 있다.
- [0215] 상기와 같은 화합물을 포함하는 유기광전소자용 화합물은 유리전이온도가 90°C 이상이며, 열분해온도가 400°C 이상으로 열적 안정성이 우수하다. 이로 인해 고효율의 유기광전소자의 구현이 가능하다.
- [0216] 상기와 같은 화합물을 포함하는 유기광전소자용 화합물은 발광, 또는 전자 주입 및/또는 수송역할을 할 수 있으며, 적절한 도판트와 함께 발광 호스트로서의 역할도 할 수 있다. 즉, 상기 유기광전소자용 화합물은 인광 또는 형광의 호스트 재료, 청색의 발광도편트 재료, 또는 전자수송 재료로 사용될 수 있다.
- [0217] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물은 유기박막층에 사용되어 유기광전소자의 수명 특성, 효율 특성, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성을 향상시키며, 구동전압을 낮출 수 있다.
- [0218] 이에 따라 본 발명의 일 구현예는 상기 유기광전소자용 화합물을 포함하는 유기광전소자를 제공한다. 이 때, 상기 유기광전소자라 함은 유기발광소자, 유기 태양 전지, 유기 트랜지스터, 유기 감광체 드럼, 유기 메모리 소자 등을 의미한다. 특히, 유기 태양 전지의 경우에는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물이 전극이나 전극 베퍼층에 포함되어 양자 효율을 증가시키며, 유기 트랜지스터의 경우에는 게이트, 소스-드레인 전극 등에서 전극 물질로 사용될 수 있다.
- [0219] 이하에서는 유기광전소자에 대하여 구체적으로 설명한다.
- [0220] 본 발명의 다른 일 구현예는 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 적어도 한 층 이상의 유기박막층을 포함하는 유기발광소자에 있어서, 상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물을 포함하는 유기발광소자를 제공한다.
- [0221] 상기 유기광전소자용 화합물을 포함할 수 있는 유기박막층으로는 발광층, 정공수송층, 정공주입층, 전자수송층, 전자주입층, 정공차단층 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 층을 포함할 수 있는 바, 이 중에서 적어도 어느 하나의 층은 본 발명에 따른 유기광전소자용 화합물을 포함한다. 특히, 정공수송층 또는 정공주입층에 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물을 포함할 수 있다. 또한, 상기 유기광전소자용 화합물이 발광층 내에 포함되는 경우 상기 유기광전소자용 화합물은 인광 또는 형광호스트로서 포함될 수 있고, 특히, 형광 청색 도편트 재료로서 포함될 수 있다.
- [0222] 도 1 내지 도 5는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물을 포함하는 유기발광소자의 단면도이다.
- [0223] 도 1 내지 도 5를 참조하면, 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자(100, 200, 300, 400 및 500)는 양극(120), 음극(110) 및 이 양극과 음극 사이에 개재된 적어도 1층의 유기박막층(105)을 포함하는 구조를 갖는다.
- [0224] 상기 양극(120)은 양극 물질을 포함하며, 이 양극 물질로는 통상 유기박막층으로 정공주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 상기 양극 물질의 구체적인 예로는 니켈, 백금, 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금을 들 수 있고, 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물을 들 수 있고, ZnO와 Al 또는 SnO₂와 Sb와 같은 금속과 산화물의 조합을 들 수 있고, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](polyethylenedioxythiophene: PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 바람직하게는 상기 양극

으로 ITO(indium tin oxide)를 포함하는 투명전극을 사용할 수 있다.

- [0225] 상기 음극(110)은 음극 물질을 포함하여, 이 음극 물질로는 통상 유기박막층으로 전자주입이 용이하도록 일 함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 납, 세슘, 바륨 등과 같은 금속 또는 이들의 합금을 들 수 있고, LiF/Al, LiO₂/Al, LiF/Ca, LiF/Al 및 BaF₂/Ca과 같은 다층 구조 물질 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 바람직하게는 상기 음극으로 알루미늄 등과 같은 금속전극을 사용할 수 있다.
- [0226] 먼저 도 1을 참조하면, 도 1은 유기박막층(105)으로서 발광층(130)만이 존재하는 유기광전소자(100)를 나타낸 것으로, 상기 유기박막층(105)은 발광층(130)만으로 존재할 수 있다.
- [0227] 도 2를 참조하면, 도 2는 유기박막층(105)으로서 전자수송층을 포함하는 발광층(230)과 정공수송층(140)이 존재하는 2층형 유기광전소자(200)를 나타낸 것으로, 도 2에 나타난 바와 같이, 유기박막층(105)은 발광층(230) 및 정공 수송층(140)을 포함하는 2층형일 수 있다. 이 경우 발광층(130)은 전자 수송층의 기능을 하며, 정공 수송층(140)은 ITO와 같은 투명전극과의 접합성 및 정공수송성을 향상시키는 기능을 한다.
- [0228] 도 3을 참조하면, 도 3은 유기박막층(105)으로서 전자수송층(150), 발광층(130) 및 정공수송층(140)이 존재하는 3층형 유기광전소자(300)로서, 상기 유기박막층(105)에서 발광층(130)은 독립된 형태로 되어 있고, 전자수송성이나 정공수송성이 우수한 막(전자수송층(150) 및 정공수송층(140))을 별도의 층으로 쌓은 형태를 나타내고 있다.
- [0229] 도 4를 참조하면, 도 4는 유기박막층(105)으로서 전자주입층(160), 발광층(130), 정공수송층(140) 및 정공주입층(170)이 존재하는 4층형 유기광전소자(400)로서, 상기 정공주입층(170)은 양극으로 사용되는 ITO와의 접합성을 향상시킬 수 있다.
- [0230] 도 5를 참조하면, 도 5는 유기박막층(105)으로서 전자주입층(160), 전자수송층(150), 발광층(130), 정공수송층(140) 및 정공주입층(170)과 같은 각기 다른 기능을 하는 5개의 층이 존재하는 5층형 유기광전소자(500)를 나타내고 있으며, 상기 유기광전소자(500)는 전자주입층(160)을 별도로 형성하여 저전압화에 효과적이다.
- [0231] 상기 도 1 내지 도 5에서 상기 유기박막층(105)을 이루는 전자 수송층(150), 전자 주입층(160), 발광층(130, 230), 정공 수송층(140), 정공 주입층(170) 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나는 상기 유기광전소자용 화합물을 포함한다. 이 때 상기 유기광전소자용 화합물은 상기 전자 수송층(150) 또는 전자주입층(160)을 포함하는 전자수송층(150)에 사용될 수 있으며, 그중에서도 전자수송층에 포함될 경우 정공 차단층(도시하지 않음)을 별도로 형성할 필요가 없어 보다 단순화된 구조의 유기광전소자를 제공할 수 있어 바람직하다.
- [0232] 또한, 상기 유기 광전 소자용 화합물이 발광층(130, 230) 내에 포함되는 경우 상기 유기 광전 소자용 화합물은 인광 또는 형광호스트로서 포함될 수 있으며, 또는 형광 청색 도편트로서 포함될 수 있다.
- [0233] 상기에서 설명한 유기발광소자는, 기판에 양극을 형성한 후, 진공증착법(evaporation), 스퍼터링(sputtering), 플라즈마 도금 및 이온도금과 같은 건식성막법; 또는 스팬코팅(spin coating), 침지법(dipping), 유동코팅법(flow coating)과 같은 습식성막법 등으로 유기박막층을 형성한 후, 그 위에 음극을 형성하여 제조할 수 있다.
- [0234] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 유기광전소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.
- [0235] 이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.
- [0236] (유기광전소자용 화합물의 제조)
- [0237] 중간체의 합성

[0238] 중간체 M-1의 합성

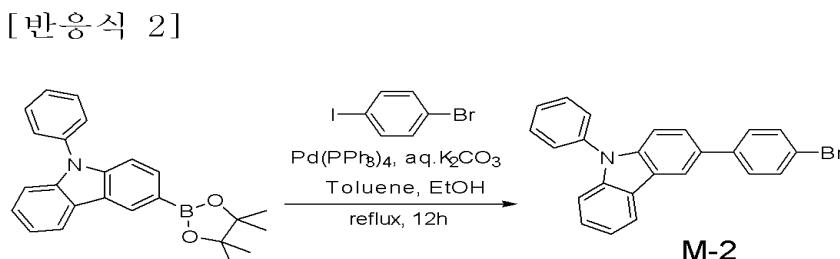
[반응식 1]



[0239]

[0240] 3-브로모-9-페닐-9H-카바졸 50g(155.18mmol)과 Pd(dppf)Cl₂ 3.41g (4.65mmol), 비스(피나콜라토)디보론(Bis(pinacolato)diboron) 51.32g (201.8mmol) 및 포타슘아세테이트 45.8g(465.5mmol)을 1,4-다이옥산(dioxane) 520ml에 용해 시켰다. 반응물을 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 한 후 디클로로메탄과 증류수로 3회 추출 하였다. 추출액을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-1을 흰색 고체로 43g (수율 75%) 을 수득 하였다.

[0241] LC-Mass (이론치: 369.19g/mol, 측정치: M+1 = 370g/mol)

[0242] 중간체 M-2의 합성

[0243]

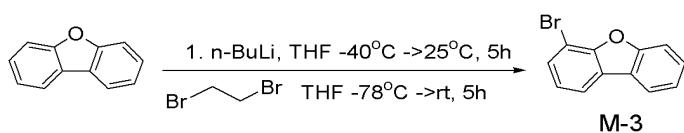
[0244] 중간체 M-1 40g(108.3mmol), 1-브로모-4-아이오도벤젠 30.6g(108.3mmol) 및 테트라카스트리페닐포스핀팔라듐 1.25g(1.08mmol)을 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 툴루엔 270ml와 에탄올 135mL에 용해 시켰다.

[0245] 이후 포타슘 카보네이트 31.9g(58.9mmol)을 녹인 수용액 135ml를 첨가 시킨 후 12시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 후 추출액을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-2을 흰색 고체로 35g (수율 81%)을 수득 하였다.

[0246] LC-Mass (이론치: 398.29g/mol, 측정치: M+1 = 399g/mol, M+3 = 401g/mol)

[0247] 중간체 M-3의 합성

[반응식 3]



[0249]

[0250] 진공 하에서 가열 건조한 2구 등근 바닥 플라스크에 질소 분위기 하에서 디벤조퓨라닐기 10g(59.5mmol)을 넣고 무수 테트라하이드로퓨란 119mL를 가하여 용해시킨 후 -40°C로 냉각 및 교반하였다.

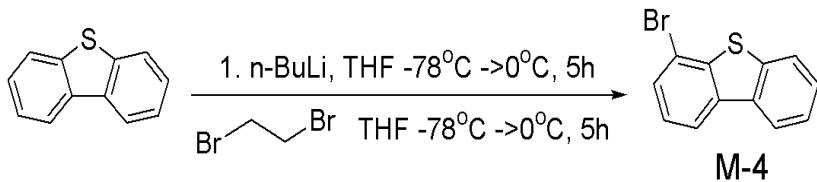
[0251] 여기에 2.5M n-부틸리튬 26mL(헥산 내, 65.5mmol)을 천천히 가한 후 상온 및 질소 분위기 하에 5시간 교반하였다. 반응액을 -78°C로 냉각한 후 여기에 무수 테트라하이드로퓨란 10mL에 녹인 1,2-디브로모에탄 22.4g(119mmol)을 천천히 가한 후 상온에서 5시간 교반하였다.

[0252] 반응 종료 후 용액을 감압 농축하여 용매를 제거한 후 중류수와 디클로로메탄으로 추출 후 추출액을 마그네슘 설피아이트로 건조 및 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 반응액을 n-헥산으로 재결정하여 목적화합물인 중간체 M-3을 흰색고체로 11g(수율 75%)을 수득하였다.

[0253] GC-Mass (이론치: 245.97g/mol, 측정치: M = 246g/mol, M+2 = 248g/mol)

[0254] 중간체 M-4의 합성

[0255] [반응식 4]



[0256]

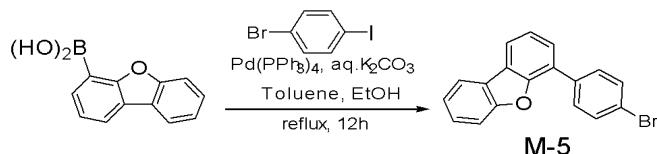
[0257] 진공 하에서 가열 건조한 2구 등근 바닥 플라스크에 질소 분위기 하에서 디벤코티오펜 10g(54.3mmol)을 넣고 무수 테트라하이드로퓨란 120mL를 가하여 용해시킨 후 -40°C로 냉각 및 교반하였다.

[0258] 여기에 2.5M n-부틸리튬 24mL(헥산 내, 59.7mmol)을 천천히 가한 후 상온에서 질소 분위기 하에 5시간 교반하였다. 반응액을 -78°C로 냉각한 후 여기에 무수 테트라하이드로퓨란 10mL에 녹인 1,2-디브로모에탄 20.4g(108.6mmol)을 천천히 가한 후 상온에서 5시간 교반하였다. 반응 종료 후 용액을 감압 농축하여 용매를 제거한 후 중류수와 디클로로메탄으로 추출 후 추출액을 마그네슘 설피아이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 반응액을 n-헥산으로 재결정하여 목적화합물인 중간체 M-4을 흰색고체로 11g(수율 77%)을 수득하였다.

[0259] GC-Mass (이론치: 261.95g/mol, 측정치: M = 262g/mol, M+2 = 264g/mol)

[0260] 중간체 M-5의 합성

[반응식 5]



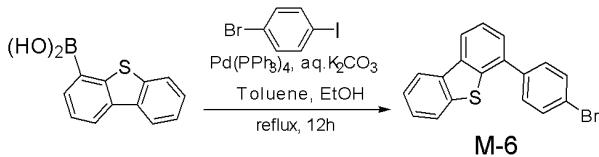
[0261]

[0262] 4-디벤조퓨라닐기보론산(4-dibenzofuranboronic acid) 20g(94.4mmol), 1-브로모-4-아이오도벤젠 28g(99.2mmol) 및 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 1.08g(0.94mmol)을 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 톨루엔 240mL와 에탄올 120mL에 용해 시킨 후 포타슘카보네이트 28g(188.8mmol)을 녹인 수용액 120mL를 첨가 시킨 후 12시간 동안 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 후 추출액을 마그네슘 설피아이트로 건조 및 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적화합물인 중간체 M-5을 흰색 고체로 27g(수율 89%)을 수득 하였다.

[0263] LC-Mass (이론치: 322.00g/mol, 측정치: M+1 = 323g/mol, M+3 = 325g/mol)

[0264] 중간체 M-6의 합성

[반응식 6]



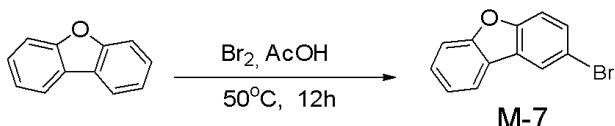
[0265]

[0266] 4-디벤코티오펜보론산(4-dibenzothiopheneboronic acid) 20g(87.69mmol), 1-브로모-4-아이오도벤젠 27.3g(96.46mmol) 및 테트라카스트리페닐포스핀팔라듐 1.01g(0.88mmol)을 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 툴루엔 220mL와 에탄올 110mL에 용해 시킨 후 포타슘카보네이트 25.8g(175.4mmol)을 녹인 수용액 110mL를 첨가 시킨 후 12시간 동안 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 후 추출액을 마그네슘설파이트로 건조 및 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1 부피비)으로 실리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-6을 흰색 고체로 25g(수율 83%) 을 수득 하였다.

[0267] LC-Mass (이론치: 337.98g/mol, 측정치: M+1 = 338g/mol, M+3 = 340g/mol)

[0268] 중간체 M-7의 합성

[반응식 7]



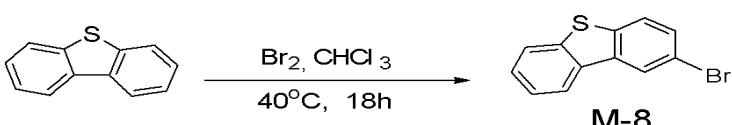
[0270]

[0271] 등근 바닥 플라스크에 디벤조퓨라닐기 30g (178.4mmol)을 넣고 아세트산 270g에 녹인 후 50°C에서 아세트산 6g에 녹인 브롬 29g (181.5mmol)을 4시간 동안 천천히 가하였다. 반응액을 50°C에서 8시간 동안 추가로 교반한 후 냉각하고 중류수에 반응물을 가한다. 오렌지색 고체를 디클로로메탄에 녹인 후 소디움티오설파이트 수용액으로 세척 하고 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 디클로로메탄/n-헥산으로 재결정하여 목적화합물인 중간체 M-7을 흰색 고체로 10.1g (수율 23%)을 수득하였다.

[0272] GC-Mass (이론치: 245.97g/mol, 측정치: M = 246g/mol, M+2 = 248g/mol)

[0273] 중간체 M-8의 합성

[반응식 8]



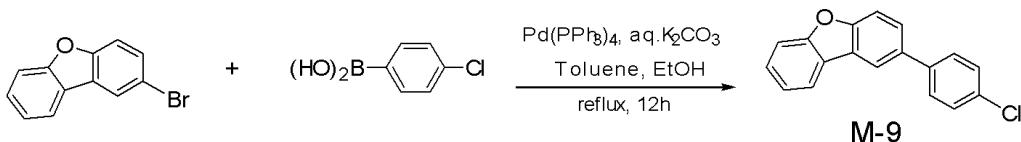
[0275]

[0276] 등근 바닥 플라스크에 디벤조티오페닐기 30g(162.8mmol)을 넣고 클로로포름 2L에 녹인 후 상온에서 브롬 27.3g(170.9mmol)을 6시간 동안 천천히 가하였다. 반응액을 40°C에서 12시간 동안 추가로 교반한 후 냉각하고 소디움티오설파이트 수용액을 가하여 추출한다. 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 에틸아세테이트/n-헥산으로 재결정하여 목적화합물인 중간체 M-8을 흰색 고체로 15.4g(수율 36%)을 수득하였다.

[0277] GC-Mass (이론치): 261.95g/mol, 측정치: M = 262g/mol, M+2 = 264g/mol)

[0278] 중간체 M-9의 합성

[0279] [반응식 9]



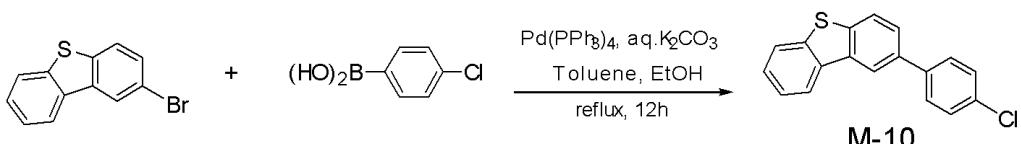
[0280]

[0281] 4-클로로페닐보론산 20g(127.9mmol), 중간체 M-7 30.0g(121.5mmol) 및 테트라카스트리페닐포스핀팔라듐 1.48g(1.28mmol)을 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 톨루엔 320mL와 에탄올 160mL에 용해 시킨 후 포타슘카보네이트 37.7g (255.8mmol)을 녹인 수용액 160mL를 첨가 시킨 후 12시간 동안 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 한 후 추출액을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1 부피비)으로 실리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-9을 흰색 고체로 28.1g(수율 83%) 을 수득 하였다.

[0282] LC-Mass (이론치: 278.05g/mol, 측정치: M+1 = 279g/mol)

[0283] 중간체 M-10의 합성

[0284] [반응식 10]



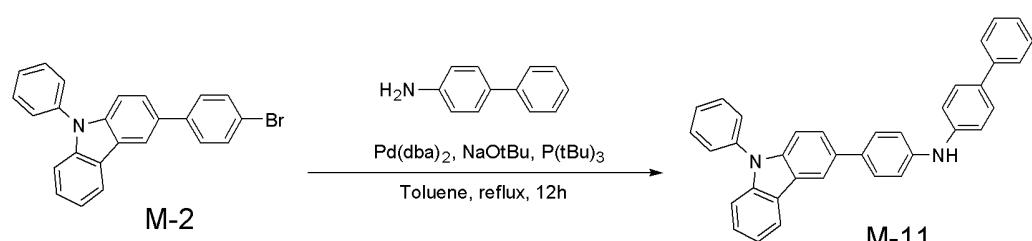
[0285]

[0286] 4-클로로페닐보론산 20g(127.9mmol), 중간체 M-8 32.0g(121.5mmol) 및 테트라카스트리페닐포스핀팔라듐 1.48g(1.28mmol)을 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 톨루엔 320mL와 에탄올 160mL에 용해 시킨 후 포타슘카보네이트 37.7g(255.8mmol)을 녹인 수용액 160mL를 첨가 시킨 후 12시간 동안 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 한 후 추출액을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1 부피비)으로 실리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-10을 흰색 고체로 30.4g (수율 85%) 을 수득 하였다.

[0287] LC-Mass (이론치: 294.03 g/mol, 측정치: M+1 = 295 g/mol)

[0288] 중간체 M-11의 합성

[0289] [반응식 11]



[0290]

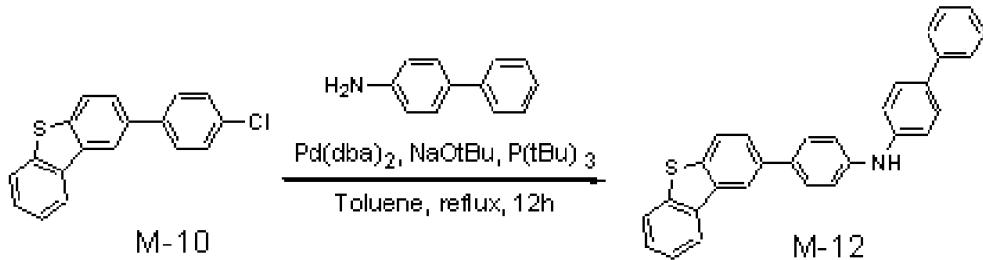
[0291] 중간체 M-2 30g(75.3mmol)과 4-아미노바이페닐 14.0g(82.83mmol), 소디움 t-부톡사이드 10.9g(113.0mmol) 및

트리-테트라-부틸포스핀 0.46g(2.26mmol)을 틀루엔 750ml에 용해 시키고, $\text{Pd}(\text{dba})_2$ 0.43g(0.753mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n -헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-11을 흰색 고체로 27.5 g(수율 75%)을 수득 하였다.

[0292] LC-Mass (이론치: 486.21g/mol, 측정치: $M+1 = 487\text{g/mol}$)

[0293] 중간체 M-12의 합성

[0294] [반응식 12]



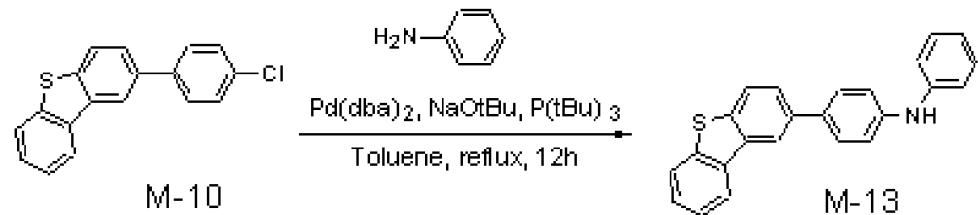
[0295]

[0296] 중간체 M-10 5g(17.0mmol)과 4-아미노바이페닐 3.02g(17.85mmol), 소디움 t -부톡사이드 2.45g(25.5mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.10g(0.51mmol)을 틀루엔 170 ml에 용해 시키고, $\text{Pd}(\text{dba})_2$ 0.098g(0.17mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n -헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-12을 흰색 고체로 5.23g(수율 72%)을 수득 하였다.

[0297] LC-Mass (이론치: 427.14g/mol, 측정치: $M+1 = 428\text{g/mol}$)

[0298] 중간체 M-13의 합성

[0299] [반응식 13]



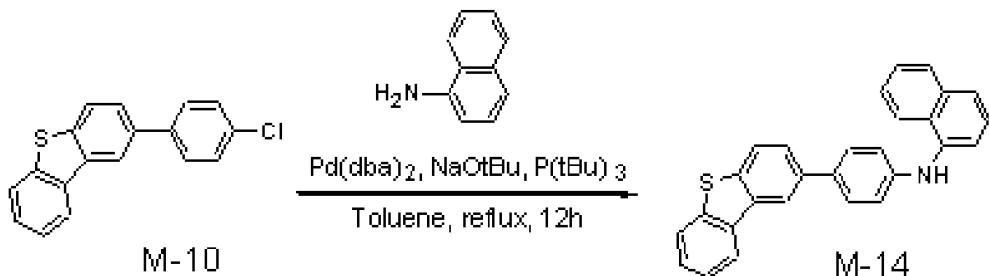
[0300]

[0301] 중간체 M-10 5g(17.0mmol)과 아닐린 1.66g(17.85mmol), 소디움 t -부톡사이드 2.45g(25.5mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.10g(0.51mmol)을 틀루엔 170ml에 용해 시키고, $\text{Pd}(\text{dba})_2$ 0.098g(0.17mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n -헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-13을 흰색 고체로 4.66g(수율 78%)을 수득 하였다.

[0302] LC-Mass (이론치: 351.11g/mol, 측정치: M+1 = 352g/mol)

[0303] 중간체 M-14의 합성

[0304] [반응식 14]



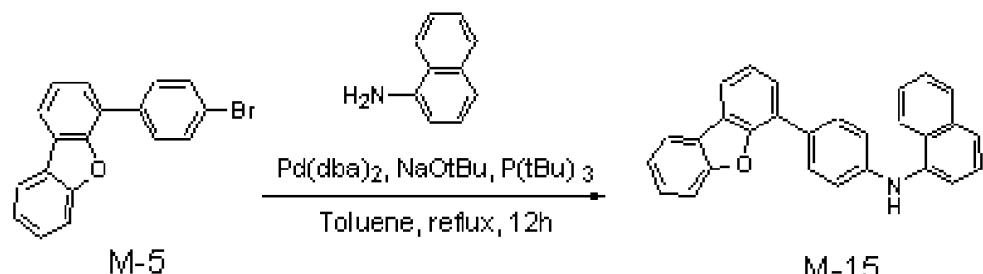
[0305]

[0306] 중간체 M-10 5g(17.0mmol)과 1-아미노나프탈렌 2.56g(17.85mmol), 소디움 t-부톡사이드 2.45g(25.5mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.10g(0.51mmol)을 톨루엔 170ml에 용해 시키고, Pd(dba)₂ 0.098g(0.17mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-14을 흰색 고체로 4.98g(수율 73%)을 수득하였다.

[0307] LC-Mass (이론치: 401.12g/mol, 측정치: M+1 = 402g/mol)

[0308] 중간체 M-15의 합성

[0309] [반응식 15]



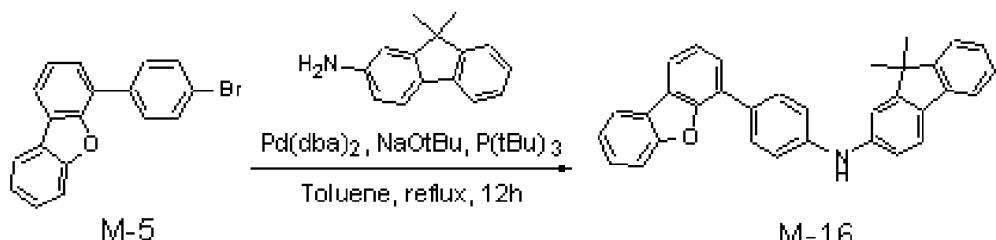
[0310]

[0311] 중간체 M-5 5.49g(17.0mmol)과 1-아미노나프탈렌 2.56g(17.85mmol), 소디움 t-부톡사이드 2.45g(25.5mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.10g(0.51mmol)을 톨루엔 170ml에 용해 시키고, Pd(dba)₂ 0.098g(0.17mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-15을 흰색 고체로 5.05g (수율 77%) 을 수득 하였다.

[0312] LC-Mass (이론치: 385.15g/mol, 측정치: M+1 = 386g/mol)

[0313] 중간체 M-16의 합성

[0314] [반응식 16]



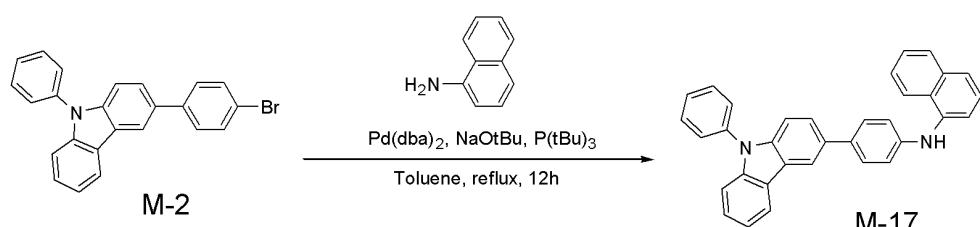
[0315]

[0316] 중간체 M-5 5.49g(17.0mmol)과 (9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)아민 3.74g(17.85mmol), 소디움 t-부톡사이드 2.45g(25.5mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.10g(0.51mmol)을 툴루엔 170 ml에 용해시키고, Pd(dba)₂ 0.098g (0.17mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 중류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-16을 흰색 고체로 6.0g (수율 78%)을 수득하였다.

[0317] LC-Mass (이론치): 451.19g/mol, 측정치: M+1 = 452g/mol)

[0318] 중간체 M-17의 합성

[0319] [반응식 17]



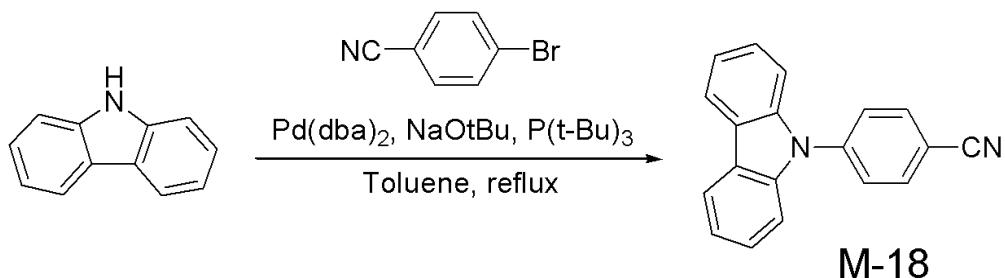
[0320]

[0321] 중간체 M-2 30g(75.3mmol)과 1-아미노나프탈렌 11.9g(82.83mmol), 소디움 t-부톡사이드 10.9g(113.0mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.46g(2.26mmol)을 툴루엔 750ml에 용해시키고, Pd(dba)₂ 0.43g(0.753mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 중류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-17을 흰색 고체로 25.7 g(수율 74%)을 수득하였다.

[0322] LC-Mass (o)론치: 460.19g/mol, 측정치: M+1 = 461g/mol)

[0323] 중간체 M-18의 합성

[0324] [반응식 18]



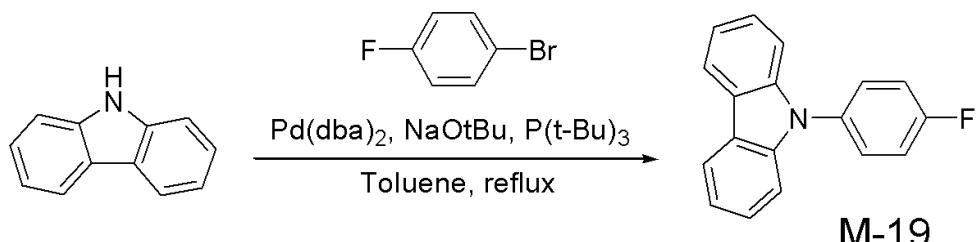
[0325]

[0326] 카바졸 20g(119.6mmol)과 4-브로모벤조니트릴 23.9g(131.6mmol), 소디움 t-부톡사이드 23g(239.2mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 1.45g(7.18mmol)을 툴루엔 600ml에 용해 시키고, Pd(dba)₂ 1.38g(2.39mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 중류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-18을 흰색 고체로 22.8 g(수율 71%)을 수득하였다.

[0327] LC-Mass (이론치: 268.10g/mol, 측정치: M+1 = 269g/mol)

[0328] 중간체 M-19의 합성

[0329] [반응식 19]



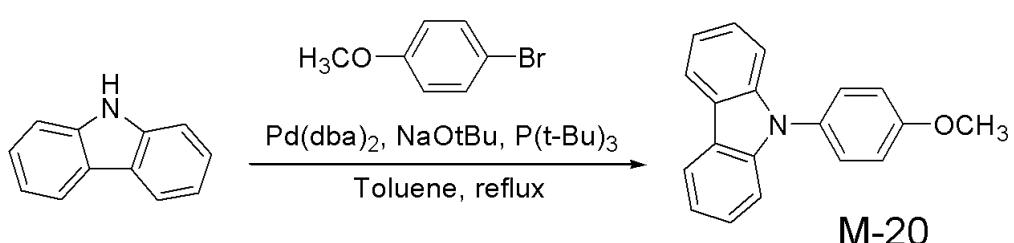
[0330]

[0331] 4-브로모벤조니트릴 대신 1-브로모-4-플루오로벤젠을 사용한 것을 제외하고, 중간체 M-18의 제조 방법과 동일한 방법으로 중간체 M-19를 흰색 고체로 22.8 g(수율 73%)을 수득 하였다.

[0332] LC-Mass (이론치: 261.10g/mol, 측정치: M+1 = 262g/mol).

[0333] 중간체 M-20의 합성

[0334] [반응식 20]



[0335]

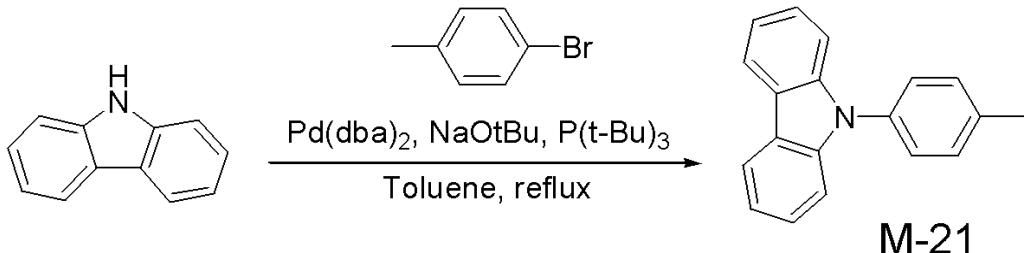
[0336] 4-브로모벤조니트릴 대신 4-브로모아니솔을 사용한 것을 제외하고, 중간체 M-18의 제조 방법과 동일한 방법으로

중간체 M-20를 흰색 고체로 25.5 g(수율 78%)을 수득 하였다.

[0337] LC-Mass (이론치: 273.12g/mol, 측정치: M+1 = 274g/mol).

[0338] 중간체 M-21의 합성

[0339] [반응식 21]



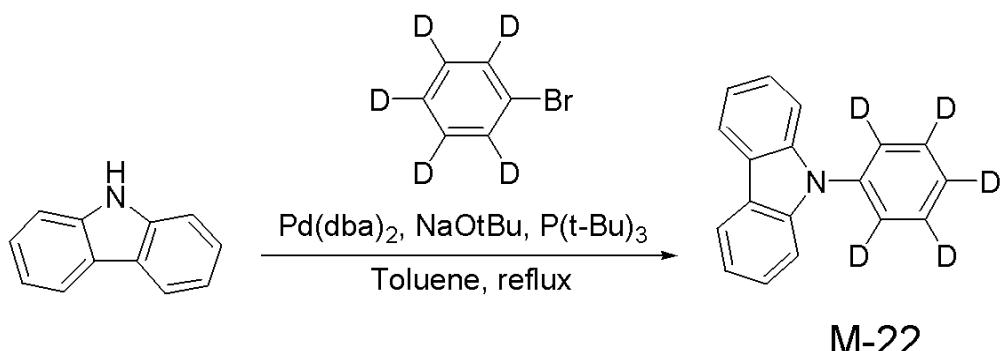
[0340]

[0341] 4-브로모벤조니트릴 대신 4-브로모톨루엔을 사용한 것을 제외하고, 중간체 M-18의 제조 방법과 동일한 방법으로 중간체 M-21을 흰색 고체로 24.3 g(수율 79%)을 수득 하였다.

[0342] LC-Mass (이론치: 257.12g/mol, 측정치: M+1 = 258g/mol).

[0343] 중간체 M-22의 합성

[0344] [반응식 22]



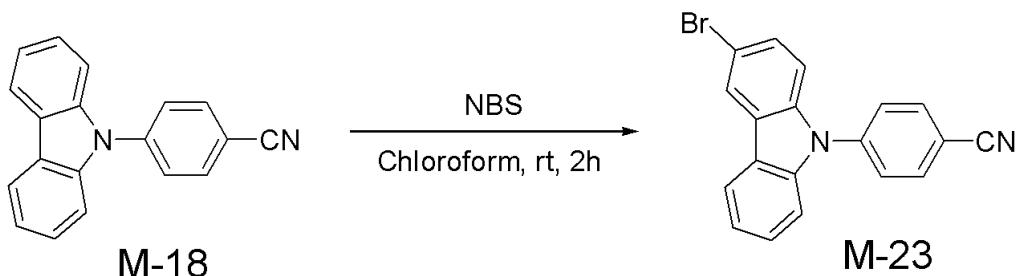
[0345]

[0346] 4-브로모벤조니트릴 대신 브로모벤젠-d5를 사용한 것을 제외하고, 중간체 M-18의 제조 방법과 동일한 방법으로 중간체 M-22를 흰색 고체로 24.1 g(수율 81%)을 수득 하였다.

[0347] LC-Mass (이론치: 248.14g/mol, 측정치: M+1 = 249g/mol).

[0348] 중간체 M-23의 합성

[0349] [반응식 23]



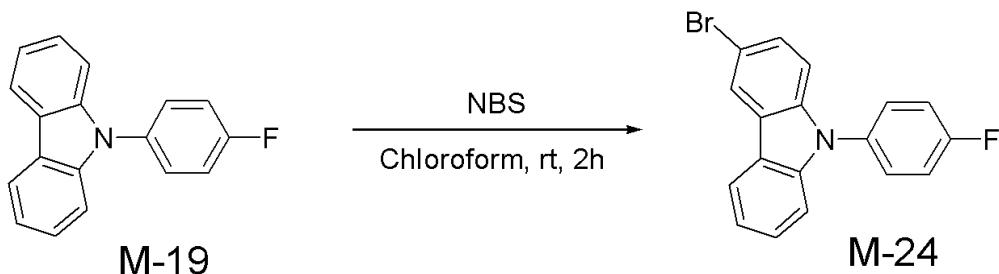
[0350]

[0351] 중간체 M-18 20g(74.5mmol)을 클로로포름(370mL)에 녹이고, N-브로모 숙신이미드(13.3g, 74.5mmol)를 넣은 후, 2시간 상온에서 교반하였다. 반응 종료 후에 증류수와 디클로로메탄으로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 디클로로메탄과 n-헥산으로 재결정하여 목적 화합물인 M-23을 흰색 고체로 21.2g(수율 82%)을 수득 하였다.

[0352] LC-Mass (이론치: 346.01g/mol, 측정치: $M+1 = 347\text{g/mol}$, $M+3 = 349\text{g/mol}$)

[0353] 중간체 M-24의 합성

[0354] [반응식 24]



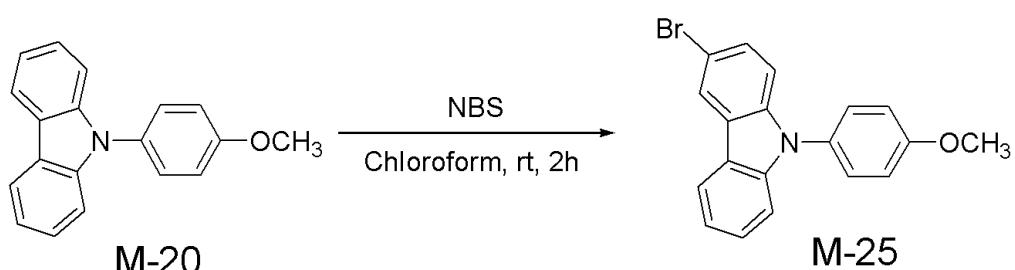
[0355]

[0356] 중간체 M-18 대신 M-19를 사용한 것을 제외하고, 중간체 M-23의 제조 방법과 동일한 방법으로 중간체 M-24를 흰색 고체로 21.0 g(수율 83%)을 수득 하였다.

[0357] LC-Mass (이론치: 339.01g/mol, 측정치: $M+1 = 340\text{g/mol}$, $M+3 = 342\text{g/mol}$).

[0358] 중간체 M-25의 합성

[0359] [반응식 25]



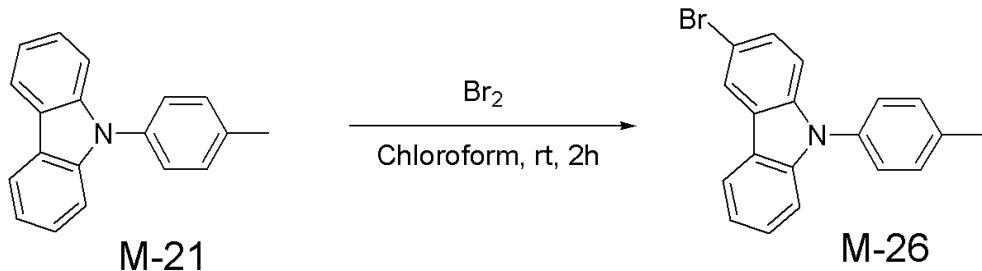
[0360]

[0361] 중간체 M-18 대신 M-20을 사용한 것을 제외하고, 중간체 M-23의 제조 방법과 동일한 방법으로 중간체 M-25를 흰색 고체로 21.8 g(수율 83%)을 수득 하였다.

[0362] LC-Mass (이론치): 351.03g/mol, 측정치: M+1 = 352g/mol, M+3 = 354g/mol).

[0363] 중간체 M-26의 합성

[0364] [반응식 26]



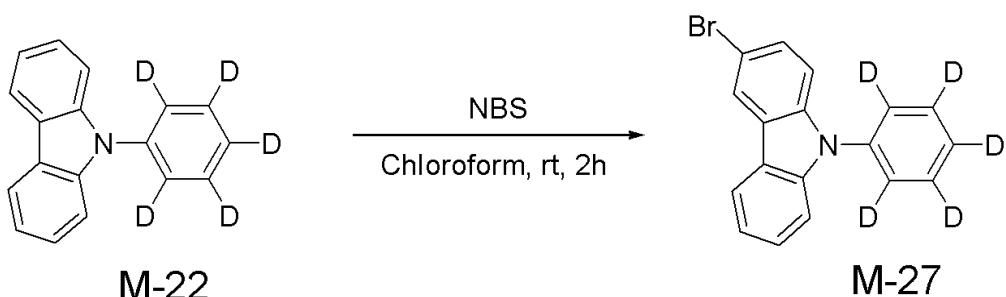
[0365]

[0366] 중간체 M-21 20g(74.5mmol)을 클로로포름(370mL)에 녹이고, 브롬 11.9g(74.5mmol)를 넣은 후, 2시간 상온에서 교반하였다. 반응 종료 후에 중류수와 디클로로메탄으로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 디클로로메탄과 n-헥산으로 재결정하여 목적 화합물인 M-26을 흰색 고체로 18.8g(수율 75%) 을 수득 하였다.

[0367] LC-Mass (이론치): 335.03g/mol, 측정치: M+1 = 336g/mol, M+3 = 338g/mol)

[0368] 중간체 M-27의 합성

[0369] [반응식 27]



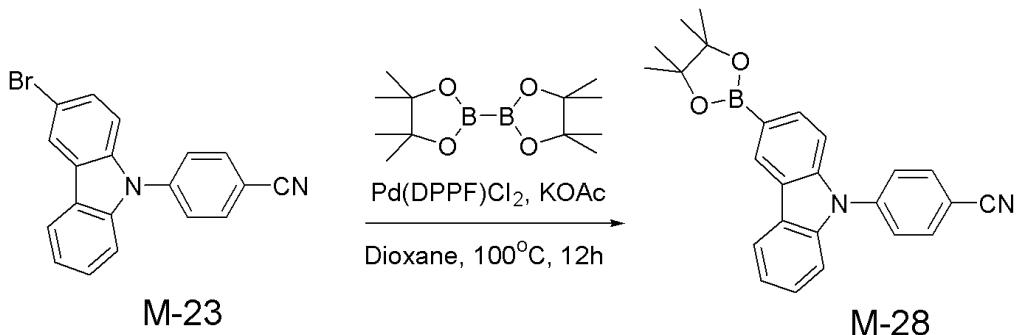
[0370]

[0371] 중간체 M-18 대신 M-22를 사용한 것을 제외하고, 중간체 M-23의 제조 방법과 동일한 방법으로 중간체 M-27을 흰색 고체로 20.7 g(수율 85%)을 수득 하였다.

[0372] LC-Mass (이론치): 326.05g/mol, 측정치: M+1 = 327g/mol, M+3 = 329g/mol).

[0373] 중간체 M-28의 합성

[0374] [반응식 28]



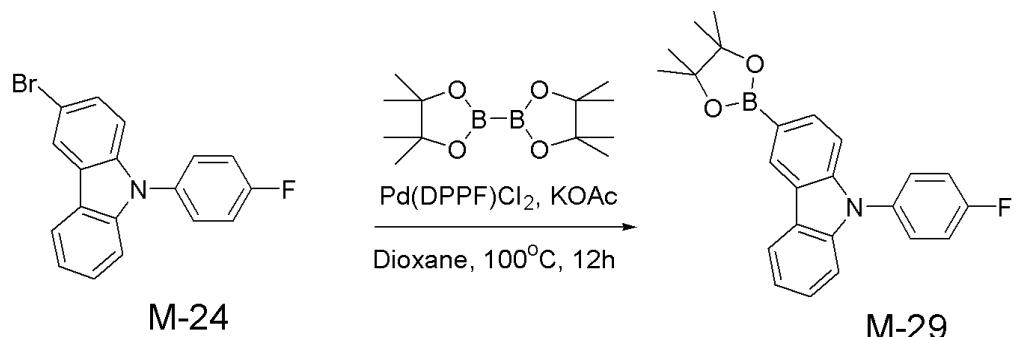
[0375]

[0376] 중간체 M-23 18g(51.8mmol)과 Pd(dppf)Cl₂ 0.85g (1.04mmol), 비스(페나콜라토)디보론(Bis(pinacolato)diboron) 14.5g (57.0mmol) 및 포타슘아세테이트 10.2g(103.6mmol)을 1,4-다이옥산(dioxane) 260mL에 용해 시켰다. 반응물을 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 한 후 디클로로메탄과 중류수로 3회 추출 하였다. 추출액을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 갤 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-28을 흰색 고체로 14.5g (수율 71%) 을 수득 하였다.

[0377] LC-Mass (이론치): 394.19g/mol, 측정치: M+1 = 395g/mol)

[0378] 중간체 M-29의 합성

[0379] [반응식 29]



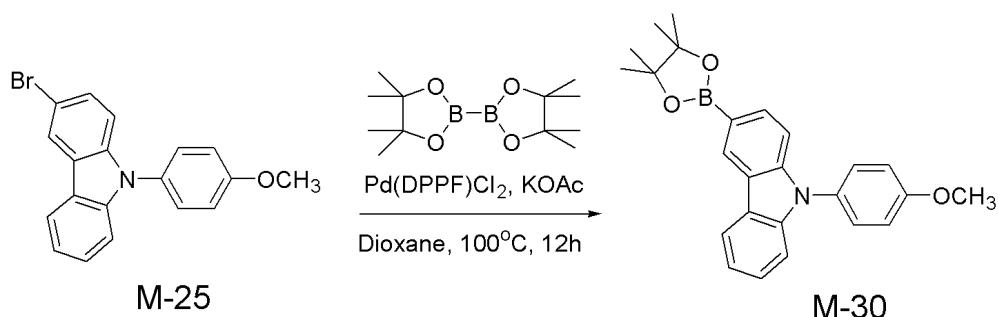
[0380]

[0381] 중간체 M-23 대신 M-24를 사용한 것을 제외하고, 중간체 M-28의 제조 방법과 동일한 방법으로 중간체 M-29을 흰색 고체로 14.2 g(수율 75%)을 수득 하였다.

[0382] LC-Mass (의론치): 387 18g/mol 출정치: M+1 = 388g/mol

[0383] 증가체 M-30의 항성

[0384] [반응식 30]



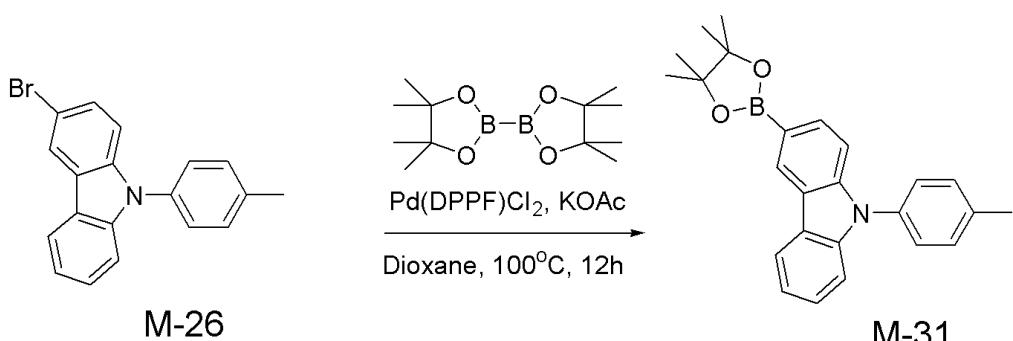
[0385]

[0386] 중간체 M-23 대신 M-25를 사용한 것을 제외하고, 중간체 M-28의 제조 방법과 동일한 방법으로 중간체 M-30을 흰색 고체로 15.9 g(수율 77%)을 수득 하였다.

[0387] LC-Mass (이론치: 399.20g/mol, 측정치: M+1 = 400g/mol).

[0388] 중간체 M-31의 합성

[0389] [반응식 31]



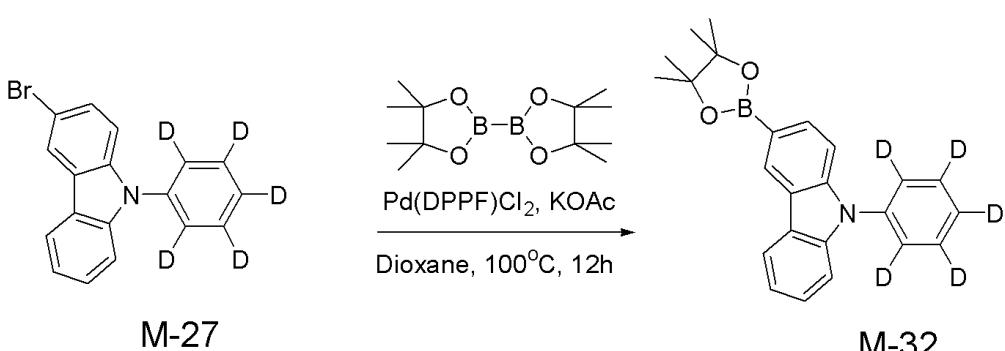
[0390]

[0391] 중간체 M-23 대신 M-26을 사용한 것을 제외하고, 중간체 M-28의 제조 방법과 동일한 방법으로 중간체 M-31을 흰색 고체로 16.1 g(수율 81%)을 수득 하였다.

[0392] LC-Mass (이론치: 383.21g/mol, 측정치: M+1 = 384g/mol).

[0393] 중간체 M-32의 합성

[0394] [반응식 32]



[0395]

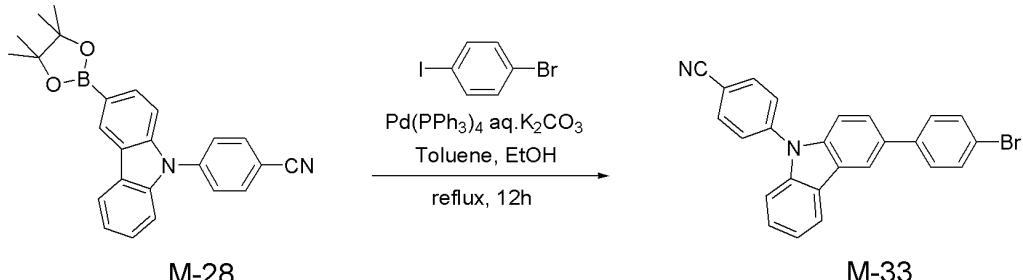
[0396] 중간체 M-23 대신 M-27을 사용한 것을 제외하고, 중간체 M-28의 제조 방법과 동일한 방법으로 중간체 M-32를 흰

색 고체로 15.1 g(수율 81%)을 수득 하였다.

[0397] LC-Mass (이론치: 359.20g/mol, 측정치: M+1 = 360g/mol).

[0398] 중간체 M-33의 합성

[0399] [반응식 33]



[0400]

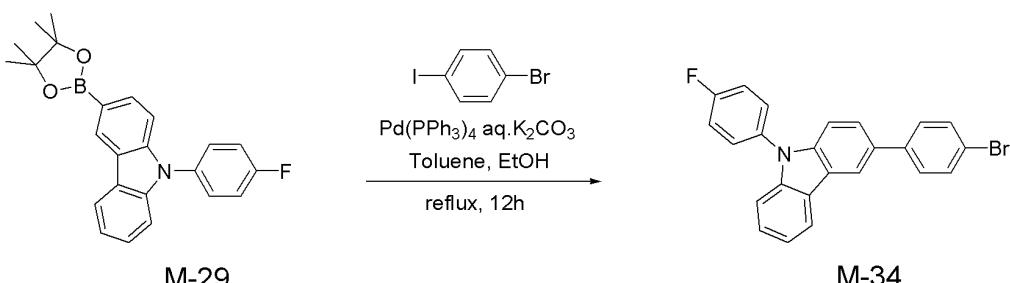
[0401] 중간체 M-28 12g(30.4mmol), 1-브로모-4-아이오도벤젠 8.6g(30.4mmol) 및 테트라카스트리페닐포스핀팔라듐 0.35g(0.304mmol)을 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 툴루엔 152mL와 에탄올 76mL에 용해 시켰다.

[0402] 이후 포타슘 카보네이트 8.95g(60.8mmol)을 녹인 수용액 76mL를 첨가 시킨 후 12시간 동안 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 후 추출액을 마그네슘 설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적화합물인 중간체 M-33을 흰색 고체로 10.6g (수율 82%)을 수득 하였다.

[0403] LC-Mass (이론치: 422.04g/mol, 측정치: M+1 = 423g/mol, M+3 = 425g/mol)

[0404] 중간체 M-34의 합성

[0405] [반응식 34]



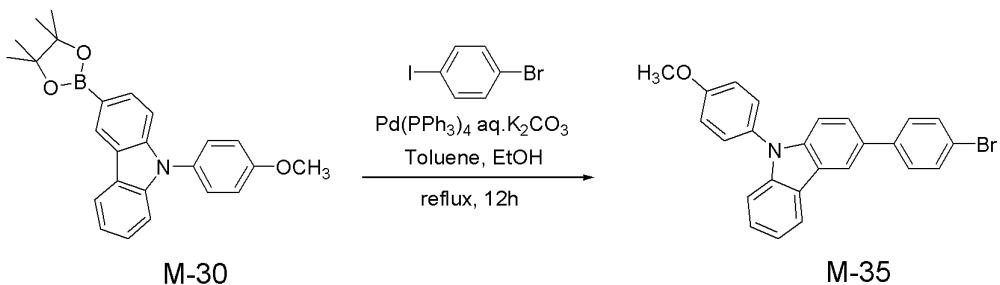
[0406]

[0407] 중간체 M-28 대신 M-29를 사용한 것을 제외하고, 중간체 M-33의 제조 방법과 동일한 방법으로 중간체 M-34를 흰색 고체로 10.8 g(수율 85%)을 수득 하였다.

[0408] LC-Mass (이론치: 415.04g/mol, 측정치: M+1 = 416g/mol, M+3 = 418g/mol).

[0409] 중간체 M-35의 합성

[0410] [반응식 35]



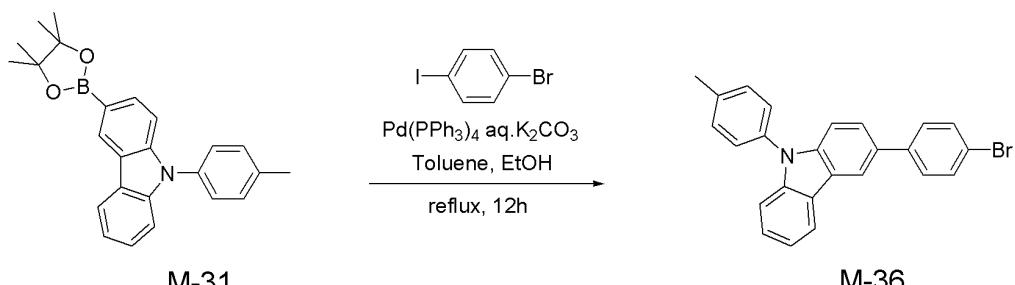
[0411]

[0412] 중간체 M-28 대신 M-30을 사용한 것을 제외하고, 중간체 M-33의 제조 방법과 동일한 방법으로 중간체 M-35를 흰색 고체로 10.9 g(수율 84%)을 수득 하였다.

[0413] LC-Mass (이론치: 428.32g/mol, 측정치: M+1 = 429g/mol, M+3 = 431g/mol).

[0414] 중간체 M-36의 합성

[0415] [반응식 36]



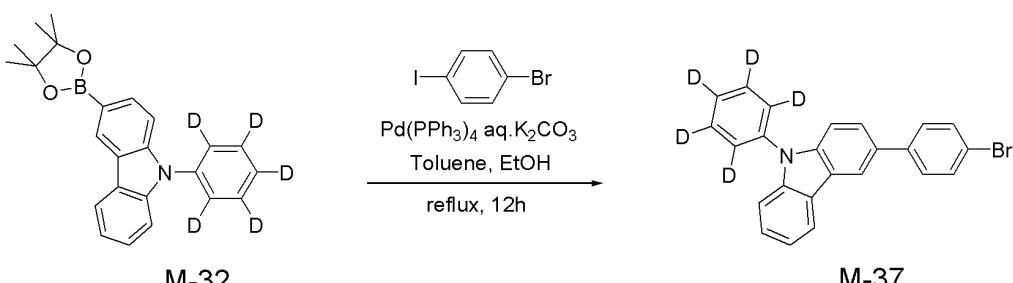
[0416]

[0417] 중간체 M-28 대신 M-31을 사용한 것을 제외하고, 중간체 M-33의 제조 방법과 동일한 방법으로 중간체 M-36를 흰색 고체로 10.9 g(수율 87%)을 수득 하였다.

[0418] LC-Mass (이론치: 411.06g/mol, 측정치: M+1 = 412g/mol, M+3 = 414g/mol).

[0419] 중간체 M-37의 합성

[0420] [반응식 37]



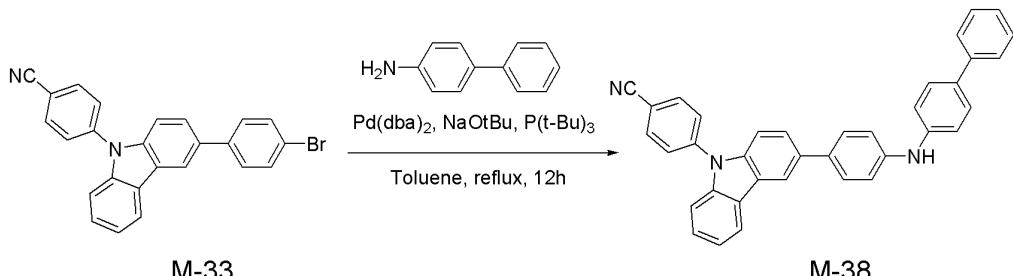
[0421]

[0422] 중간체 M-28 대신 M-31을 사용한 것을 제외하고, 중간체 M-33의 제조 방법과 동일한 방법으로 중간체 M-36을 흰색 고체로 10.9 g(수율 89%)을 수득 하였다.

[0423] LC-Mass (이론치: 402.08g/mol, 측정치: $M+1 = 403\text{g/mol}$, $M+3 = 405\text{g/mol}$).

[0424] 중간체 M-38의 합성

[0425] [반응식 38]



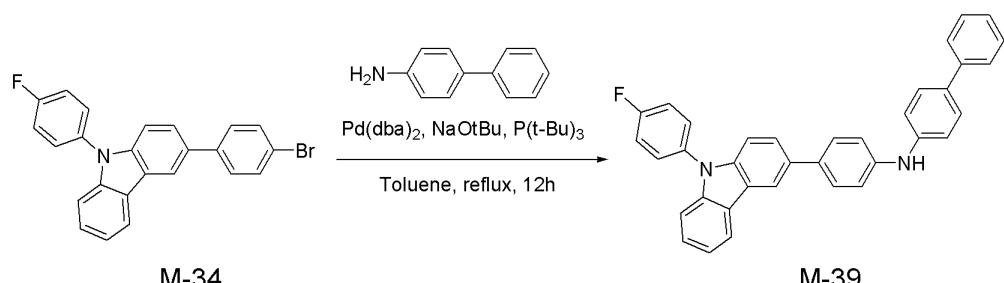
[0426]

[0427] 중간체 M-33 10g(19.5mmol)과 4-아미노바이페닐 3.3g(19.5mmol), 소다음 t-부톡사이드 3.7g(39.0mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.12g(0.58mmol)을 툴루엔 195ml에 용해 시키고, Pd(dba)₂ 0.11g(0.753mmol)을 넣은 후 절소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 중류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-38을 흰색 고체로 7.2g(수율 72%)을 수득하였다.

[0428] LC-Mass (이론치): 511.20g/mol, 측정치: M+1 = 512g/mol)

[0429] 중간체 M-39의 합성

[0430] [발음식 39]



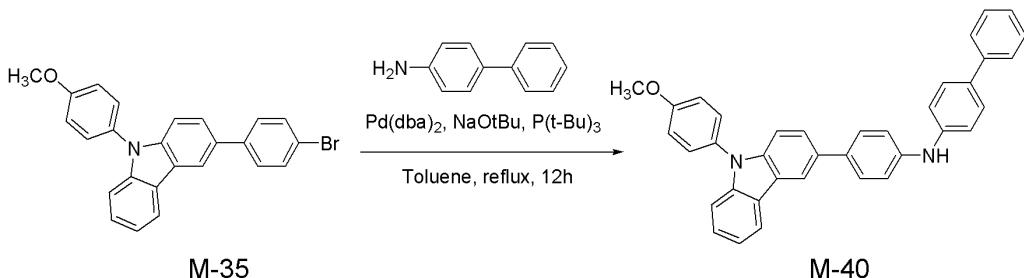
[0431]

[0432] 중간체 M-33 대신 M-34를 사용한 것을 제외하고, 중간체 M-38의 제조 방법과 동일한 방법으로 중간체 M-39를 흰색 고체로 7.4 g(수율 75%)을 수득하였다

[0433] LC-Mass (의론치): 504.20g/mol 출정치: M+1 = 504.60g/mol

[0434] 증가체 M=40의 항선

[0435] [반응식 40]



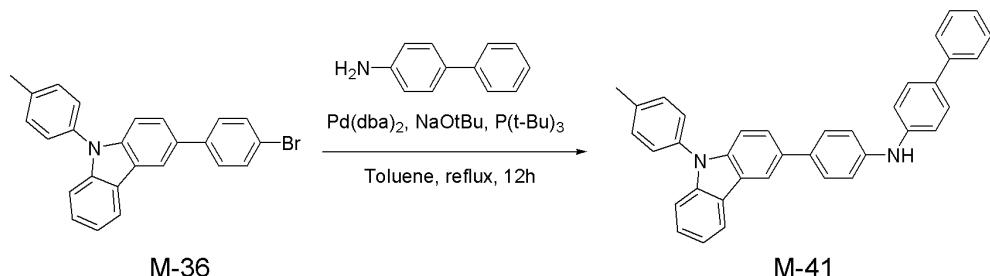
[0436]

[0437] 중간체 M-33 대신 M-35를 사용한 것을 제외하고, 중간체 M-38의 제조 방법과 동일한 방법으로 중간체 M-40을 흰색 고체로 7.7 g(수율 76%)을 수득 하였다.

[0438] LC-Mass (이론치): 516.22/mol, 측정치: M+1 = 517g/mol).

[0439] 중간체 M-41의 합성

[0440] [반응식 41]



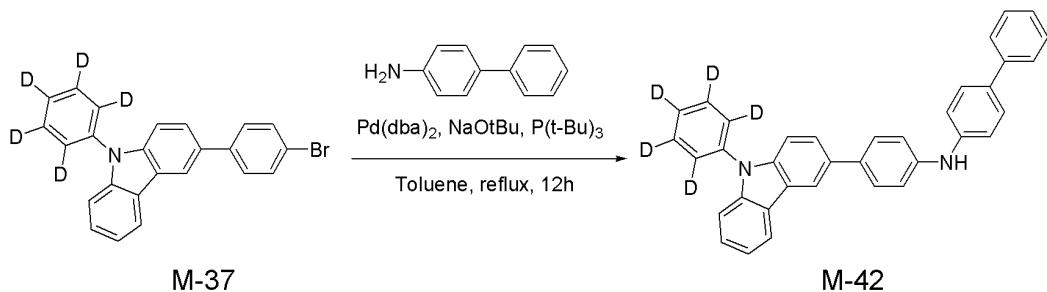
[0441]

[0442] 중간체 M-33 대신 M-36을 사용한 것을 제외하고, 중간체 M-38의 제조 방법과 동일한 방법으로 중간체 M-41을 흰색 고체로 7.7 g(수율 79%)을 수득 하였다.

[0443] LC-Mass (이론치): 500.23/mol, 측정치: M+1 = 501g/mol).

[0444] 중간체 M-42의 합성

[0445] [반응식 42]



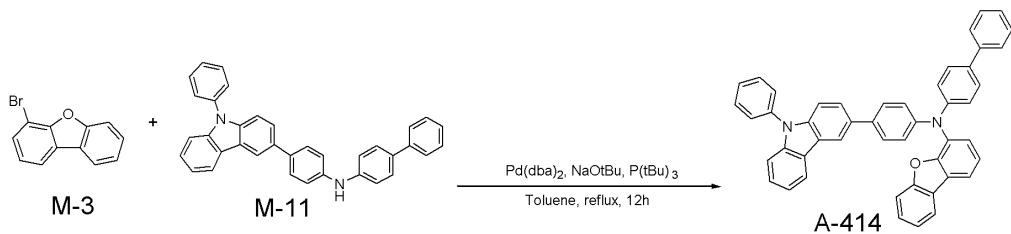
[0446]

[0447] 중간체 M-33 대신 M-37을 사용한 것을 제외하고, 중간체 M-38의 제조 방법과 동일한 방법으로 중간체 M-42를 흰색 고체로 8.0 g(수율 83%)을 수득 하였다.

[0448] LC-Mass (이론치: 491.24/mol, 측정치: M+1 = 492g/mol).

[0449] 실시예 1: 화학식 A-414로 표시되는 화합물의 제조

[0450] [반응식 43]



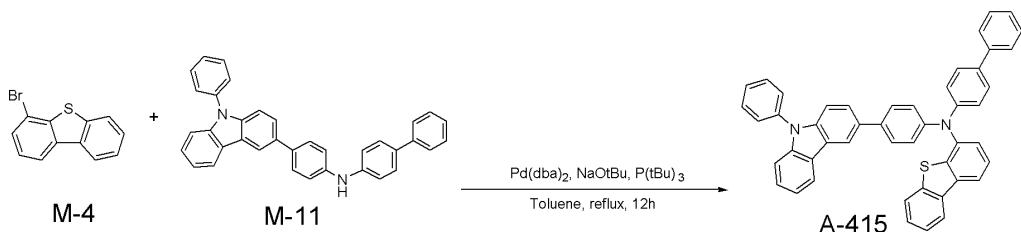
[0451]

[0452] 중간체 M-3 5g(20.2mmol)과 중간체 M-11 9.85g(20.2mmol), 소디움 t-부톡사이드 2.91g(30.3mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.12g (2.26mmol)을 톨루엔 200ml에 용해 시키고, Pd(dba)₂ 0.12g(0.202mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-414를 흰색 고체로 12g(수율 91%) 을 수득 하였다.

[0453] LC-Mass (이론치: 652.25g/mol, 측정치: M+1 = 653g/mol)

[0454] 실시예 2: 화학식 A-415로 표시되는 화합물의 제조

[0455] [반응식 44]



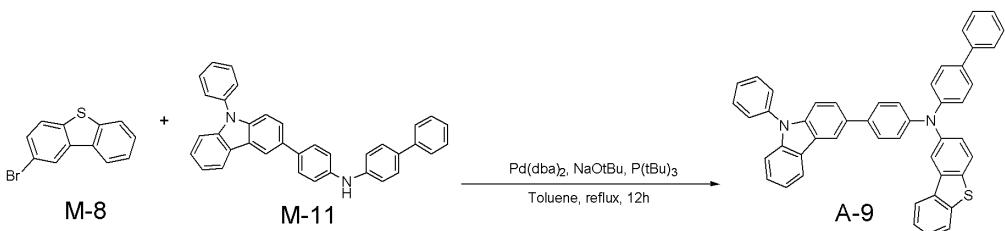
[0456]

[0457] 중간체 M-4 5.3g(20.2mmol)과 중간체 M-11 9.85g(20.2mmol), 소디움 t-부톡사이드 2.91g(30.3mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.12g(2.26mmol)을 톨루엔 200ml에 용해 시키고, Pd(dba)₂ 0.12g(0.202mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-415를 흰색 고체로 11.8g(수율 87%)을 수득 하였다.

[0458] LC-Mass (이론치: 668.23g/mol, 측정치: M+1 = 669g/mol)

[0459] 실시예 3: 화학식 A-9로 표시되는 화합물의 제조

[0460] [반응식 45]



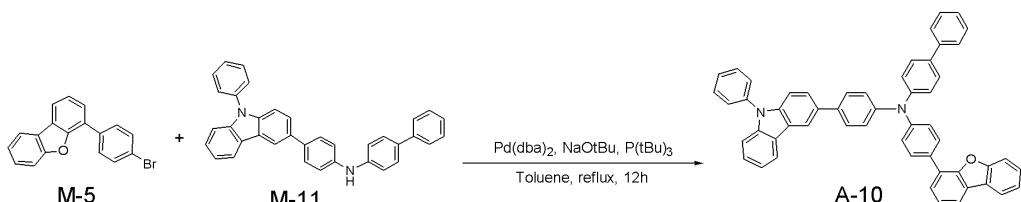
[0461]

[0462] 중간체 M-8 5.3g(20.2mmol)과 중간체 M-11 9.85g(20.2mmol), 소디움 t-부톡사이드 2.91g(30.3mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.12g(2.26mmol)을 툴루엔 200 ml에 용해시키고, Pd(dba)₂ 0.12g(0.202mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 중류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-9를 흰색 고체로 11.8g(수율 87%)을 수득하였다.

[0463] LC-Mass (이론치): 668.23g/mol, 측정치: M+1 = 669g/mol)

[0464] 실시예 4: 화학식 A-10으로 표시되는 화합물의 제조

[0465] [반응식 46]



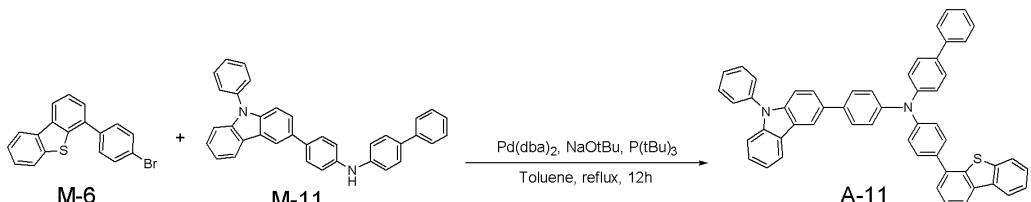
[0466]

[0467] 중간체 M-5 6.5g(20.2mmol)과 중간체 M-11 9.85g(20.2mmol), 소디움 t-부톡사이드 2.91g(30.3mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.12g(2.26mmol)을 툴루엔 200ml에 용해시키고, $\text{Pd}(\text{dba})_2$ 0.12g(0.202mmol)을 넣은 후 질소분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 중류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-10을 회색 고체로 12.4g(수율 84%)을 수득하였다.

[0468] LC-Mass (이론치): 728.28g/mol, 측정치: M+1 = 729g/mol)

[0469] 실시예 5: 화학식 A-11로 표시되는 화합물의 제조

[0470] [반응식 47]



[0471]

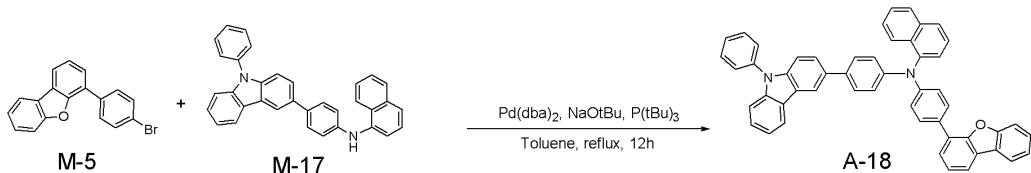
[0472] 중간체 M-6 6.85g(20.2mmol)과 중간체 M-11 9.85g(20.2mmol), 소다음 t-부톡사이드 2.91g(30.3mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.12g(2.26mmol)을 톨루엔 200ml에 용해 시키고, $\text{Pd}(\text{dba})_2$ 0.12g(0.202mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 종류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n -헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실

리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-11을 흰색 고체로 13.2g(수율 88%)을 수득 하였다.

[0473] LC-Mass (이론치: 744.26g/mol, 측정치: M+1 = 745g/mol)

[0474] 실시예 6: 화학식 A-18로 표시되는 화합물의 제조

[0475] [반응식 48]



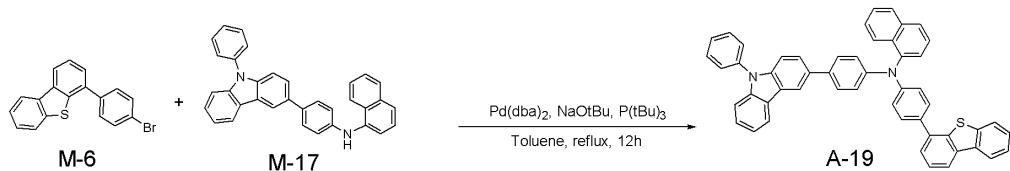
[0476]

[0477] 중간체 M-5 6.53g(20.2mmol)과 중간체 M-17 9.30g(20.2mmol), 소다음 t-부록사이드 2.91g(30.3mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.12g(2.26mmol)을 톨루엔 200ml에 용해시키고, Pd(dba)₂ 0.12g(0.202mmol)을 넣은 후 질소분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 중류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 젤 철럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-18을 흰색 고체로 12.5g(수율 88%)을 수득 하였다.

[0478] LC-Mass (이론치: 702.27g/mol, 측정치: M+1 = 703g/mol)

[0479] 실시예 7: 화학식 A-19로 표시되는 화합물의 제조

[0480] [반응식 49]



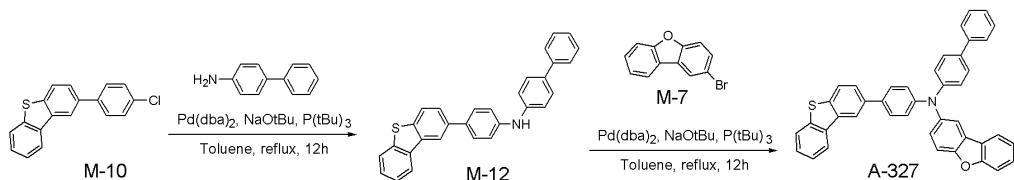
[0481]

[0482] 중간체 M-6 6.85g(20.2mmol)과 중간체 M-17 9.30g(20.2mmol), 소디움 t-부톡사이드 2.91g(30.3mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.12g(2.26mmol)을 톨루エン 200ml에 용해 시키고, $\text{Pd}(\text{dba})_2$ 0.12g(0.202mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 중류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-18을 흰색 고체로 12.3g(수율 85%)을 수득 하였다.

[0483] LC-Mass (이론치: 718.24g/mol, 측정치: M+1 = 719g/mol)

[0484] 실시예 8: 화학식 A-327로 표시되는 화합물의 제조

[0485] [반응식 50]



[0486]

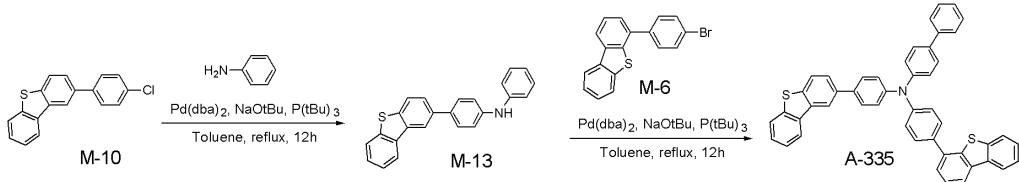
[0487] 중간체 M-12 5.2g(12.2mmol)과 중간체 M-7 3.0g(12.2mmol), 소디움 t-부토사이드 1.76g(18.3mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.074g(0.37mmol)을 툴루엔 120mL에 용해시키고, $\text{Pd}(\text{dba})_2$ 0.070g(0.122mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 화류 교반 시킨다. 밤을 종료 후 에틸아세테이트과 중류수로 추출 후 유기층을 마그

네슘설플라이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-327을 흰색 고체로 6.2g(수율 86%)을 수득 하였다.

[0488] LC-Mass (이론치: 593.18g/mol, 측정치: M+1 = 594g/mol)

[0489] 실시예 9: 화학식 A-335로 표시되는 화합물의 제조

[0490] [반응식 51]



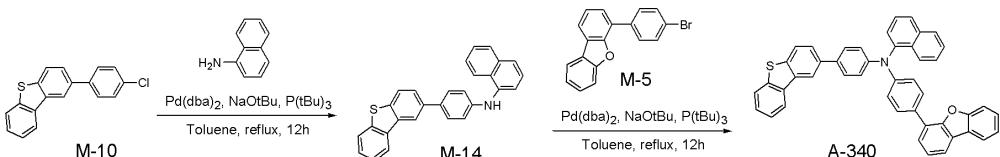
[0491]

[0492] 중간체 M-13 4.3g(12.2mmol)과 중간체 M-6 4.14g(12.2mmol), 소디움 t-부톡사이드 1.76g(18.3mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.074g(0.37mmol)을 톨루엔 120ml에 용해 시키고, Pd(dba)₂ 0.070g(0.122mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설플라이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-335를 흰색 고체로 6.8g(수율 91%)을 수득 하였다.

[0493] LC-Mass (이론치: 609.16g/mol, 측정치: M+1 = 610g/mol)

[0494] 실시예 10: 화학식 A-340으로 표시되는 화합물의 제조

[0495] [반응식 52]



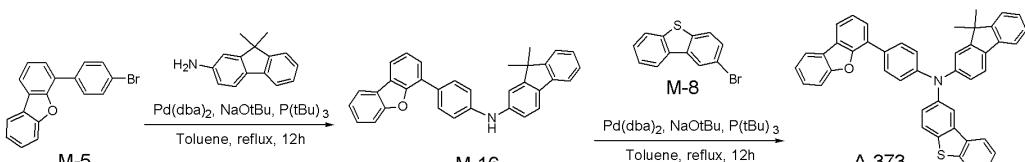
[0496]

[0497] 중간체 M-14 4.9g(12.2mmol)과 중간체 M-5 3.94g(12.2mmol), 소디움 t-부톡사이드 1.76g(18.3mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.074g(0.37mmol)을 톨루엔 120ml에 용해 시키고, Pd(dba)₂ 0.070g(0.122mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설플라이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-340을 흰색 고체로 7.2g(수율 92%)을 수득 하였다.

[0498] LC-Mass (이론치: 643.20g/mol, 측정치: M+1 = 644g/mol)

[0499] 실시예 11: 화학식 A-373으로 표시되는 화합물의 제조

[0500] [반응식 53]



[0501]

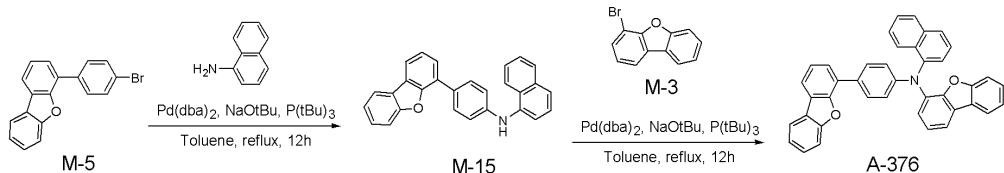
[0502] 중간체 M-16 5.51g(12.2mmol)과 중간체 M-8 3.21g(12.2 mmol), 소디움 t-부톡사이드 1.76g(18.3mmol) 및 트리

-테트라-부틸포스핀 0.074g(0.37mmol)을 톨루엔 120ml에 용해 시키고, $\text{Pd}(\text{dba})_2$ 0.070g(0.122mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 *n*-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-373을 흰색 고체로 7.0g(수율 91%)을 수득 하였다.

[0503] LC-Mass (이론치: 633.21g/mol, 측정치: $M+1 = 634\text{g/mol}$)

[0504] 실시예 12: 화학식 A-376으로 표시되는 화합물의 제조

[0505] [반응식 54]

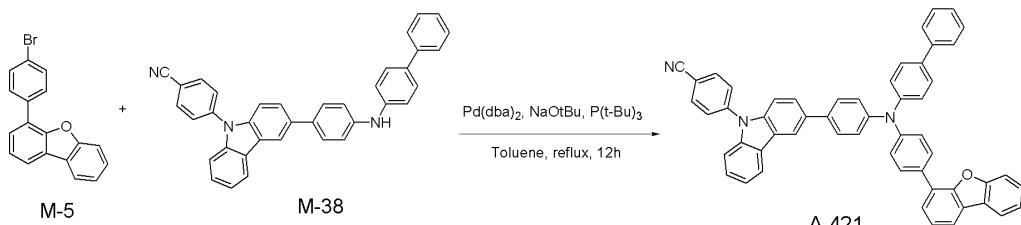


[0506]

[0507] 중간체 M-15 4.7g(12.2mmol)과 중간체 M-3 3.01g(12.2mmol), 소디움 *t*-부톡사이드 1.76g(18.3mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.074g(0.37mmol)을 톨루엔 120ml에 용해 시키고, $\text{Pd}(\text{dba})_2$ 0.070g(0.122mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 *n*-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-376을 흰색 고체로 6.2g(수율 92%)을 수득 하였다.

[0508] LC-Mass (이론치: 551.19g/mol, 측정치: $M+1 = 552\text{g/mol}$)

[0509] 실시예 13: 화학식 A-421으로 표시되는 화합물의 제조

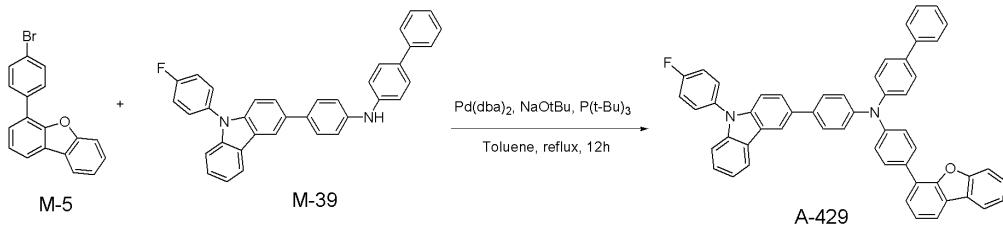


[0510]

[0511] 중간체 M-5 4.4g(13.7mmol)과 중간체 M-38 7.0g(13.7mmol), 소디움 *t*-부톡사이드 2.63g(27.4mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.08g(0.41mmol)을 톨루엔 137ml에 용해 시키고, $\text{Pd}(\text{dba})_2$ 0.08g(0.137mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 *n*-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-421을 흰색 고체로 8.7g(수율 84%)을 수득 하였다.

[0512] LC-Mass (이론치: 753.28g/mol, 측정치: $M+1 = 754\text{g/mol}$)

[0513] 실시예 14: 화학식 A-429로 표시되는 화합물의 제조

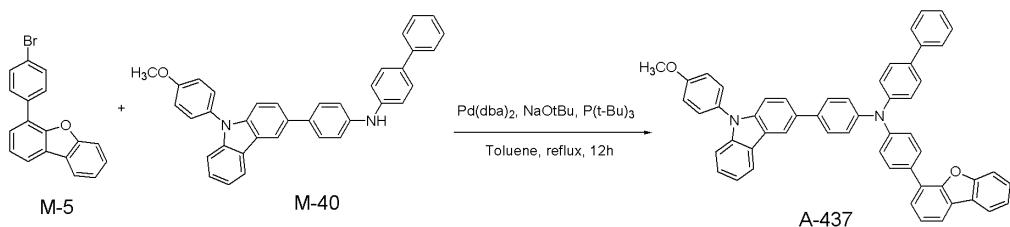


[0514]

[0515] 중간체 M-38 대신 M-39를 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-421의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-429를 흰색 고체로 8.3 g(수율 81%)을 수득 하였다.

[0516] LC-Mass (이론치): 746.27g/mol, 측정치: M+1 = 747g/mol).

[0517] 실시예 15: 화학식 A-437로 표시되는 화합물의 제조

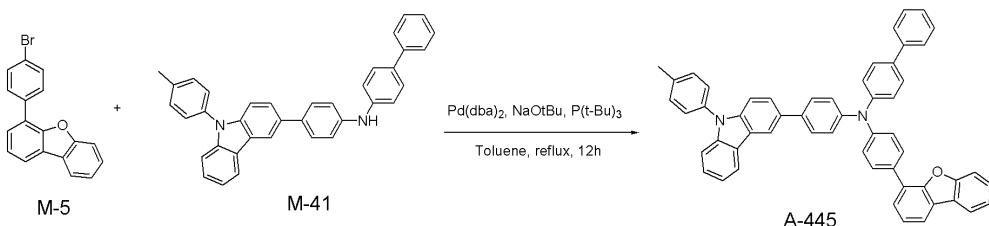


[0518]

[0519] 중간체 M-38 대신 M-40을 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-421의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-437을 흰색 고체로 8.8 g(수율 85%)을 수득 하였다.

[0520] LC-Mass (이론치): 758.29g/mol, 측정치: M+1 = 759g/mol).

[0521] 실시예 16: 화학식 A-445로 표시되는 화합물의 제조

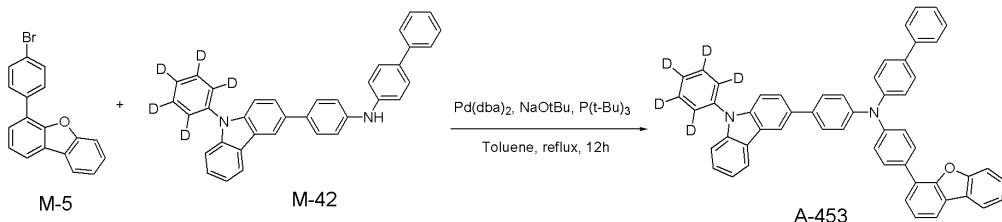


[0522]

[0523] 중간체 M-38 대신 M-41을 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-421의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-445를 회색 고체로 8.9 g(수율 87%)을 수들 하였다.

[0524] LC-Mass (이론치: 742.30g/mol, 측정치: M+1 = 743g/mol).

[0525] 실시예 17: 화학식 A-453으로 표시되는 화합물의 제조

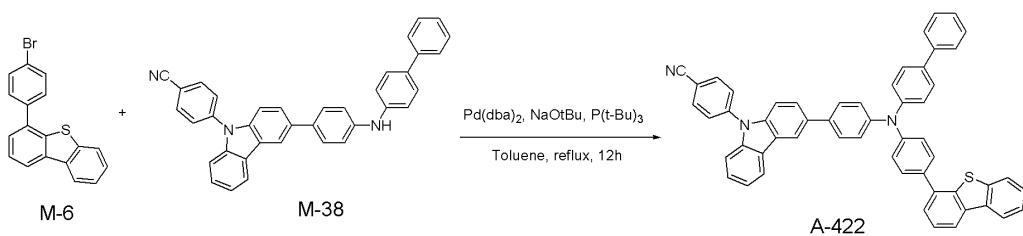


[0526]

[0527] 중간체 M-38 대신 M-42를 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-421의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-453을 흰색 고체로 8.3 g(수율 83%)을 수득 하였다.

[0528] LC-Mass (이론치: 733.31g/mol, 측정치: M+1 = 734g/mol).

[0529] 실시예 18: 화학식 A-422로 표시되는 화합물의 제조

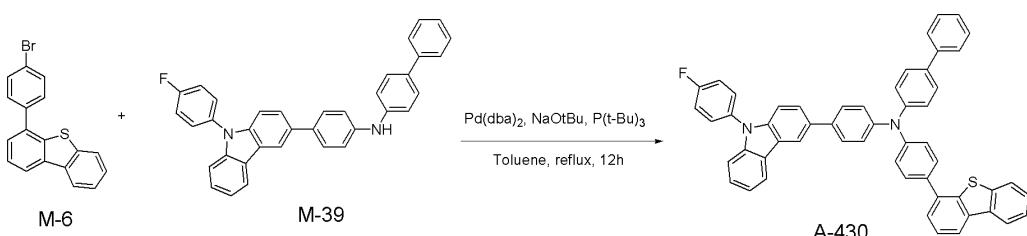


[0530]

[0531] 중간체 M-6 4.6g(13.7mmol)과 중간체 M-38 7.0g(13.7mmol), 소디움 t-부톡사이드 2.63g(27.4mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.08g(0.41mmol)을 톨루엔 137m1에 용해 시키고, Pd(dba)₂ 0.08g(0.137mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 중류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 젤 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-422를 흰색 고체로 8.6g(수율 82%)을 수득 하였다.

[0532] LC-Mass (이론치: 769.26g/mol, 측정치: M+1 = 770g/mol)

[0533] 실시예 19: 화학식 A-430으로 표시되는 화합물의 제조

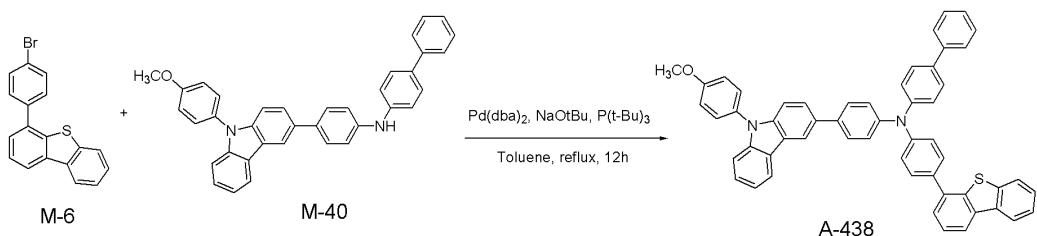


[0534]

[0535] 중간체 M-38 대신 M-39를 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-422의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-430을 흰색 고체로 8.8 g(수율 84%)을 수득 하였다.

[0536] LC-Mass (이론치: 762.25g/mol, 측정치: M+1 = 763g/mol).

[0537] 실시예 20: 화학식 A-438으로 표시되는 화합물의 제조

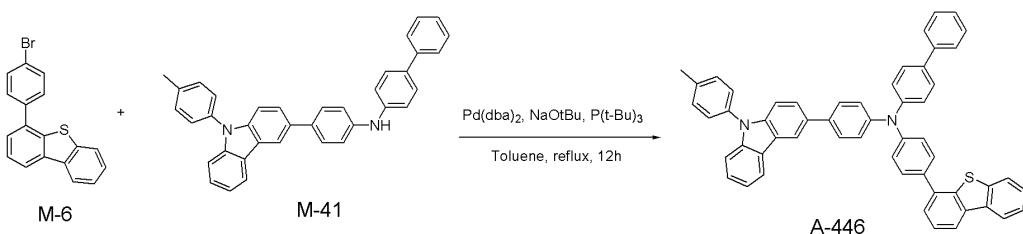


[0538]

[0539] 중간체 M-38 대신 M-40을 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-422의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-438을 흰색 고체로 9.1 g(수율 86%)을 수득 하였다.

[0540] LC-Mass (이론치): 774.27g/mol, 측정치: M+1 = 775g/mol).

[0541] 실시예 21: 화학식 A-446으로 표시되는 화합물의 제조

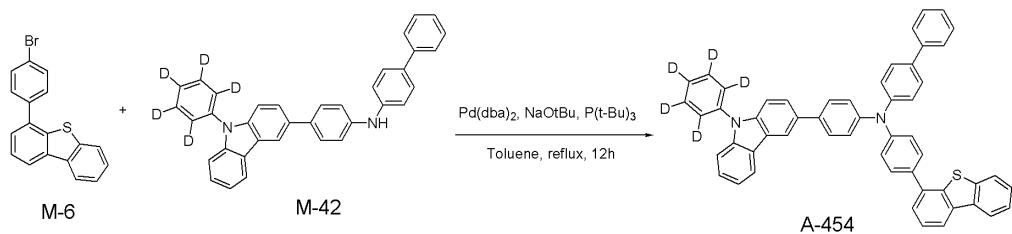


[0542]

[0543] 중간체 M-38 대신 M-41을 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-422의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-446을 흰색 고체로 9.2 g(수율 88%)을 수득 하였다.

[0544] LC-Mass (이론치): 758.28g/mol, 측정치: M+1 = 759g/mol).

[0545] 실시예 22: 화학식 A-454로 표시되는 화합물의 제조

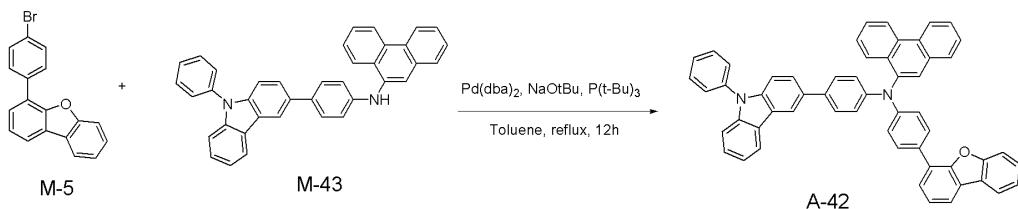


[0546]

[0547] 중간체 M-38 대신 M-42를 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-422의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-454를 흰색 고체로 8.8 g(수율 86%)을 수득 하였다.

[0548] LC-Mass (이론치): 749.29g/mol, 측정치: M+1 = 750g/mol).

[0549] 실시예 23: 화학식 A-42로 표시되는 화합물의 제조

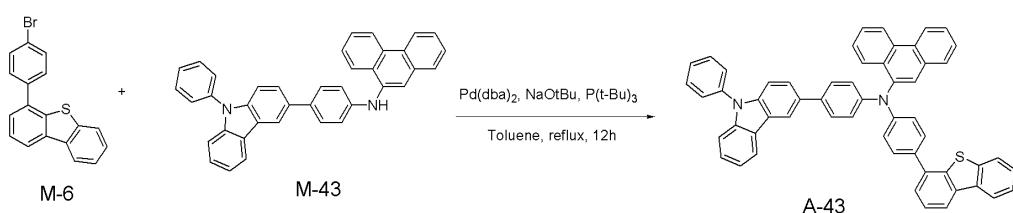


[0550]

[0551] 중간체 M-38 대신 M-43을 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-421의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-42를 흰색 고체로 8.4 g(수율 81%)을 수득 하였다.

[0552] LC-Mass (이론치: 752.28g/mol, 측정치: M+1 = 753g/mol).

[0553] 실시예 24: 화학식 A-43으로 표시되는 화합물의 제조

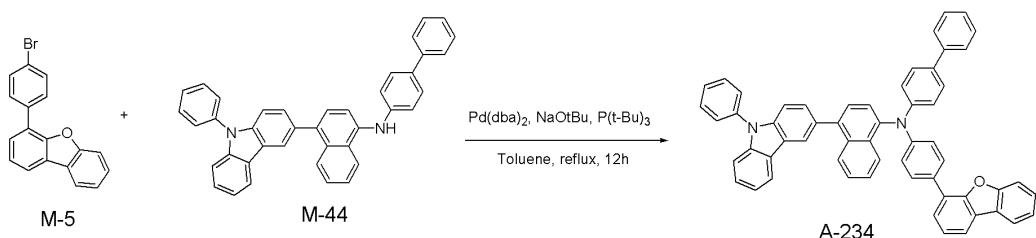


[0554]

[0555] 중간체 M-38 대신 M-43을 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-422의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-43을 흰색 고체로 8.7 g(수율 83%)을 수득 하였다.

[0556] LC-Mass (이론치: 768.26g/mol, 측정치: M+1 = 769g/mol).

[0557] 실시예 25: 화학식 A-234로 표시되는 화합물의 제조

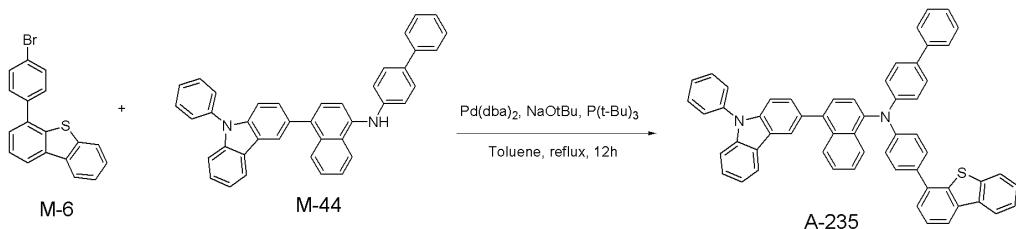


[0558]

[0559] 중간체 M-38 대신 M-44를 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-421의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-234를 9.0 g(수율 84%)을 수득 하였다.

[0560] LC-Mass (이론치: 778.30g/mol, 측정치: M+1 = 779g/mol).

[0561] 실시예 26: 화학식 A-235로 표시되는 화합물의 제조

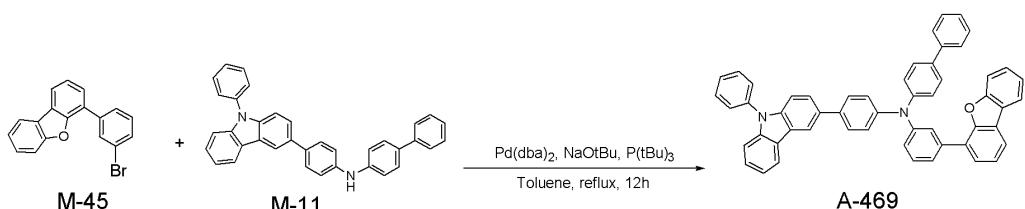


[0562]

[0563] 중간체 M-38 대신 M-44를 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-422의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-235을 흰색 고체로 9.0 g(수율 83%)을 수득 하였다.

[0564] LC-Mass (이론치: 794.28g/mol, 측정치: M+1 = 795g/mol).

[0565] 실시예 27: 화학식 A-469로 표시되는 화합물의 제조

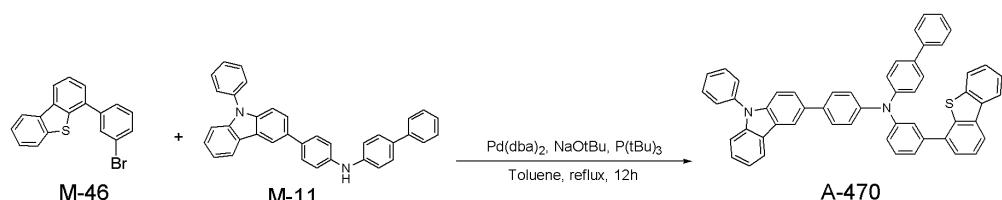


[0566]

[0567] 중간체 M-5 대신 M-45를 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-10의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-469를 흰색 고체로 12.8g(수율 87%)을 수득 하였다.

[0568] LC-Mass (이론치: 728.28g/mol, 측정치: M+1 = 729g/mol).

[0569] 실시예 28: 화학식 A-470으로 표시되는 화합물의 제조

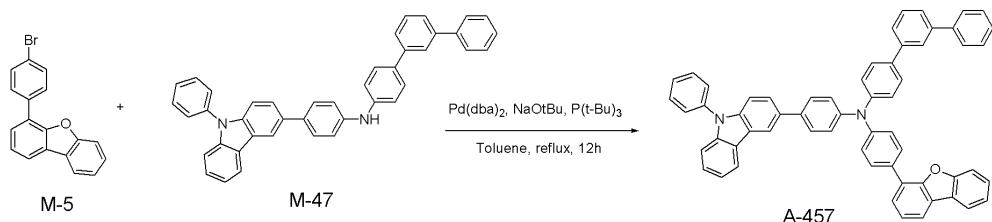


[0570]

[0571] 중간체 M-6 대신 M-46을 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-11의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-470을 흰색 고체로 13.4g(수율 89%)을 수득 하였다.

[0572] LC-Mass (이론치: 744.26g/mol, 측정치: M+1 = 745g/mol).

[0573] 실시예 29: 화학식 A-457로 표시되는 화합물의 제조

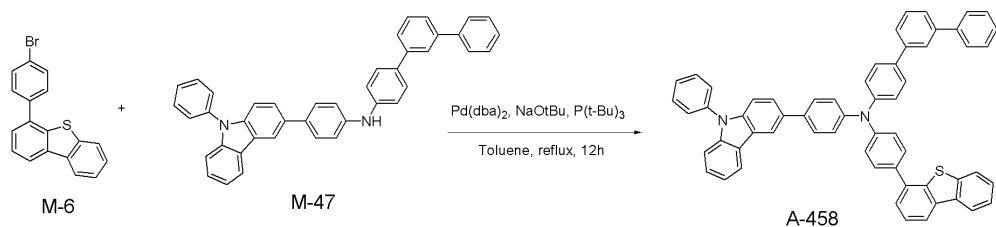


[0574]

[0575] 중간체 M-38 대신 M-47을 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-421의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-457을 9.4 g(수율 85%)을 수득 하였다.

[0576] LC-Mass (이론치: 804.31g/mol, 측정치: M+1 = 805g/mol).

[0577] 실시예 30: 화학식 A-458로 표시되는 화합물의 제조

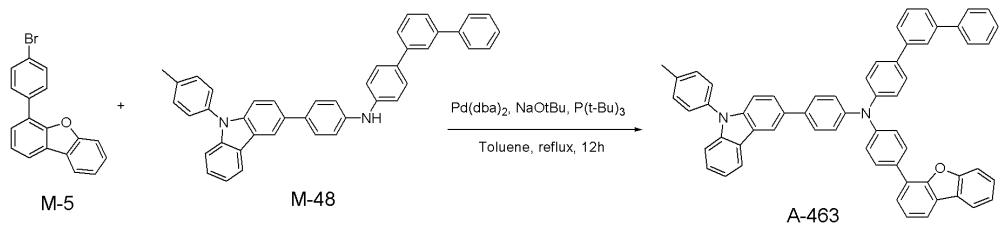


[0578]

[0579] 중간체 M-38 대신 M-47을 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-422의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-458을 흰색 고체로 10.01 g(수율 89%)을 수득 하였다.

[0580] LC-Mass (이론치: 820.29g/mol, 측정치: M+1 = 821g/mol).

[0581] 실시예 31: 화학식 A-463으로 표시되는 화합물의 제조

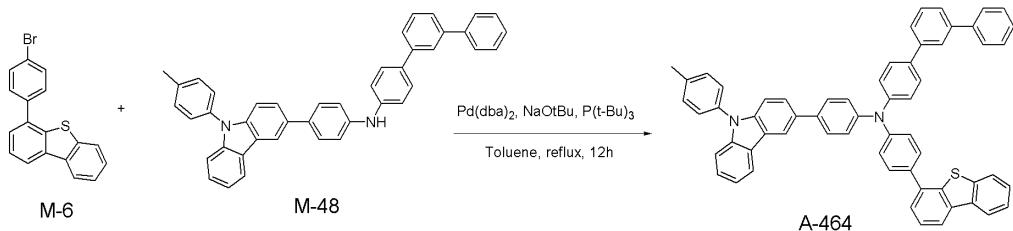


[0582]

[0583] 중간체 M-38 대신 M-48을 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-421의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-463을 9.5g(수율 85%)을 수득 하였다.

[0584] LC-Mass (이론치: 818.33g/mol, 측정치: M+1 = 819g/mol).

[0585] 실시예 32: 화학식 A-464로 표시되는 화합물의 제조

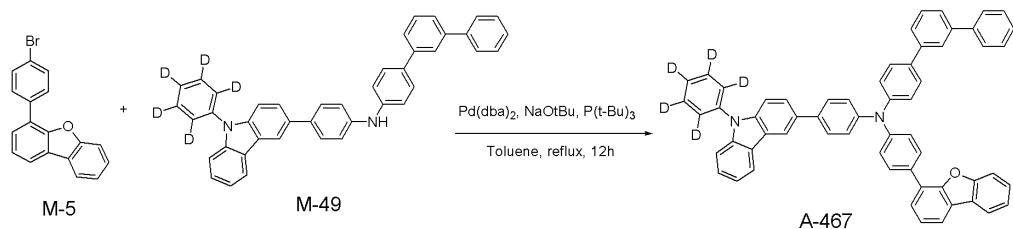


[0586]

[0587] 중간체 M-38 대신 M-48을 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-422의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-464를 흰색 고체로 9.8 g(수율 86%)을 수득 하였다.

[0588] LC-Mass (이론치): 834.31g/mol, 측정치: M+1 = 835g/mol).

[0589] 실시예 33: 화학식 A-467로 표시되는 화합물의 제조

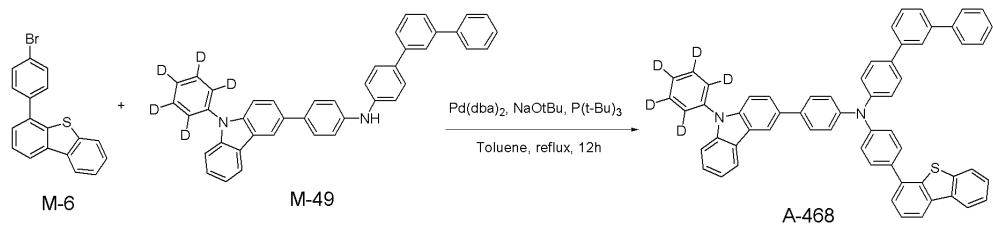


[0590]

[0591] 중간체 M-38 대신 M-49를 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-421의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-467을 9.8g(수율 88%)을 수득 하였다.

[0592] LC-Mass (이론치): 809.34g/mol, 측정치: M+1 = 810g/mol).

[0593] 실시예 34: 화학식 A-468로 표시되는 화합물의 제조

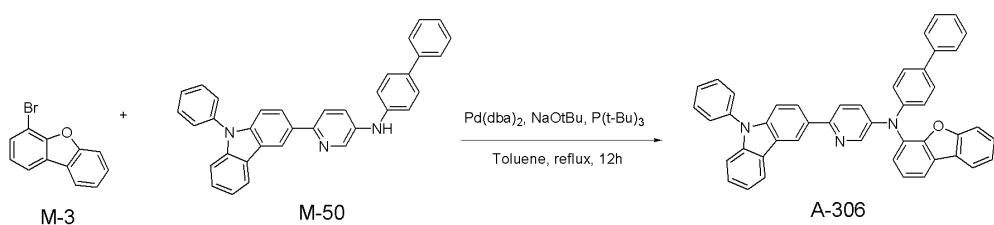


[0594]

[0595] 중간체 M-38 대신 M-49를 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-422의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-468을 흰색 고체로 9.3 g(수율 82%)을 수득 하였다.

[0596] LC-Mass (이론치): 825.32g/mol, 측정치: M+1 = 826g/mol).

[0597] 실시예 35: 화학식 A-306으로 표시되는 화합물의 제조

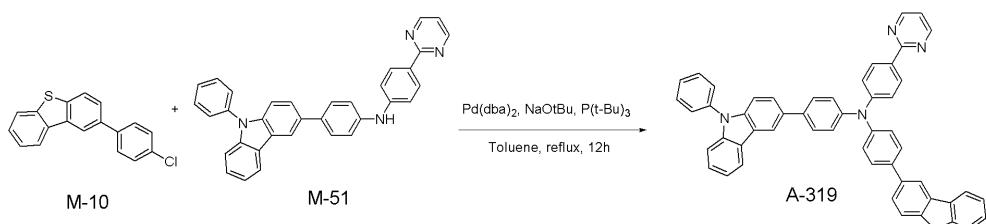


[0598]

[0599] 중간체 M-3 3.4g(13.7mmol)과 중간체 M-50 6.7g(13.7mmol), 소디움 t-부톡사이드 2.63g(27.4mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.08g(0.41mmol)을 톨루엔 137ml에 용해 시키고, Pd(dba)₂ 0.08g(0.137mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 중류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(6:4 부피비)으로 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-306를 흰색 고체로 7.0g(수율 78%)을 수득 하였다.

[0600] LC-Mass (이론치: 653.25g/mol, 측정치: M+1 = 654g/mol)

[0601] 실시예 36: 화학식 A-319로 표시되는 화합물의 제조

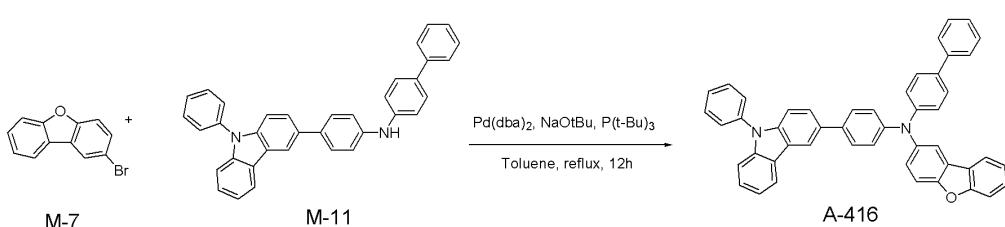


[0602]

[0603] 중간체 M-10 4.0g(13.7mmol)과 중간체 M-51 6.7g(13.7mmol), 소디움 t-부톡사이드 2.63g(27.4mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.08g(0.41mmol)을 톨루엔 137ml에 용해 시키고, Pd(dba)₂ 0.08g(0.137mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 중류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(6:4 부피비)으로 실리카겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-306를 흰색 고체로 8.4g(수율 82%)을 수득 하였다.

[0604] LC-Mass (이론치: 746.25g/mol, 측정치: M+1 = 747g/mol)

[0605] 실시예 37: 화학식 A-416으로 표시되는 화합물의 제조

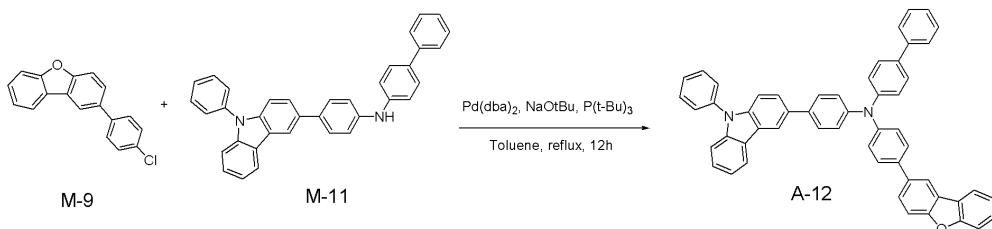


[0606]

[0607] 중간체 M-3 대신 M-7을 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-414의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-416을 흰색 고체로 11.2 g(수율 85%)을 수득 하였다.

[0608] LC-Mass (이론치: 652.25g/mol, 측정치: M+1 = 653g/mol).

[0609] 실시예 38: 화학식 A-12로 표시되는 화합물의 제조

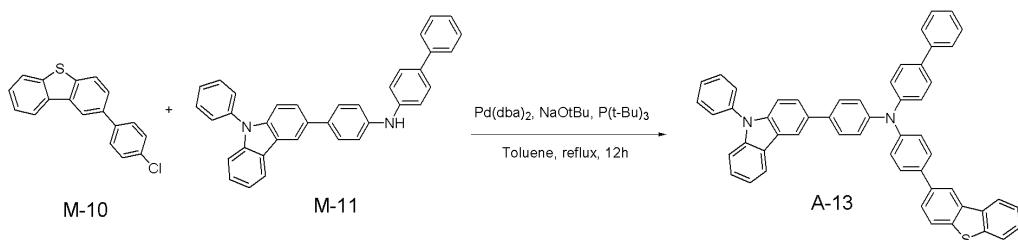


[0610]

[0611] 중간체 M-3 대신 M-9를 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-414의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-12를 흰색 고체로 12.2 g(수율 83%)을 수득 하였다.

[0612] LC-Mass (이론치): 728.28g/mol, 측정치: M+1 = 729g/mol).

[0613] 실시예 39: 화학식 A-13으로 표시되는 화합물의 제조



[0614]

[0615] 중간체 M-3 대신 M-10을 사용한 것을 제외하고, 화합물 A-414의 제조 방법과 동일한 방법으로 화합물 A-13을 흰색 고체로 12.8 g(수율 85%)을 수득 하였다.

[0616] LC-Mass (이론치): 744.26g/mol, 측정치: M+1 = 745g/mol).

[0617] 실시예 40: 화학식 A-396으로 표시되는 화합물의 제조

[0618] 중간체 M-5 4.4g(13.7mmol)과 중간체 M-52 5.7g(13.7mmol), 소디움 t-부톡사이드 2.63g(27.4mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.08g(0.41mmol)을 톨루엔 137m1에 용해 시키고, Pd(dba)₂ 0.08g(0.137mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 중류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(6:4 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-396을 흰색 고체로 7.2g(수율 80%)을 수득 하였다.

[0619] LC-Mass (이론치): 654.23g/mol, 측정치: M+1 = 655g/mol)

[0620] (유기발광소자의 제조)

[0621] 실시예 41

[0622] ITO (Indium tin oxide)가 1500Å 두께가 박막 코팅된 유리 기판을 중류수 초음파로 세척하였다. 중류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송 시킨 다음 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정 한 후 진공 충착기로 기판을 이송하였다. 이렇게 준비된 ITO 투명 전극을 양극으로 사용하여 ITO 기판 상부에 4,4'-bis[N-[4-(N,N-bis(3-methylphenyl)amino)-phenyl]-N-phenylamino]biphenyl (DNTPD)를 진공 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성하였다. 이어서 실시예 4에서 제조된 화합물을 사용하여 진공 증착으로 300Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다. 상기 정공 수송층 상부에 9,10-di-(2-naphthyl)anthracene(ADN)을 호스트로 사용하고 도판트로 2,5,8,11-

tetra(tert-butyl)perylene(TBPe)를 3중량%로 도핑하여 진공 증착으로 250Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[0623] 그 후 상기 발광층 상부에 Alq3를 진공 증착하여 250Å 두께의 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 LiF 10Å과 Al 1000Å을 순차적으로 진공 증착하여 음극을 형성함으로써 유기발광소자를 제조하였다.

[0624] 상기 유기발광소자는 5층의 유기박막층을 가지는 구조로 되어 있으며, 구체적으로

[0625] Al(1000Å)/LiF(10Å)/Alq3(250Å)/EML[ADN:TBPe=97:3](250Å)/HTL(300Å)/DNTPD(600Å)/ITO(1500Å)의 구조로 제작하였다.

[0626] 실시예 42

[0627] 상기 실시예 41에서, 실시예 4 대신 실시예 5를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0628] 실시예 43

[0629] 상기 실시예 41에서, 실시예 4 대신 실시예 6를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0630] 실시예 44

[0631] 상기 실시예 41에서, 실시예 4 대신 실시예 7을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0632] 실시예 45

[0633] 상기 실시예 41에서, 실시예 4 대신 실시예 9를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0634] 실시예 46

[0635] 상기 실시예 41에서, 실시예 4 대신 실시예 10을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0636] 실시예 47

[0637] 상기 실시예 41에서, 실시예 4 대신 실시예 38을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0638] 실시예 48

[0639] 상기 실시예 41에서, 실시예 4 대신 실시예 39를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0640] 비교예 1

[0641] 상기 실시예 41에서, 실시예 4 대신 NPB를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다. 상기 NPB의 구조는 하기에 기재되어 있다.

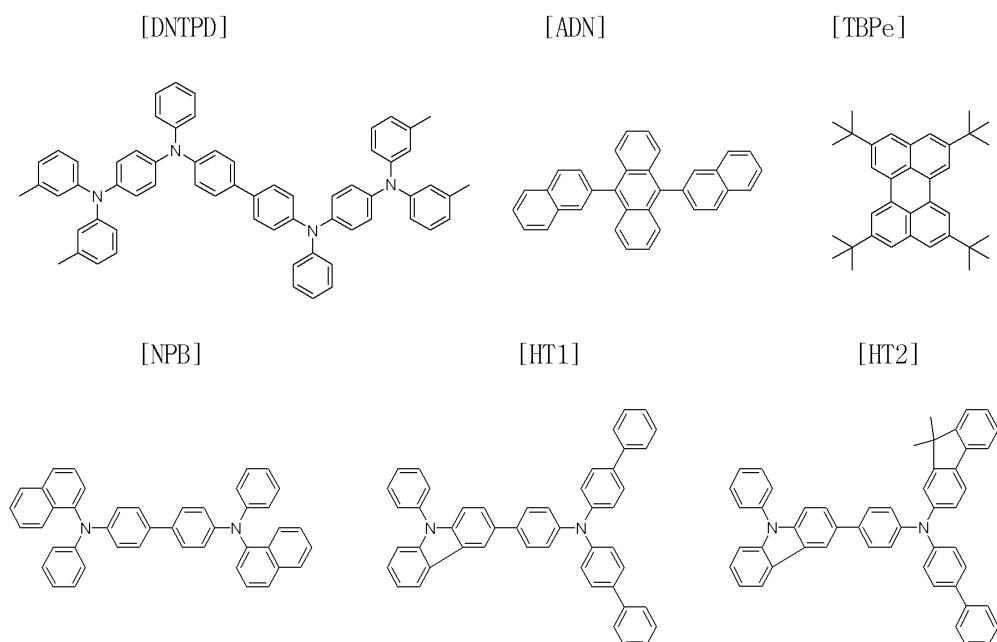
[0642] **비교예 2**

[0643] 상기 실시예 41에서, 실시예 4 대신 HT1을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다. 상기 HT1의 구조는 하기에 기재되어 있다.

[0644] **비교예 3**

[0645] 상기 실시예 41에서, 실시예 4 대신 HT2를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다. 상기 HT2의 구조는 하기에 기재되어 있다.

[0646] 상기 유기발광소자 제작에 사용된 DNTPD, ADN, TBPe, NPB, HT1 및 HT2의 구조는 아래와 같다.



[0647]

[0648] (제조된 화합물의 분석 및 특성 측정)

[0649] ¹H-NMR 결과 분석

[0650] 상기 중간체 M-1 내지 M-42 화합물 및 실시예 1 내지 40의 구조 분석을 위해 GC-MS 또는 LC-MS를 이용하여 분자량을 측정하였고, 또한 CD₂Cl₂용매 또는 CDCl₃용매에 녹인 다음 300MHz NMR 장비를 이용하여 ¹H-NMR을 측정하였다.

[0651] 상기 분석의 일 예로 실시예 1인 A-414에 대한 ¹H-NMR 결과는 도 6에 나타내었고, 실시예 2인 A-415에 대한 결과는 도 7에, 실시예 3인 A-9에 대한 결과는 도 8에, 실시예 4인 A-10에 대한 결과는 도 9에, 실시예 5인 A-11에 대한 결과는 도 10에, 실시예 6인 A-18에 대한 결과는 도 11에, 실시예 7인 A-19에 대한 결과는 도 12에, 실시예 27인 A-469에 대한 결과는 도 13에, 실시예 28인 A-470에 대한 결과는 도 14에, 실시예 29인 A-457에 대한 결과는 도 15에, 실시예 37인 A-416에 대한 결과는 도 16에, 실시예 38인 A-12에 대한 결과는 도 17에, 실시예 39인 A-13에 대한 결과는 도 18에 나타내었다.

[0652] 형광 특성 분석

[0653] 상기 실시예의 형광 특성을 측정하기 위해서 실시예 화합물을 THF에 녹인 후 HITACHI F-4500을 이용하여

PL(photoluminescence) 광장을 측정하였다. 상기 실시예 3, 4 및 5에 대한 PL 광장 측정 결과를 도 19에 나타내었다.

[0654] 전기화학적 특성

[0655] 상기 실시예 1, 2, 3, 4 및 5의 전기화학적 특성을 사이클릭볼타메트리 (cyclic-voltammetry) 장비를 이용하여 측정하였으며, 그 값을 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

합성예	실시예 1 (A-414)	실시예 2 (A-415)	실시예 3 (A-9)	실시예 4 (A-10)	실시예 5 (A-11)
HOMO (eV)	5.24	5.23	5.23	5.22	5.27
LUMO (eV)	2.16	2.17	2.16	2.15	2.17
Band gap(eV)	3.08	3.06	3.07	3.07	3.10

[0657] 상기 표 1을 참조 하면, 상기 실시예 1, 2, 3, 4 및 5의 화합물은 정공 전달층 및 전자 차단층으로 사용될 수 있음을 알 수 있다.

[0658] 열적 특성

[0659] 상기 실시예 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 27, 28, 29, 37, 38 및 39에서 합성한 화합물에 대한 열적 특성을 나타내기 위해 열중량분석법(TGA)을 이용하여 열분해 온도를 측정하였으며, 시차주사열량계(DSC)를 이용하여 유리화전이온도(Tg) 측정하였고, 그 값을 하기 표 2에 나타내었다.

표 2

실시예	재료	열분해온도(°C)	Tg (°C)
실시예 1	A-414	485	124
실시예 2	A-415	460	133
실시예 3	A-9	475	132
실시예 4	A-10	522	128
실시예 5	A-11	532	133
실시예 6	A-18	506	137
실시예 7	A-19	520	141
실시예 27	A-469	503	122
실시예 28	A-470	511	124
실시예 29	A-457	546	125
실시예 37	A-416	449	135
실시예 38	A-12	516	125
실시예 39	A-13	531	133

[0661] 상기 표 2를 참조 하면, 상기 실시예 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 27, 28, 29, 37, 38 및 39의 화합물은 모두 400°C 이상의 열분해 온도와 90°C 이상의 Tg를 나타내는 열적안정성이 우수한 화합물로서 유기전계발광소자(OLED)용 재료로 사용될 경우 장수명 특성을 나타낼 수 있고, 가열 증착 방식으로 유기전계발광소자를 제조할 경우 우수한 공정안정성이 나타낼 수 있음을 알 수 있다.

[0662] (유기발광소자의 성능 측정)

[0663] 상기 실시예 41 내지 48와 비교예 1 내지 3에서 제조된 각각의 유기발광소자에 대하여 전압에 따른 전류밀도 변화, 휘도변화 및 발광효율을 측정하였다. 구체적인 측정방법은 하기과 같고, 그 결과는 하기 표 2에 나타내었다

[0664] (1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

[0665] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0 V 부터 10 V까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 결과를 얻었다.

[0666] (2) 전압변화에 따른 휘도변화 측정

[0667] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0 V 부터 10 V까지 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 그 때의 휘도를 측정하여 결과를 얻었다.

[0668] (3) 발광효율 측정

[0669] 상기(1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도(10 mA/cm^2)의 전류 효율(cd/A)을 계산하였다.

표 3

소자	정공 수송층에 사용한 화합물	전압(V)	색(EL color)	효율(cd/A)	반감 수명(h) at $1000\text{cd}/\text{m}^2$
실시예 41	A-10	6.3	Blue	6.1	2,170
실시예 42	A-11	6.3	Blue	6.2	2,290
실시예 43	A-18	6.2	Blue	5.9	1,870
실시예 44	A-19	6.2	Blue	6.0	1,910
실시예 45	A-335	6.9	Blue	5.2	1,570
실시예 46	A-340	6.8	Blue	5.7	1,490
실시예 47	A-12	6.1	Blue	6.2	2,150
실시예 48	A-13	6.1	Blue	6.1	2,230
비교예 1	NPB	7.1	Blue	4.9	1,250
비교예 2	HT1	6.6	Blue	5.7	1,340
비교예 3	HT2	6.4	Blue	5.9	1,350

[0671] 전류밀도: 10mA/cm^2

[0672] 상기 [표 3]의 결과에 따르면 상기 실시예 41 내지 48에서 정공 수송층에 사용된 재료의 경우, 유기발광소자의 구동전압을 낮추고, 휘도와 효율을 향상시킬 수 있다.

[0673] 또한, 상기 실시예 41 내지 48의 반감 수명은 상기 비교예 1 내지 3보다 크게 향상되었으며, 특히 상기 실시예 42의 반감수명은 2290 시간(h)으로 비교예 1의 반감수명인 1250 시간보다 1.8배 이상 향상된 것을 알 수 있다. 실제 소자의 상업화 측면에서 소자의 수명은 제품화의 가장 큰 문제 중 하나임을 고려할 때 상기 실시예들의 결과는 소자를 제품화하여 상업화하기에 충분한 것으로 판단된다.

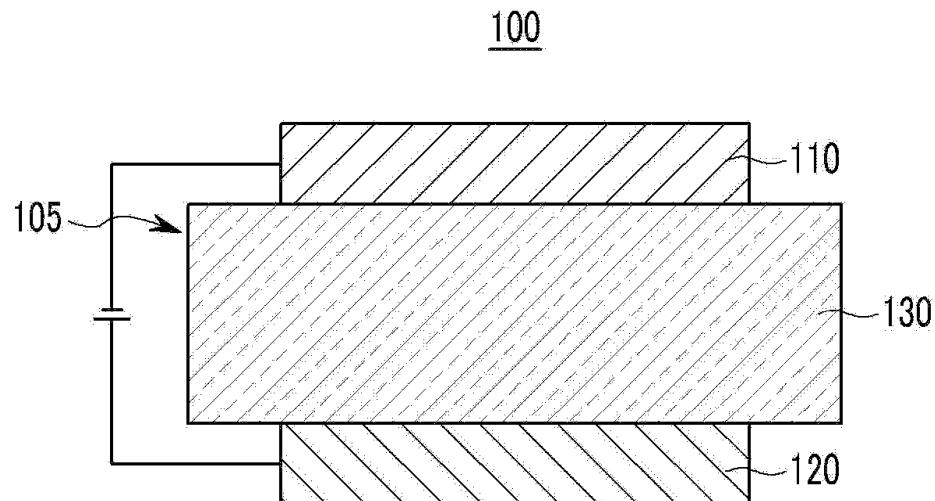
[0674] 본 발명은 상기 실시예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

부호의 설명

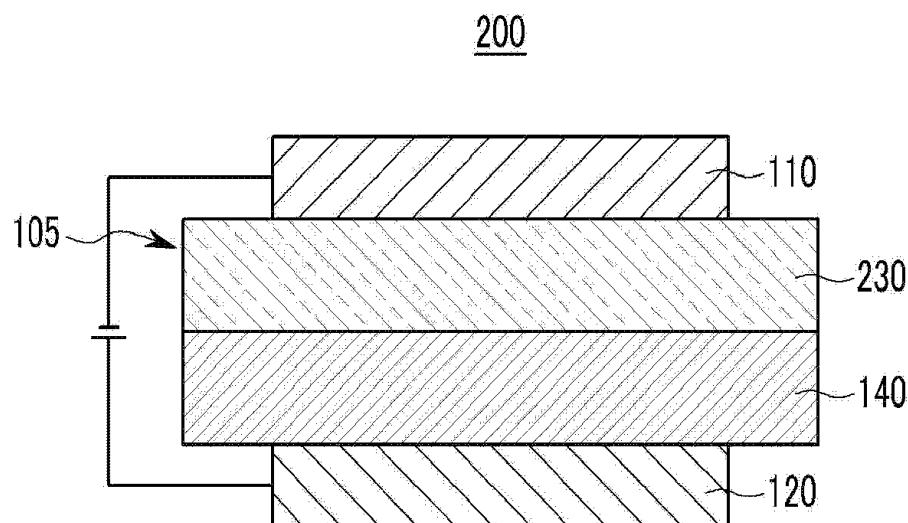
[0675] 100 : 유기광전소자	110 : 음극
120 : 양극	105 : 유기박막층
130 : 발광층	140 : 정공 수송층
150 : 전자수송층	160 : 전자주입층
170 : 정공주입층	230 : 발광층 + 전자수송층

도면

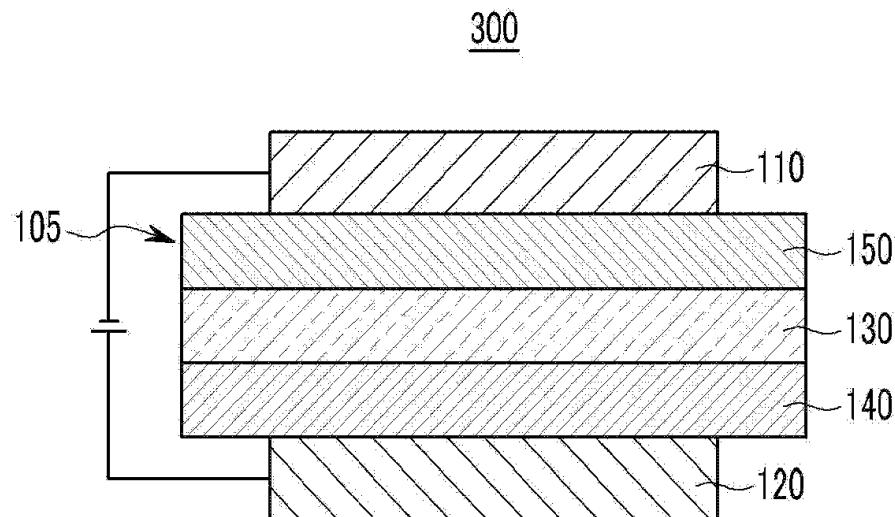
도면1



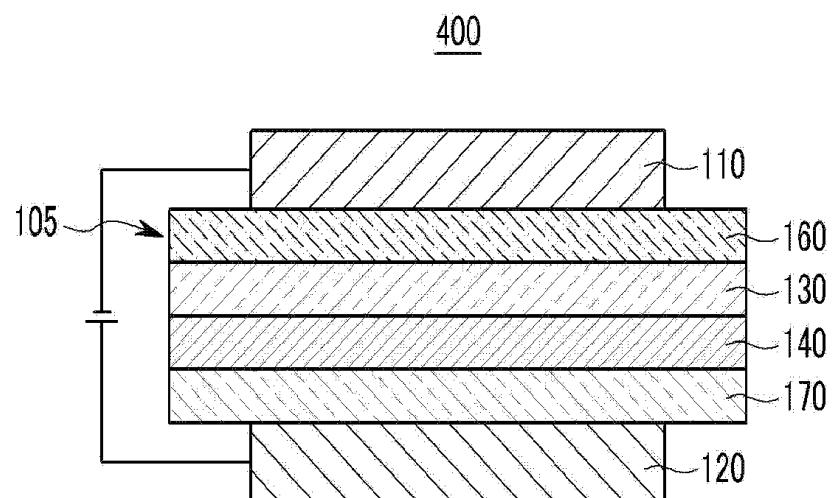
도면2



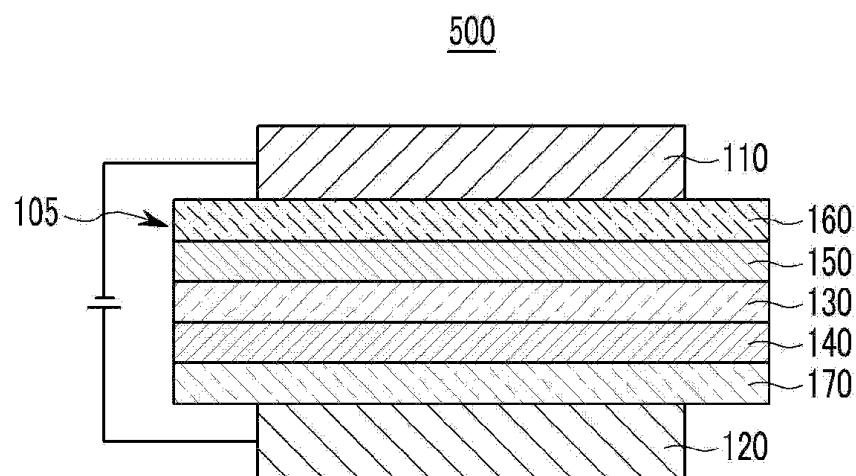
도면3



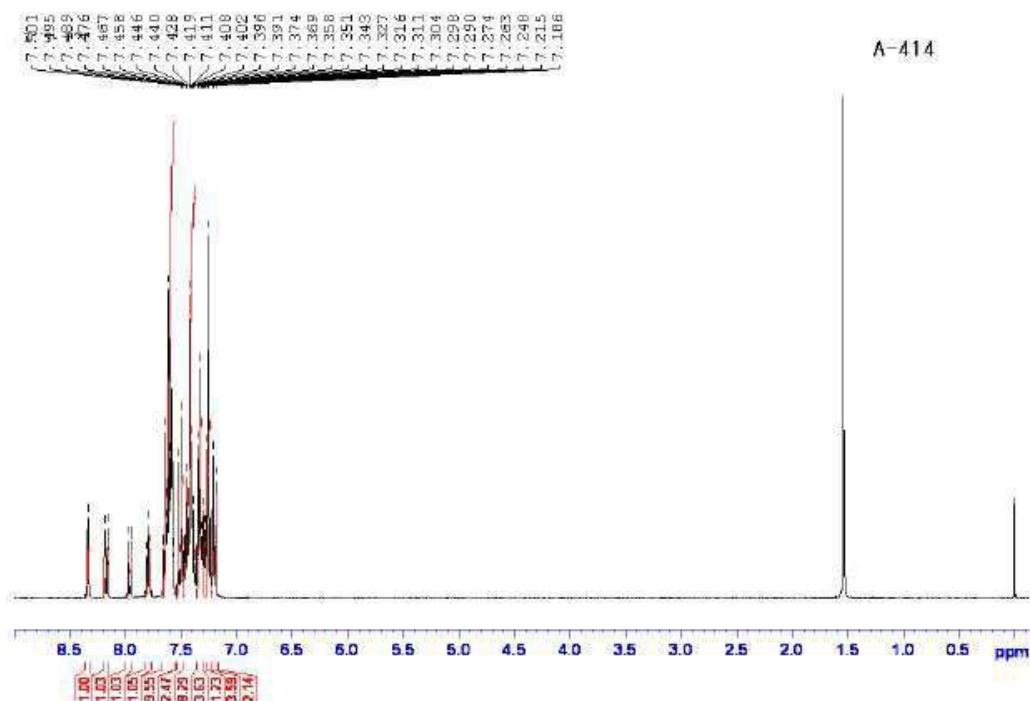
도면4



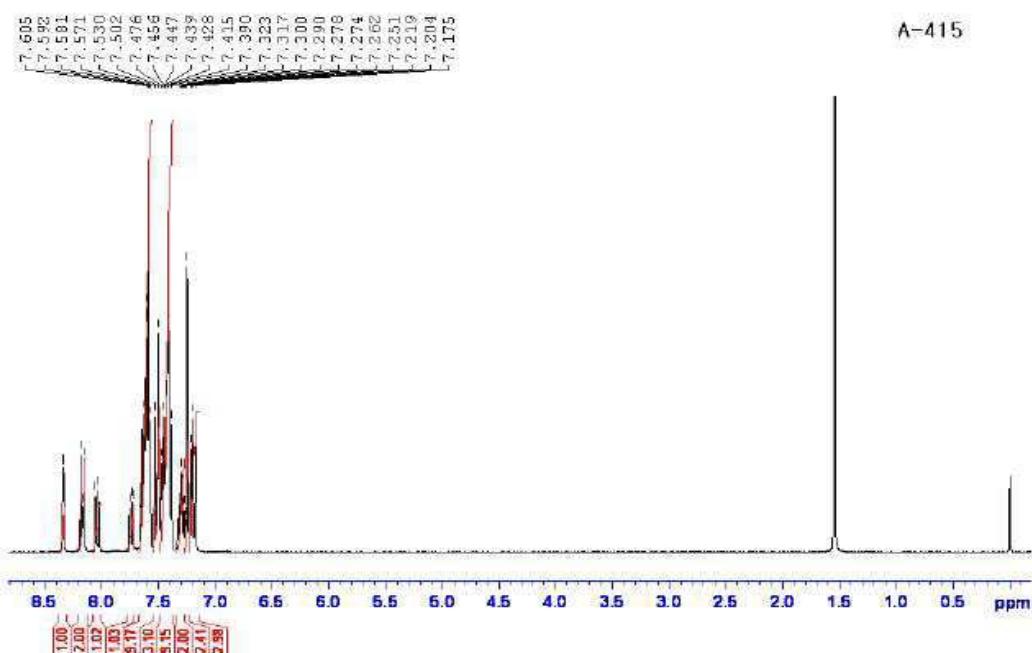
도면5



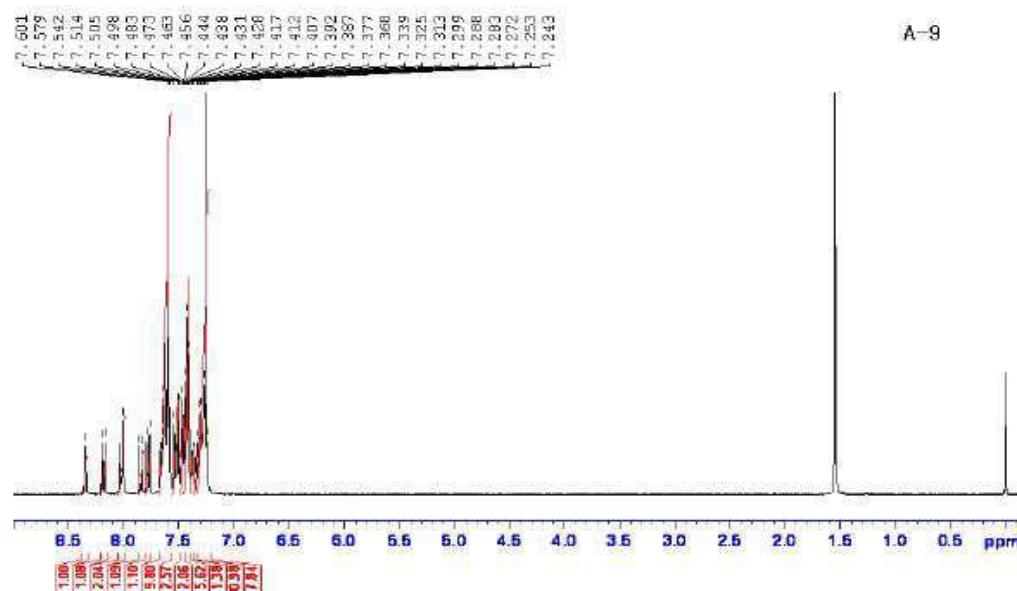
도면6



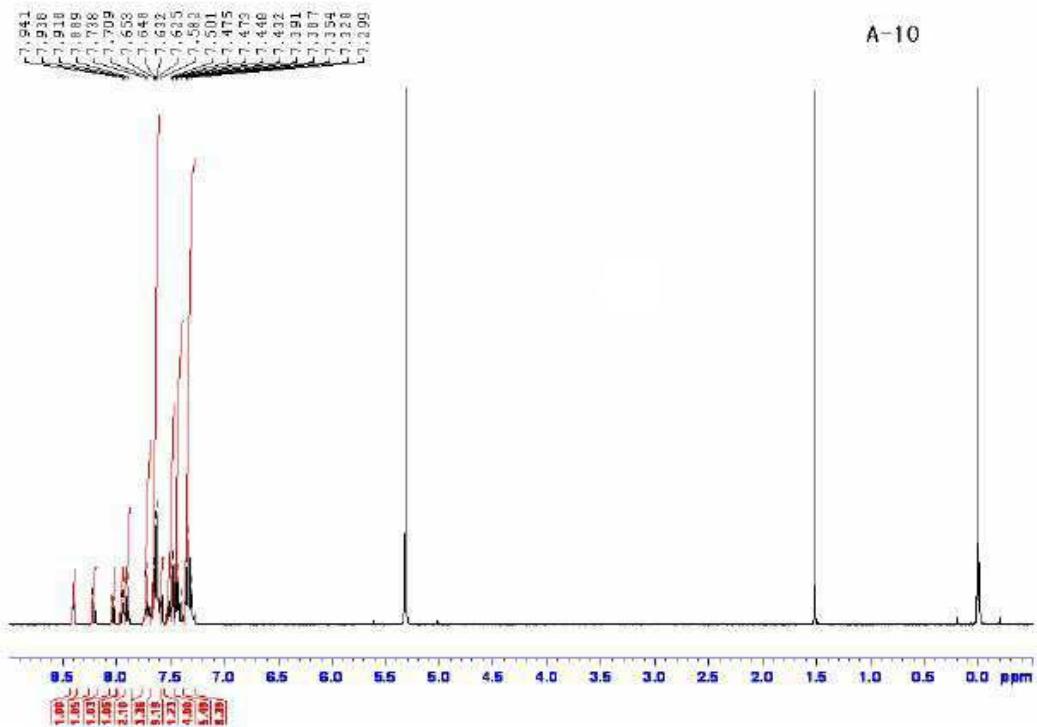
도면7



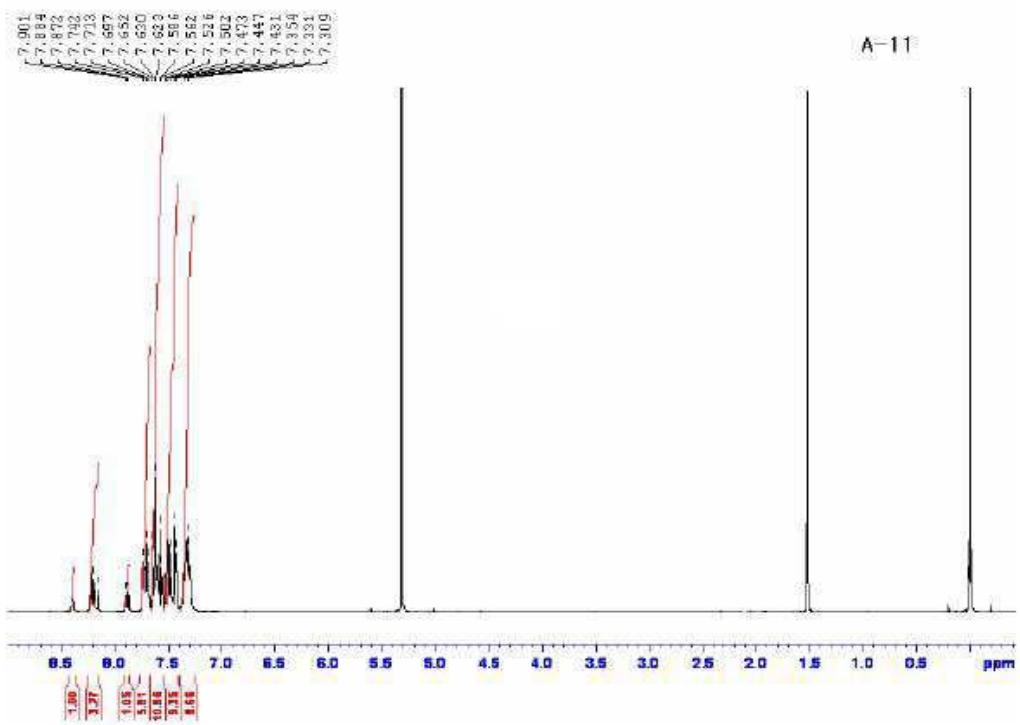
도면8



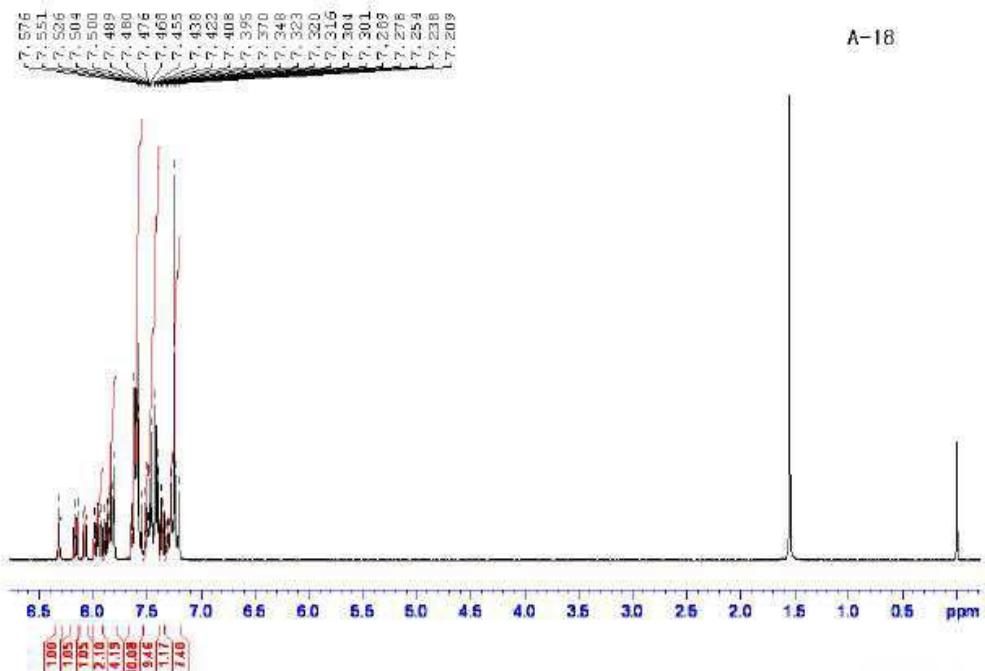
도면9



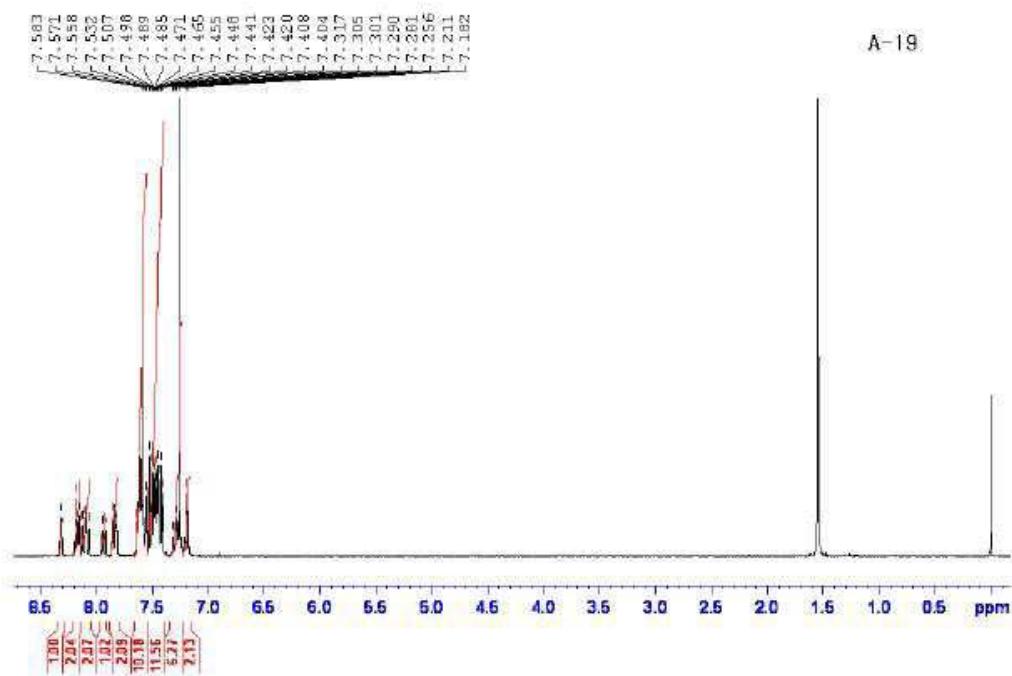
도면10



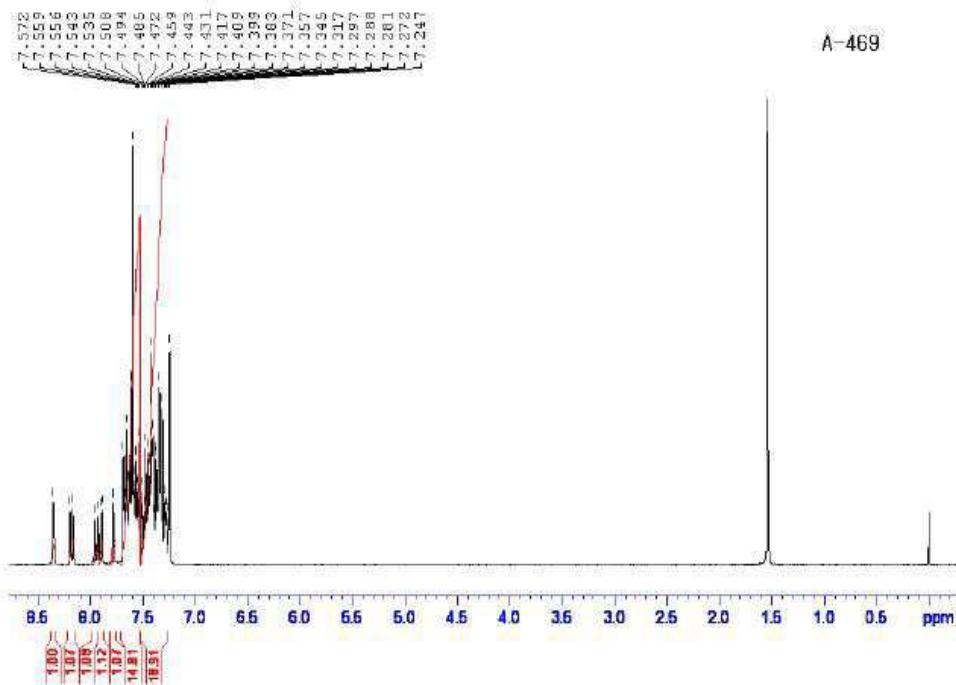
도면11



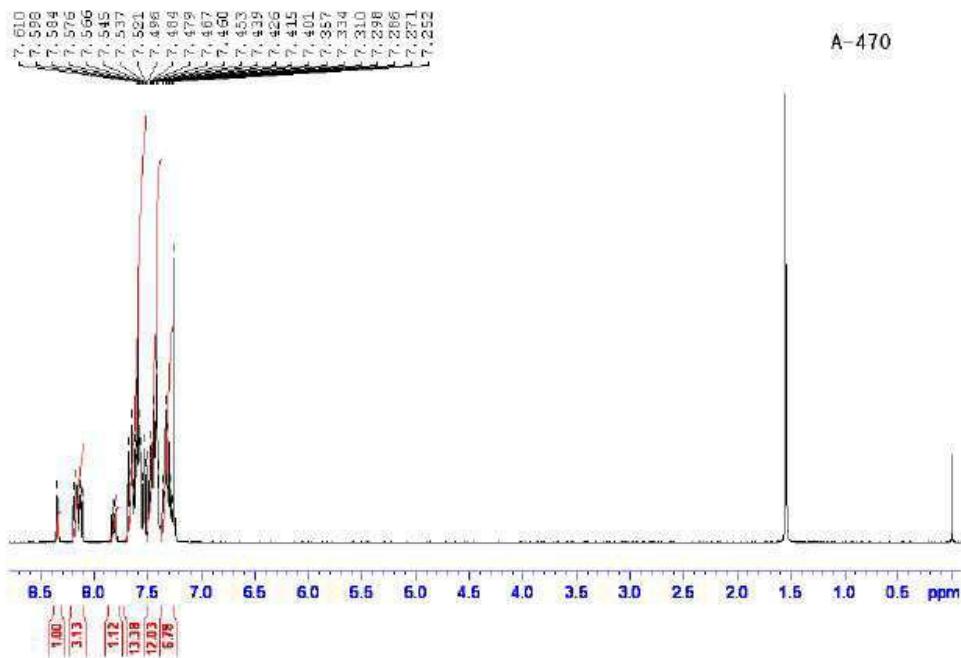
도면12



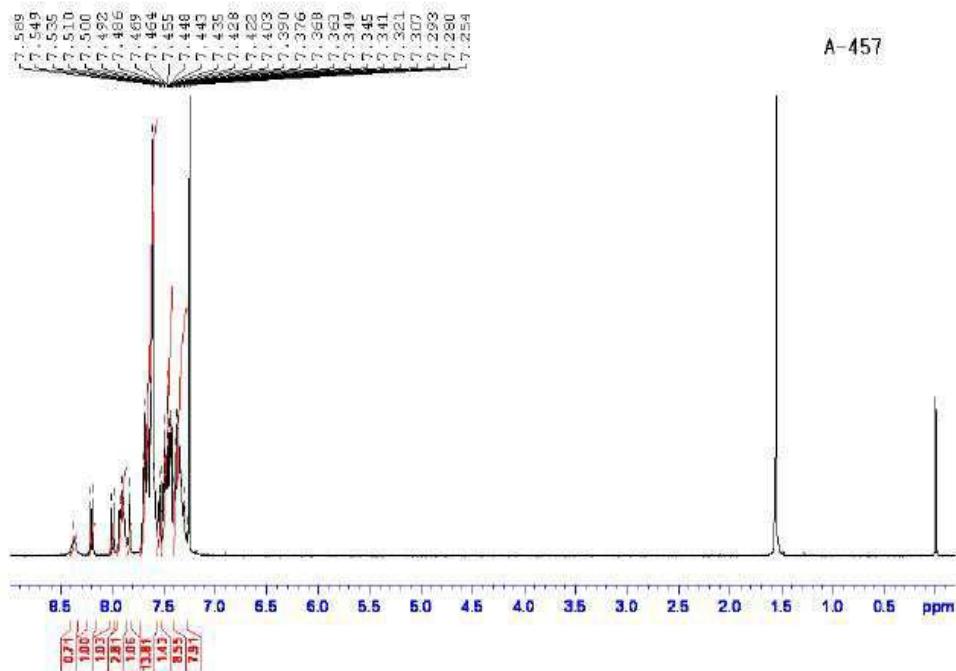
도면13



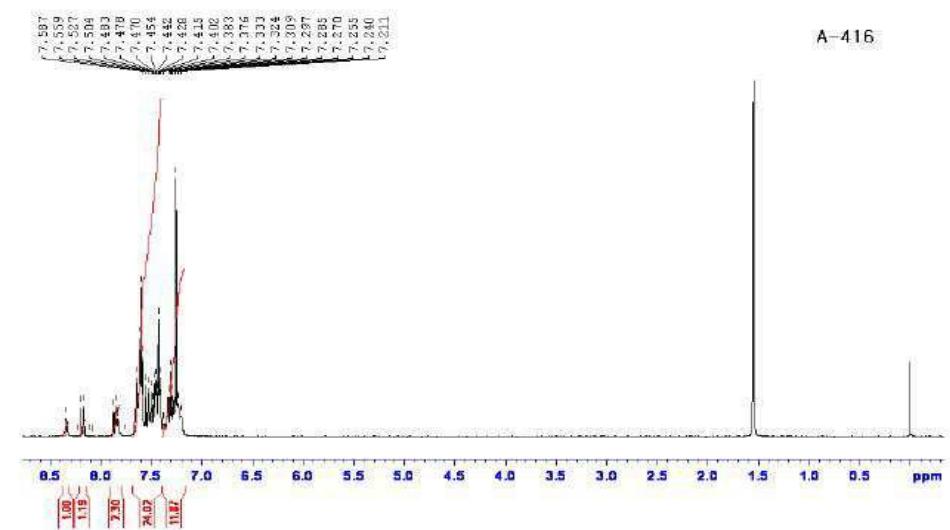
도면14



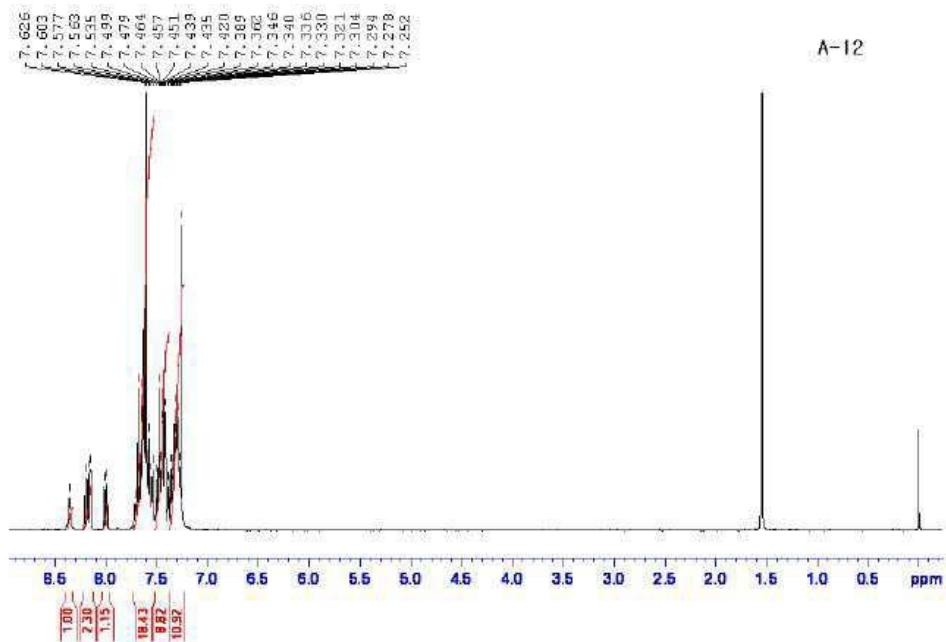
도면15



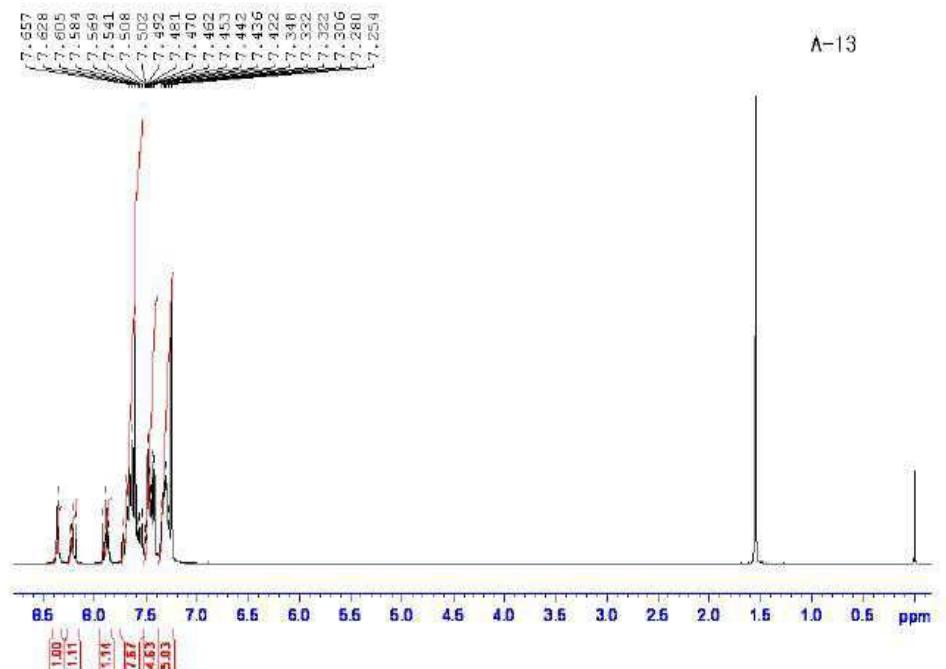
도면16



도면17



도면18



도면19

