

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구

국제사무국

(43) 국제공개일

2022년 8월 25일 (25.08.2022)



(10) 국제공개번호

WO 2022/177404 A1

(51) 국제특허분류:

C07D 403/10 (2006.01)

C07D 403/14 (2006.01)

C07D 405/14 (2006.01)

H01L 51/00 (2006.01)

C07D 409/14 (2006.01)

H01L 51/50 (2006.01)

(21) 국제출원번호:

PCT/KR2022/002578

(22) 국제출원일:

2022년 2월 22일 (22.02.2022)

(25) 출원언어:

한국어

(26) 공개언어:

한국어

(30) 우선권정보:

10-2021-0023634 2021년 2월 22일 (22.02.2021) KR

10-2022-0022275 2022년 2월 21일 (21.02.2022) KR

(71) 출원인: 주식회사 엘지화학 (LG CHEM, LTD.) [KR/KR]; 07336 서울특별시 영등포구 여의대로 128, Seoul (KR).

(72) 발명자: 정민우 (JUNG, Min Woo); 34122 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이동훈 (LEE, Dong Hoon); 34122 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 서상덕 (SUH, Sang Duk); 34122 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이정하 (LEE, Jung-ha); 34122 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 한수진 (HAN, Su Jin); 34122 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 박슬찬 (PARK, Seulchan); 34122 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 황성현 (HWANG, Sunghyun); 34122 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR).

(74) 대리인: 유미특허법인 (YOU ME PATENT AND LAW FIRM); 06134 서울특별시 강남구 테헤란로 115, Seoul (KR).

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

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

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

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))

(54) Title: NOVEL COMPOUND, AND ORGANIC LIGHT-EMITTING DEVICE USING SAME

(54) 발명의 명칭: 신규한 화합물 및 이를 이용한 유기발광 소자

4
3
2
1

(57) Abstract: The present invention provides a novel compound, and an organic light-emitting device using same.

(57) 요약서: 본 발명은 신규한 화합물 및 이를 이용한 유기발광 소자를 제공한다.



WO 2022/177404 A1

명세서

발명의 명칭: 신규한 화합물 및 이를 이용한 유기발광 소자

기술분야

- [1] 관련 출원(들)과의 상호 인용
- [2] 본 출원은 2021년 2월 22일자 한국 특허 출원 제10-2021-0023634호 및 2022년 2월 21일자 한국 특허 출원 제10-2022-0022275호에 기초한 우선권의 이익을 주장하며, 해당 한국 특허 출원들의 문헌에 개시된 모든 내용은 본 명세서의 일부로서 포함된다.
- [3]
- [4] 본 발명은 신규한 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.
- [5]

배경기술

- [6] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기 발광 소자는 넓은 시야각, 우수한 콘트라스트, 빠른 응답 시간을 가지며, 휘도, 구동 전압 및 응답 속도 특성이 우수하여 많은 연구가 진행되고 있다.
- [7]
- [8] 유기 발광 소자는 일반적으로 양극과 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 상기 유기물층은 유기 발광 소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다. 이러한 유기 발광 소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다.
- [9]
- [10] 상기와 같은 유기 발광 소자에 사용되는 유기물에 대하여 새로운 재료의 개발이 지속적으로 요구되고 있다.
- [11]
- [12] [선행기술문헌]
- [13] [특허문헌]
- [14] (특허문헌 0001) 한국특허 공개번호 제10-2000-0051826호
- [15]

발명의 상세한 설명

기술적 과제

- [16] 본 발명은 신규한 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

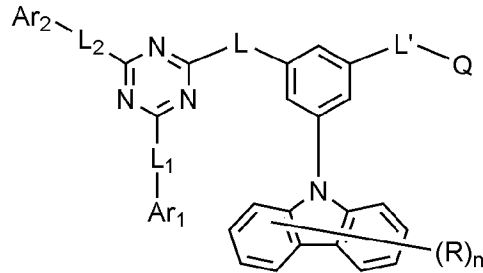
[17]

과제 해결 수단

[18] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다:

[19] [화학식 1]

[20]



[21] 상기 화학식 1에서,

[22] L은 단일 결합; 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴렌; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C₂₋₆₀ 헤테로아릴렌이고,[23] L₁ 및 L₂는 각각 독립적으로 단일 결합; 또는 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴렌이고,[24] Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C₂₋₆₀ 헤테로아릴이고,[25] L'는 단일 결합; 또는 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴렌이고,[26] Q는 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴이고,

[27] R은 중수소; 또는 중수소로 치환된 페닐이고,

[28] n은 1 내지 8의 정수이다.

[29]

[30] 또한, 본 발명은 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는, 유기 발광 소자를 제공한다.

발명의 효과

[31] 상술한 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있으며, 유기 발광 소자에서 효율의 향상, 낮은 구동전압 및/또는 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

[32]

도면의 간단한 설명

[33] 도 1은 기판(1), 양극(2), 발광층(3) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

[34] 도 2는 기판(1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 전자저지층(7), 발광층(3), 전자수송층(8), 전자주입층(9) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.

[35]

발명의 실시를 위한 형태

[36] 이하, 본 발명의 이해를 돕기 위하여 보다 상세히 설명한다.

[37]

[38] (용어의 정의)

[39] 본 명세서에서,  및 는 다른 치환기에 연결되는 결합을 의미한다.

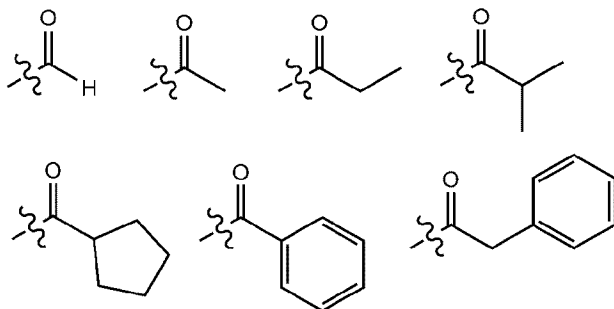
[40]

[41] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 중수소, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 히드록시기, 카보닐기, 에스테르기, 이미드기, 아미노기, 포스포늄옥사이드기, 알콕시기, 아릴옥시기, 알킬티옥시기, 아릴티옥시기, 알킬술폰시기, 아릴술폰시기, 실릴기, 붕소기, 알킬기, 사이클로알킬기, 알케닐기, 아릴기, 아르알킬기, 아르알케닐기, 알킬아릴기, 알킬아민기, 아랄킬아민기, 헤테로아릴아민기, 아릴아민기, 아릴포스핀기, 또는 N, O 및 S 원자 중 1개 이상을 포함하는 헤테로아릴로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되거나; 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환 또는 비치환된 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 비페닐기일 수 있다. 즉, 비페닐이기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수도 있다. 일례로, "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 "비치환되거나, 또는 중수소, 할로젠, C₁₋₁₀ 알킬, C₁₋₁₀ 알콕시 및 C₆₋₂₀ 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상, 예를 들어 1개 내지 5개의 치환기로 치환된"이라는 의미로 이해될 수 있다. 또한, 본 명세서에서 "1개 이상의 치환기로 치환된"이라는 용어는, 예를 들어 "1개 내지 5개의 치환기로 치환된", 또는 "1개 또는 2개의 치환기로 치환된"이라는 의미로 이해될 수 있다.

[42]

[43] 본 명세서에서 카보닐기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 40인 것이 바람직하다. 구체적으로 하기와 같은 구조의 치환기가 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[44]

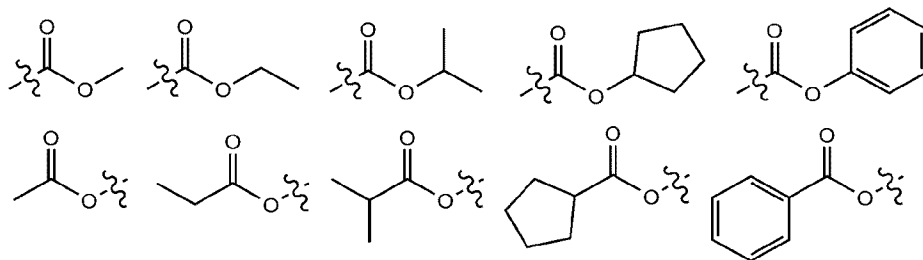


[45]

[46] 본 명세서에 있어서, 에스테르기는 에스테르기의 산소가 탄소수 1 내지 25의 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄 알킬기 또는 탄소수 6 내지 25의 아릴기로 치환될 수

있다. 구체적으로, 하기 구조식의 치환기가 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

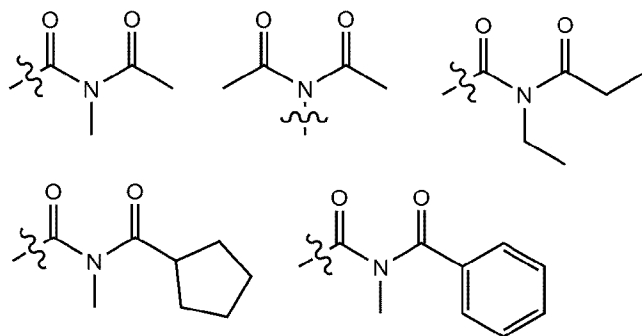
[47]



[48]

[49] 본 명세서에 있어서, 이미드기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 25인 것이 바람직하다. 구체적으로 하기와 같은 구조의 치환기가 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[50]



[51]

[52] 본 명세서에 있어서, 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.

[53]

[54] 본 명세서에 있어서, 붕소기는 구체적으로 트리메틸붕소기, 트리에틸붕소기, t-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.

[55]

[56] 본 명세서에 있어서, 할로젠기의 예로는 플루오로, 클로로, 브로모, 또는 아이오도가 있다.

[57]

[58] 본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 40인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 10이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, n-프로필, 이소프로필, 부틸, n-부틸, 이소부틸, tert-부틸, sec-부틸, 1-메틸-부틸, 1-에틸부틸, 펜틸, n-펜틸, 이소펜틸,

네오펜틸, tert-펜틸, 1-에틸-프로필, 1,1-디메틸프로필, 헥실, n-헥실, 1-메틸펜틸, 2-메틸펜틸, 4-메틸-2-펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, 헵틸, n-헵틸, 이소헥실, 1-메틸헥실, 2-메틸헥실, 3-메틸헥실, 4-메틸헥실, 5-메틸헥실, 사이클로펜틸메틸, 사이클로헥실메틸, 옥틸, n-옥틸, tert-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헥실, 2,4,4-트리메틸-1-펜틸, 2,4,4-트리메틸-2-펜틸, 2-프로필펜틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[59]

[60] 본 명세서에 있어서, 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 내지 40인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 10이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 6이다. 구체적인 예로는 비닐, 1-프로페닐, 이소프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 1-펜테닐, 2-펜테닐, 3-펜테닐, 3-메틸-1-부테닐, 1,3-부타디에닐, 알릴, 1-페닐비닐-1-일, 2-페닐비닐-1-일, 2,2-디페닐비닐-1-일, 2-페닐-2-(나프틸-1-일)비닐-1-일, 2,2-비스(디페닐-1-일)비닐-1-일, 스틸베닐기, 스티레닐기 등이 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

[61]

[62] 본 명세서에 있어서, 사이클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 일 실시상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 30이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 6이다. 구체적으로 사이클로프로필, 사이클로부틸, 사이클로펜틸, 3-메틸사이클로펜틸, 2,3-디메틸사이클로펜틸, 사이클로헥실, 3-메틸사이클로헥실, 4-메틸사이클로헥실, 2,3-디메틸사이클로헥실, 3,4,5-트리메틸사이클로헥실, 4-tert-부틸사이클로헥실, 사이클로헵틸, 사이클로옥틸 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[63]

[64] 본 명세서에 있어서, 아릴기는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 6 내지 60인 것이 바람직하며, 방향족성(aromaticity)을 갖는 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 30이다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 20이다. 상기 아릴기가 단환식 아릴기로는 페닐기, 비페닐이, 터페닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난쓰레닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[65]

[66] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴은 이종 원소로 O, N, Si 및 S 중 1개 이상을

포함하는 헤테로아릴로서, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 2 내지 60인 것이 바람직하다. 헤테로아릴의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 아크리딘기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸린기, 퀴녹살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 페난쓰롤린기(phenanthroline), 이소옥사졸릴기, 티아디아졸릴기, 페노티아지닐기 및 디벤조퓨라닐기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[67]

[68] 본 명세서에 있어서, 아르알킬기, 아르알케닐기, 알킬아릴기, 아릴아민기, 아릴실릴기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다. 본 명세서에 있어서, 아르알킬기, 알킬아릴기, 알킬아민기 중 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다. 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴아민 중 헤테로아릴은 전술한 헤테로아릴에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 아르알케닐기 중 알케닐기는 전술한 알케닐기의 예시와 같다. 본 명세서에 있어서, 아릴렌은 2가기인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴렌은 2가기인 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 탄화수소 고리는 1가기가 아니고, 2개의 치환기가 결합하여 형성한 것을 제외하고는 전술한 아릴기 또는 사이클로알킬기에 관한 설명이 적용될 수 있다. 본 명세서에 있어서, 헤테로고리는 1가기가 아니고, 2개의 치환기가 결합하여 형성한 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴에 관한 설명이 적용될 수 있다.

[69]

[70] (화합물)

[71] 한편, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[72]

[73] 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 벤젠 고리의 1번 위치에 카바졸-9-일, 3번 위치에 트리아지닐 및 5번 위치에 아릴로 각각 치환된 구조를 갖는다. 또한, 상기 화합물은 상기 디벤조퓨란/디벤조티오펜의 8번 위치의 탄소가 비치환되거나 또는 중수소로 치환된 아릴로 치환된 구조를 가질 수 있다.

[74]

특히, 상기 화합물은 상기 카바졸-9-일 치환기가 1개 이상의 중수소 또는 중수소로 치환된 페닐로 치환되면서, 벤젠 고리의 2번, 4번 및 6번 탄소는 중수소로 치환되어 있지 않는 구조를 갖는데, 이러한 화합물은 분자 내 중수소를 갖지 않는 화합물 및 벤젠 고리의 2번, 4번 및 6번 탄소 중 적어도 하나가 중수소로 치환된 화합물 대비 분자 내 전자 안정성이 증가될 수 있다. 또한, 상기 화합물이 중수소 또는 중수소로 치환된 페닐로 치환된 카바졸-9-일 구조를

가짐에 따라, C-D 결합의 결합 에너지(bond energy)가 C-H 결합의 결합 에너지보다 크다는 특성 때문에, 상기 화합물은 중수소를 갖지 않은 화합물 대비 분자 내 더 강한 결합 에너지를 갖게 되고, 이에 따라 물질 안정성이 향상될 수 있다.

[75] 따라서, 상기 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 낮은 구동 전압을 나타낼 수 있을 뿐 아니라, 수명 특성이 향상될 수 있다.

[76]

[77] 일 구현예에서, L은 단일 결합; 비치환되거나, 또는 중수소로 치환된 C_{6-20} 아릴렌; 또는 비치환되거나, 또는 중수소로 치환된 O 및 S 중 1개의 헤테로원자를 포함하는 C_{2-20} 헤테로아릴렌일 수 있다.

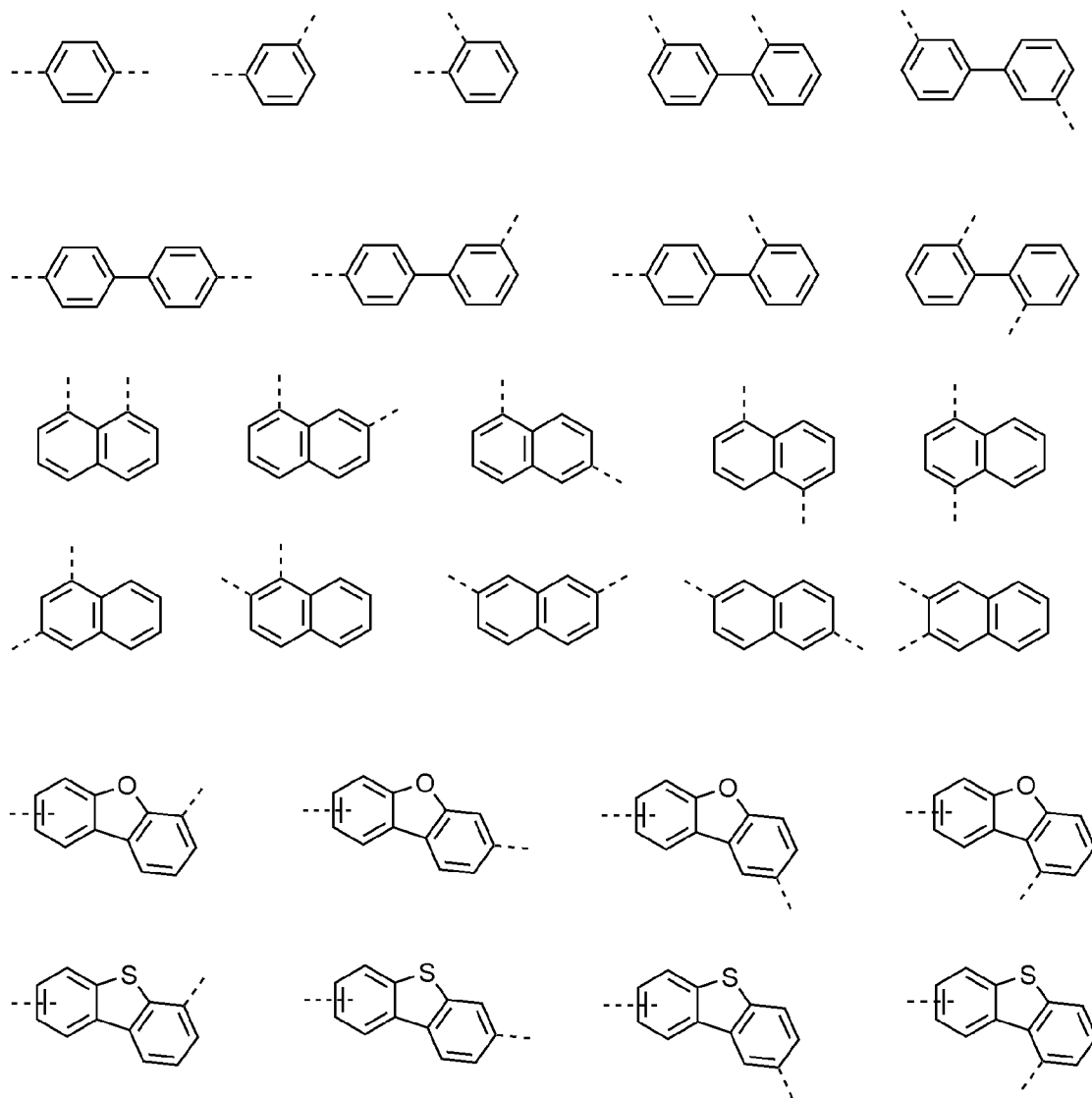
[78]

[79] 구체적으로는, L은 단일 결합, 페닐렌, 비페닐디일, 나프틸렌, 또는 디벤조퓨라닐렌, 디벤조티오펜일렌일 수 있다.

[80]

[81] 예를 들어, L은 단일 결합, 또는 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나이다:

[82]



[83]

[84] 또한, 일 구현예에서, L_1 및 L_2 는 각각 독립적으로 단일 결합, 또는 비치환되거나, 또는 중수소로 치환된 C_{6-20} 아릴렌일 수 있다.

[85] 구체적으로는, L_1 및 L_2 는 각각 독립적으로 단일 결합, 또는 페닐렌일 수 있다. 다시 말하여, L_1 및 L_2 는 각각 독립적으로 단일 결합, 1,2-페닐렌, 1,3-페닐렌, 또는 1,4-페닐렌일 수 있다.

[86]

[87] 예를 들어, L_1 및 L_2 는 모두 단일 결합이거나; 또는

[88] L_1 및 L_2 중 하나는 단일 결합이고, 나머지 하나는 1,2-페닐렌, 1,3-페닐렌, 또는 1,4-페닐렌일 수 있다.

[89] 이때, L_1 및 L_2 는 서로 동일할 수 있다. 또는 L_1 및 L_2 는 상이할 수 있다.

[90]

[91] 또한, 일 구현예에서, Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 비치환되거나, 또는 중수소,

C_{1-10} 알킬 및 C_{6-20} 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되는 C_{6-20} 아릴; 또는 비치환되거나 또는 중수소, C_{1-10} 알킬 및 C_{6-20} 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되는 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C_{2-60} 헤테로아릴일 수 있다.

[92]

[93] 구체적으로는, Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 트리페닐레닐, 플루오레닐, 디벤조퓨라닐, 디벤조티오펜, 또는 카바졸일이고,

[94] 여기서, Ar_1 및 Ar_2 는 비치환되거나, 또는 중수소, 메틸 및 페닐로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

[95]

[96] 구체적으로는, Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 트리페닐레닐, 플루오레닐, 디벤조퓨라닐, 디벤조티오펜, 또는 카바졸일이고,

[97] 여기서, Ar_1 및 Ar_2 는 비치환되거나, 또는 중수소, 메틸 및 페닐로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 내지 5개의 치환기로 치환될 수 있다.

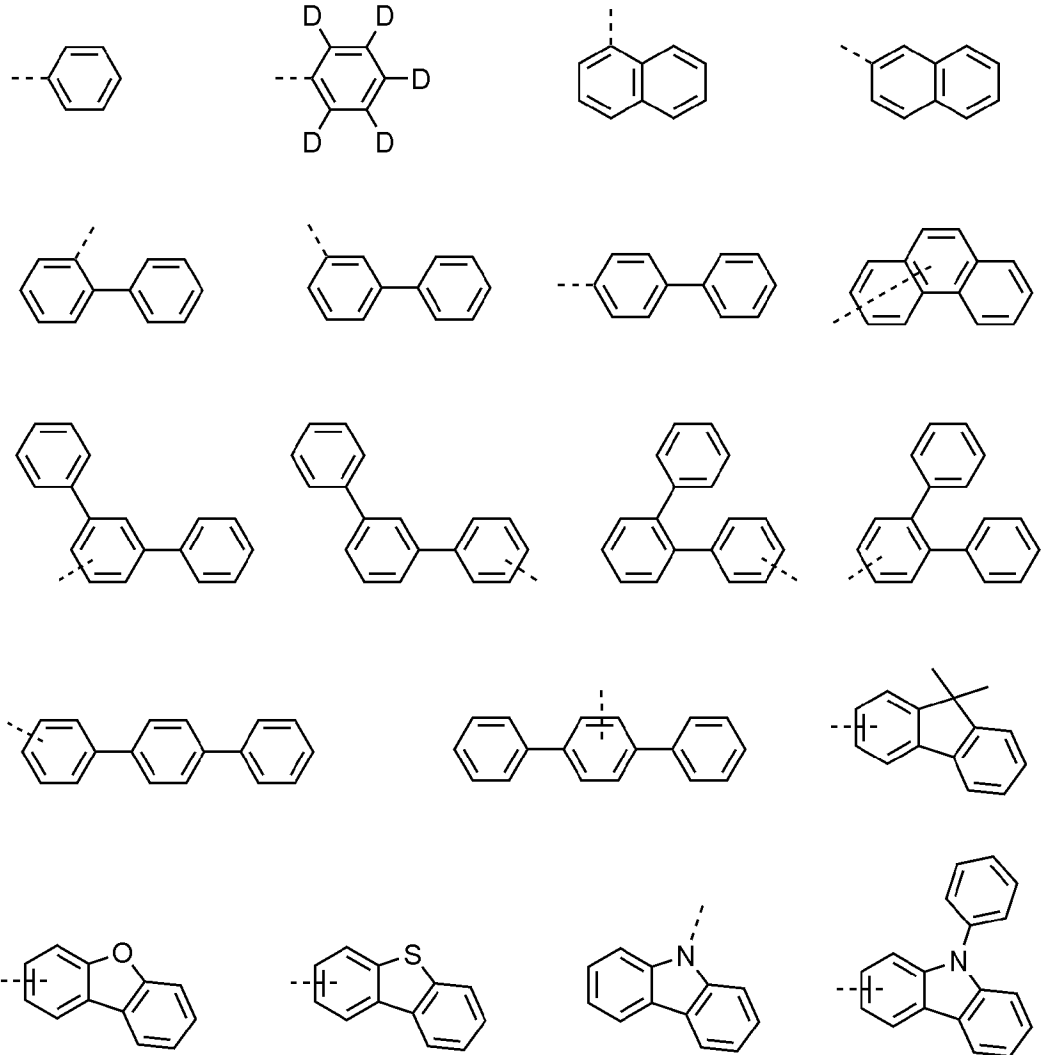
[98]

[99] 보다 구체적으로는, Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 트리페닐레닐, 9,9-디메틸플루오레닐, 디벤조퓨라닐, 디벤조티오펜, 카바졸일, 또는 9-페닐카바졸일일 수 있다.

[100]

[101] 예를 들어, Ar_1 및 Ar_2 는 각각 독립적으로 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[102]



[103]

[104]

[105] 이때, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일할 수 있다. 다르게는, Ar_1 및 Ar_2 는 상이할 수 있다.

[106]

[107] 또한 일 구현예에서, Ar_1 및 Ar_2 중 적어도 하나는 비치환되거나, 또는 중수소로 치환된 C_{6-12} 아릴일 수 있다.

[108] 예를 들어, Ar_1 및 Ar_2 중 적어도 하나는 , 또는

일 수 있다.

[109]

[110] 일 구현예에서, L이 단일 결합이 아닌 경우, Ar_1 및 Ar_2 는 모두 페닐일 수 있다.

[111]

[112] 보다 구체적으로는, L이 단일 결합이면서, Ar_1 및 Ar_2 가 각각 독립적으로 페닐,

5개의 중수소로 치환된 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 트리페닐레닐, 9,9-디메틸플루오레닐, 디벤조푸라닐, 디벤조티오펜, 카바졸일, 또는 9-페닐카바졸일이거나; 또는

[113] L이 C_{6-20} 아릴렌 또는 O 및 S 중 1개의 헤테로원자를 포함하는 C_{2-20} 헤테로아릴렌이면서, Ar_1 및 Ar_2 가 모두 페닐일 수 있다.

[114]

[115] 또한, 일 구현예에서, L'는 단일 결합, 또는 비치환되거나, 또는 중수소로 치환된 C_{6-20} 아릴렌일 수 있다.

[116] 구체적으로는, L'는 단일 결합, 또는 페닐렌일 수 있다. 다시 말하여, L'는 단일 결합, 1,2-페닐렌, 1,3-페닐렌, 또는 1,4-페닐렌일 수 있다.

[117]

[118] 또한, 일 구현예에서, Q는 비치환되거나, 또는 중수소, C_{1-10} 알킬 및 C_{6-20} 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되는 C_{6-24} 아릴일 수 있다.

[119]

[120] 구체적으로는, Q는 페닐, 비페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 트리페닐레닐, 벤조페난트릴, 또는 9,9-디메틸플루오레닐이고,

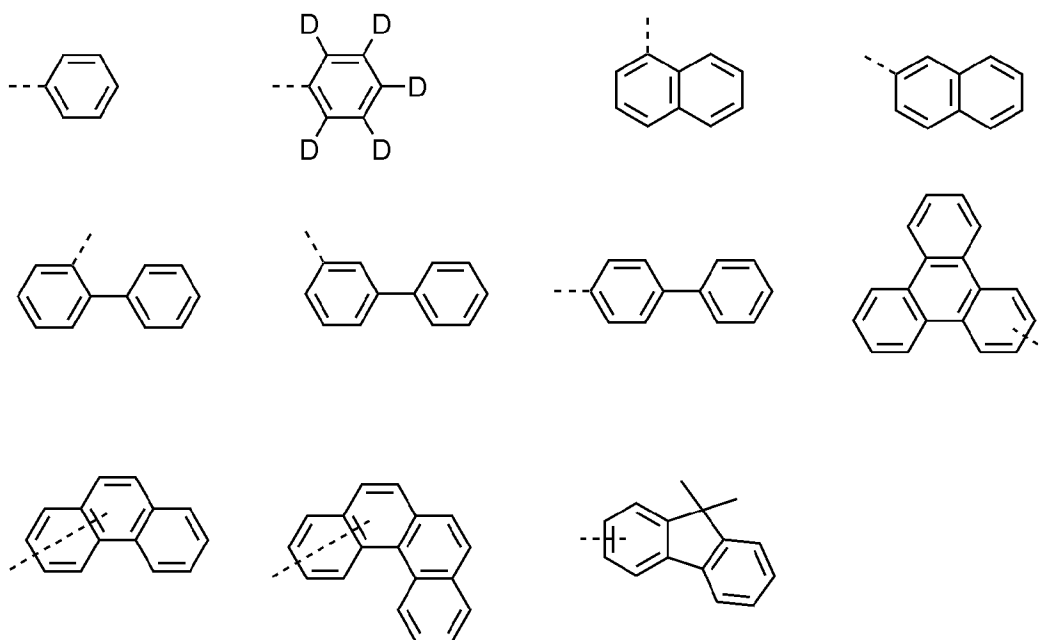
[121] 여기서, Q는 비치환되거나, 또는 중수소로 치환될 수 있다.

[122] 또는, 여기서 Q는 비치환되거나, 또는 1개 이상의 중수소로 치환될 수 있다. 보다 구체적으로는 Q는 비치환되거나, 또는 분자 내 모든 탄소가 중수소로 치환될 수 있다.

[123]

[124] 예를 들어, Q는 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

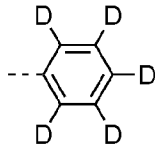
[125]



[126]

[127] 또한, 일 구현예에서, R은 중수소, 또는 1개 내지 5개의 중수소로 치환된 페닐일 수 있다.

[128] 예를 들어, R은 중수소, 또는



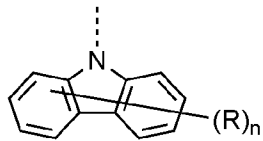
일 수 있다.

[129]

[130] 이때, n은 R의 개수를 의미하는 것으로, n이 2 이상인 경우 2개 이상의 R은 서로 동일하거나 또는 상이할 수 있다. 예를 들어, n은 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 또는 8일 수 있다.

[131]

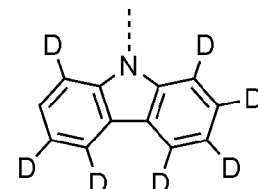
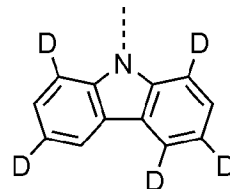
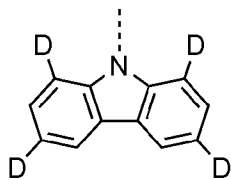
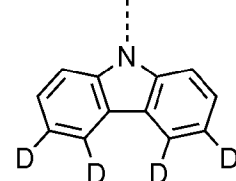
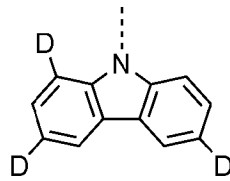
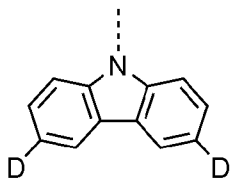
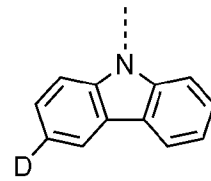
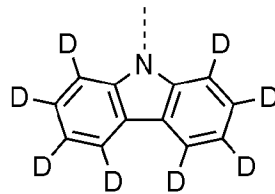
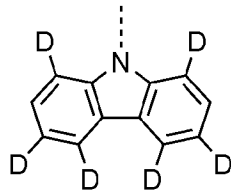
[132] 또한, 상기



는 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느

하나일 수 있다:

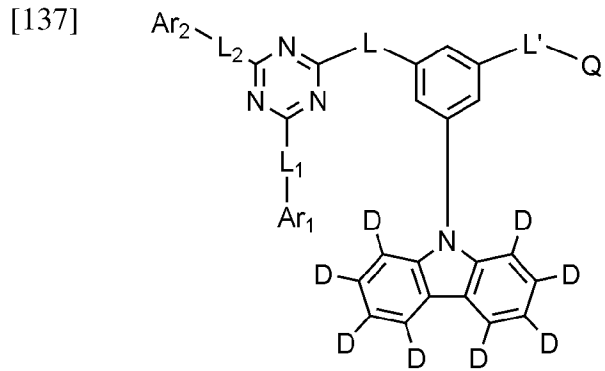
[133]



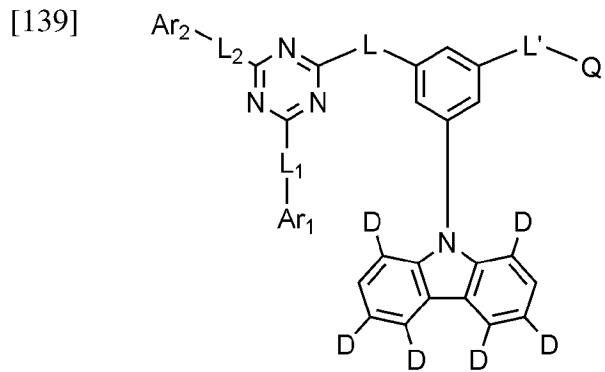
[134]

[135] 또한, 상기 화합물은 하기 화학식 1-1 내지 1-3 중 어느 하나로 표시될 수 있다:

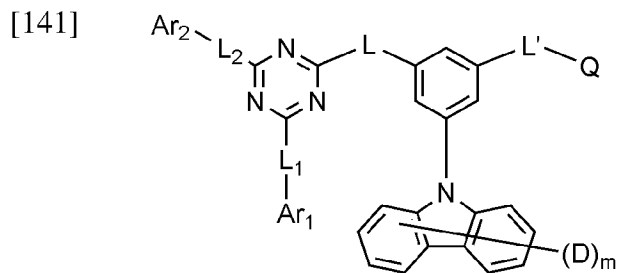
[136] [화학식 1-1]



[138] [화학식 1-2]



[140] [화학식 1-3]



[142] 상기 화학식 1-1 내지 1-3에서,

[143] D는 중수소이고,

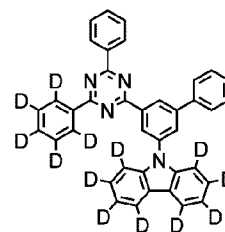
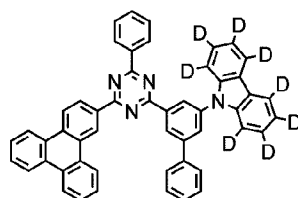
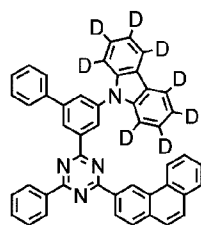
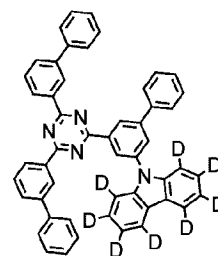
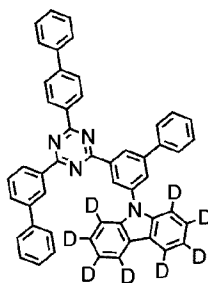
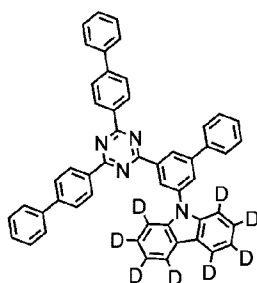
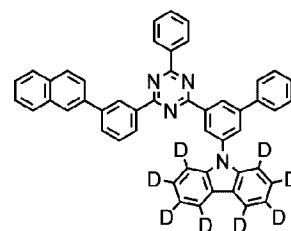
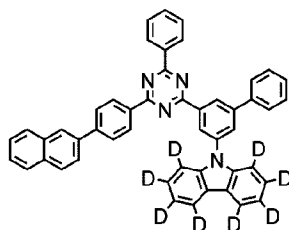
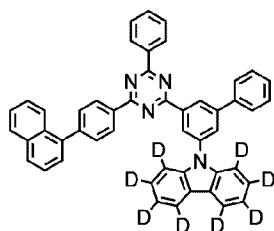
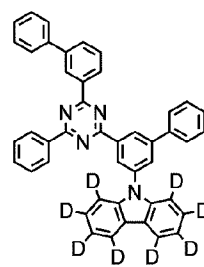
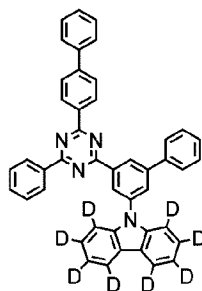
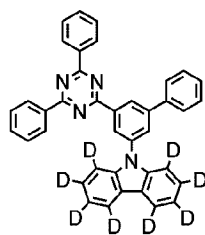
[144] m은 1, 2, 3, 4, 5, 또는 7이고,

[145] L, L₁, L₂, Ar₁, Ar₂, L' 및 Q는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

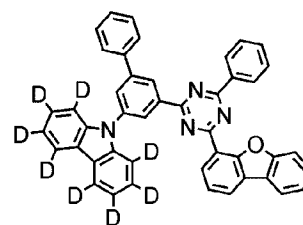
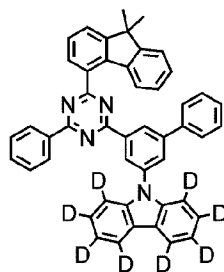
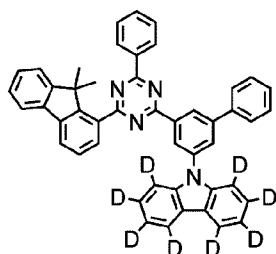
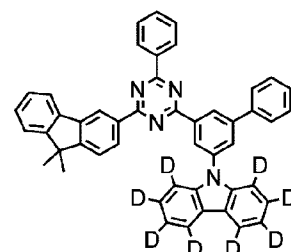
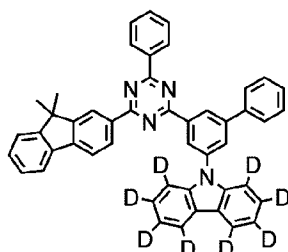
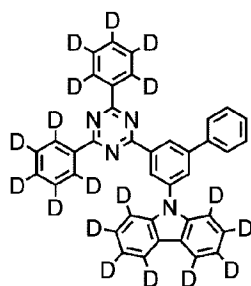
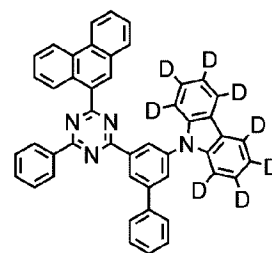
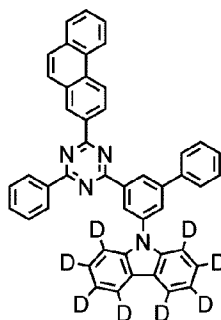
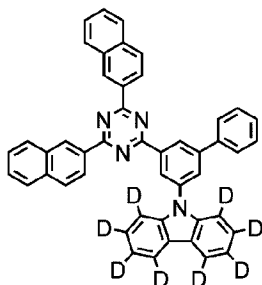
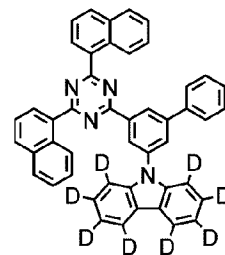
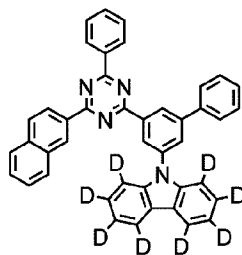
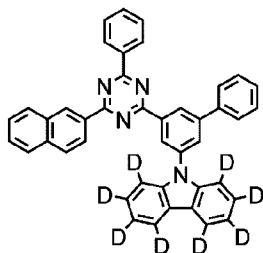
[146]

[147] 한편, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 대표적인 예는 하기와 같다:

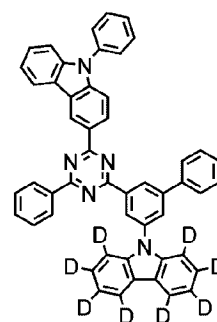
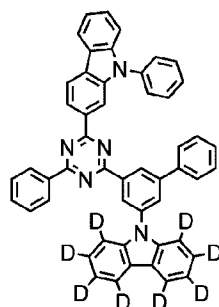
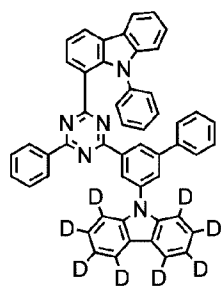
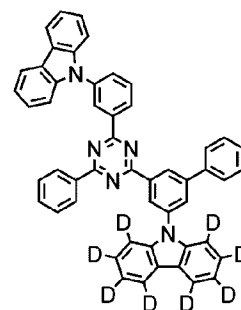
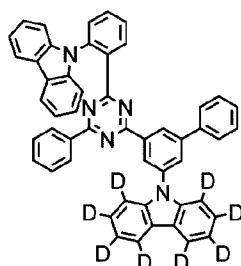
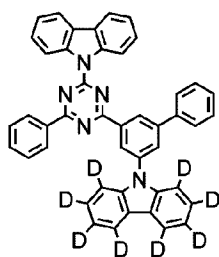
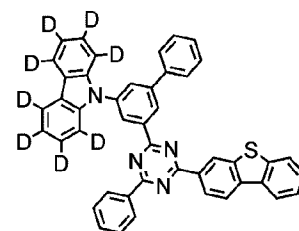
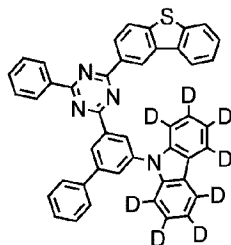
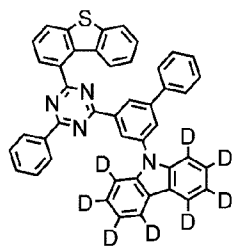
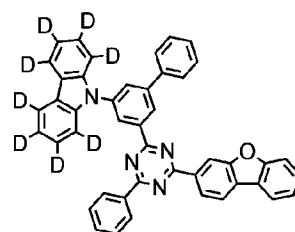
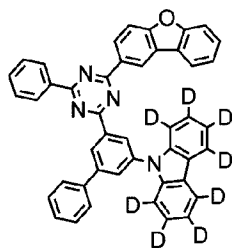
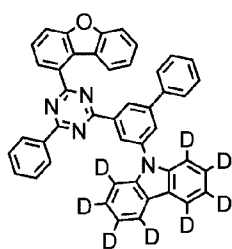
[148]



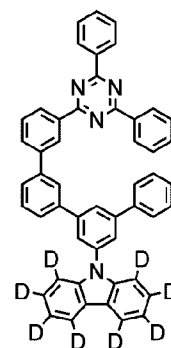
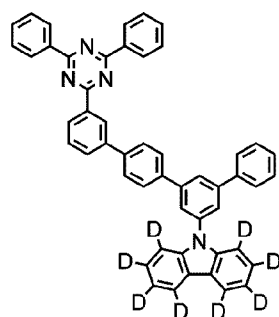
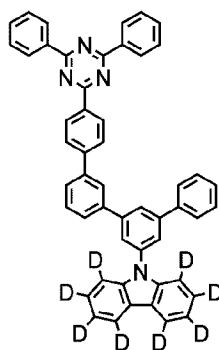
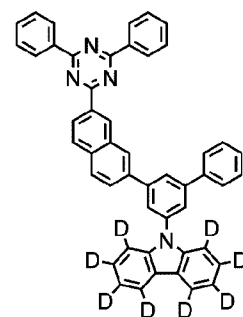
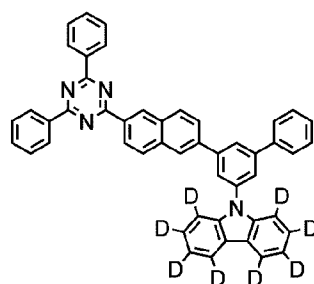
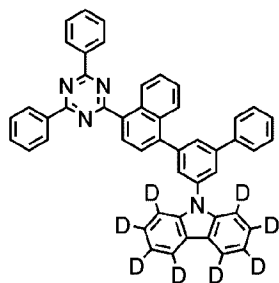
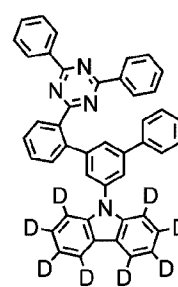
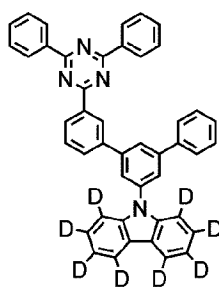
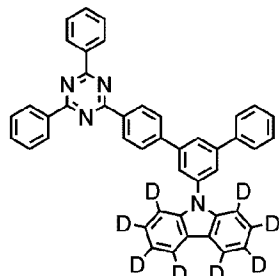
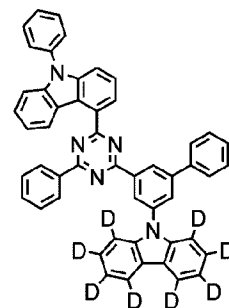
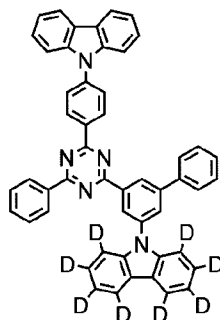
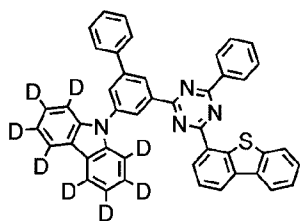
[149]



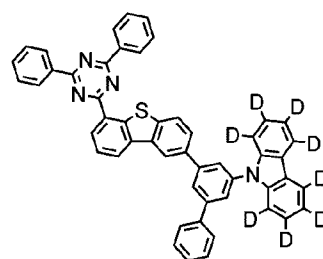
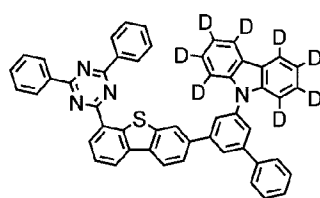
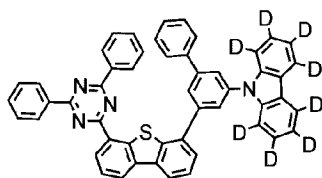
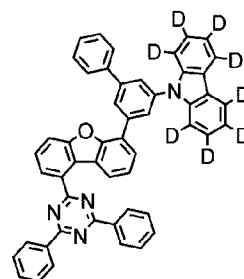
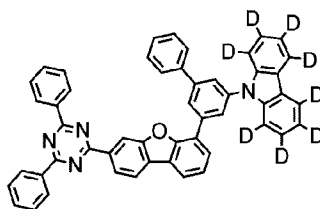
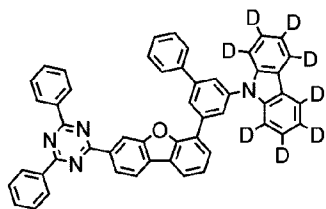
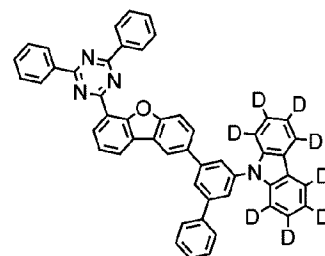
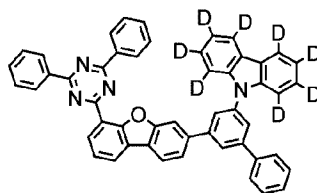
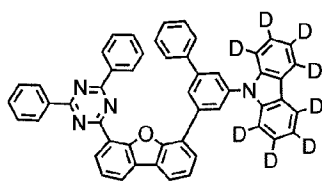
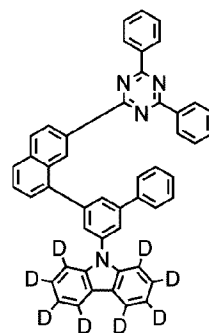
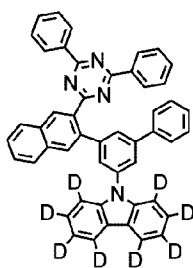
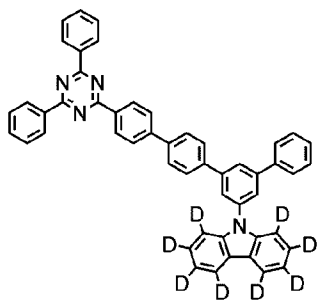
[150]



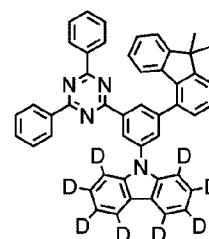
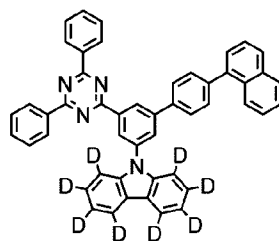
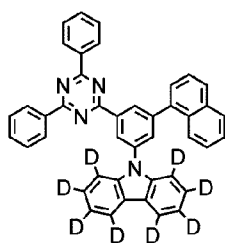
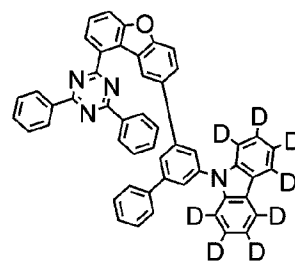
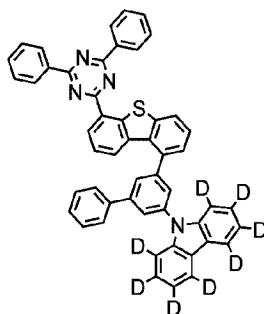
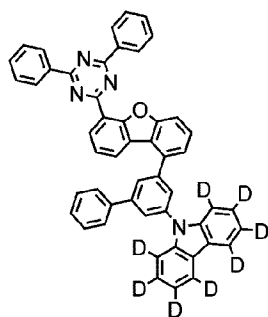
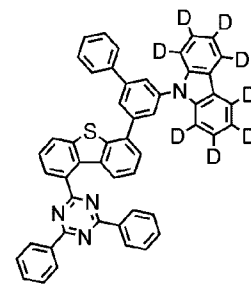
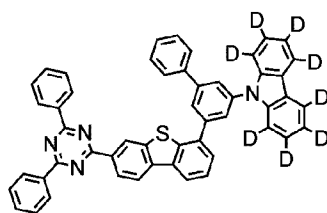
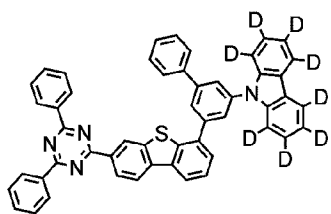
[151]



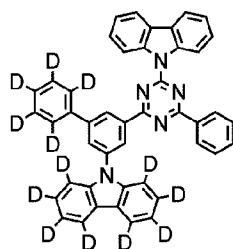
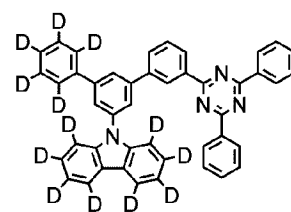
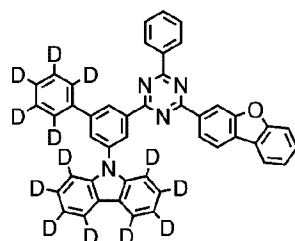
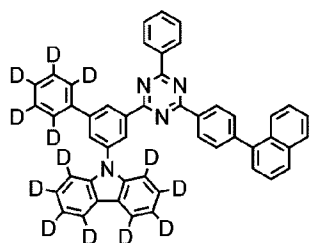
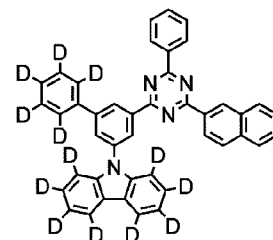
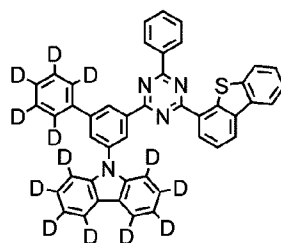
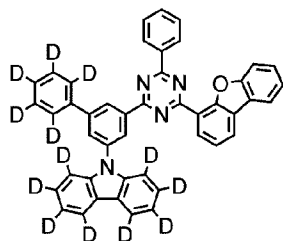
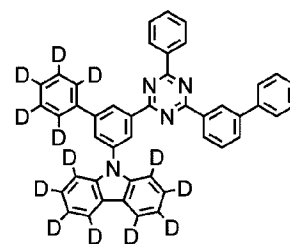
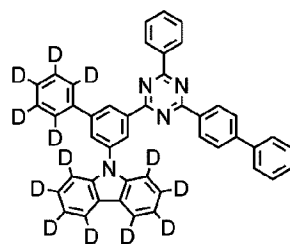
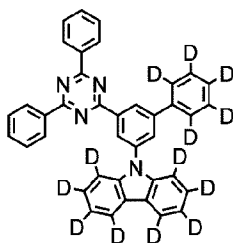
[152]



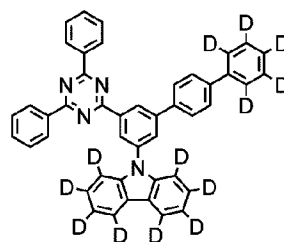
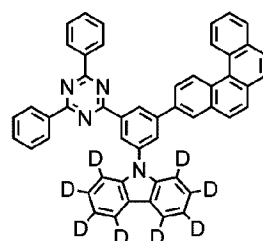
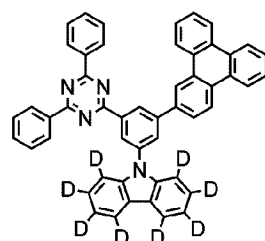
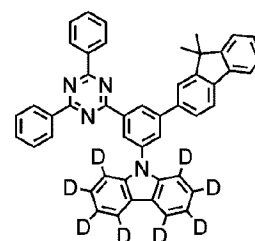
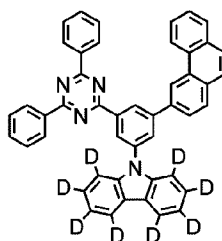
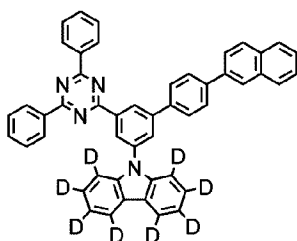
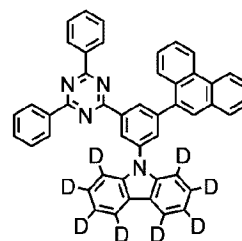
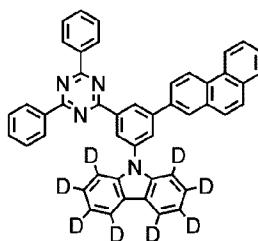
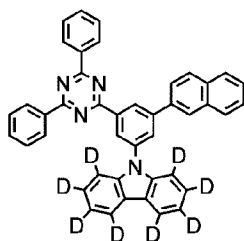
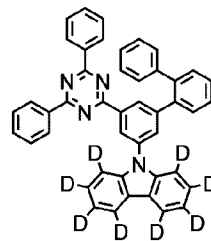
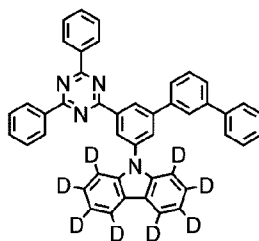
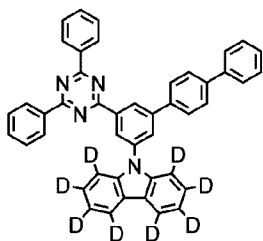
[153]



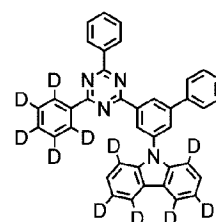
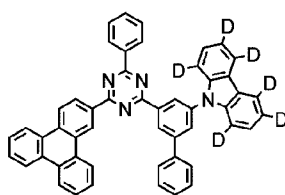
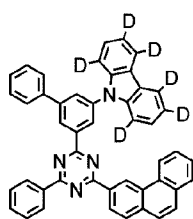
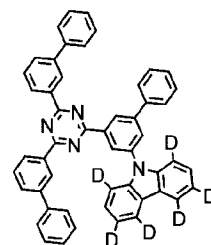
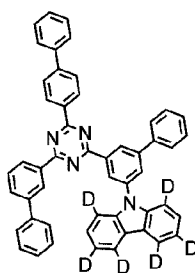
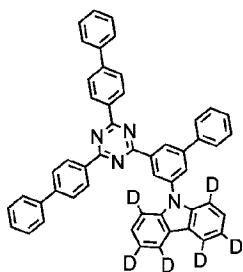
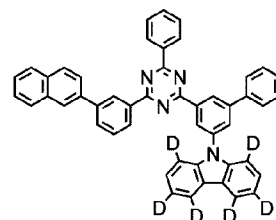
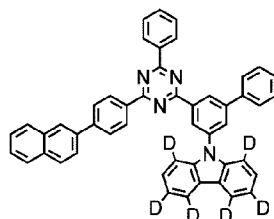
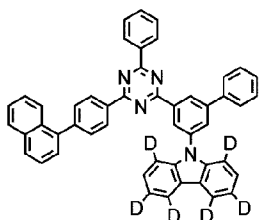
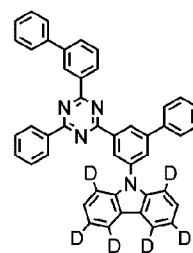
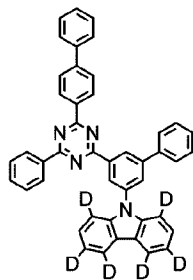
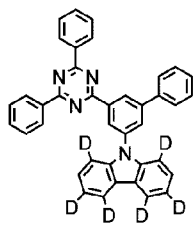
[154]



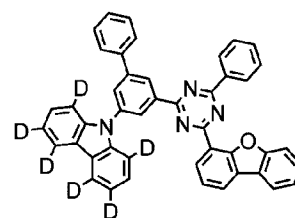
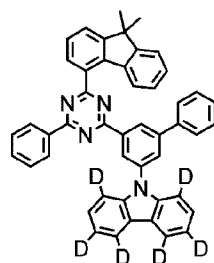
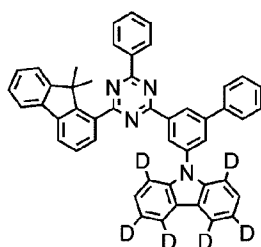
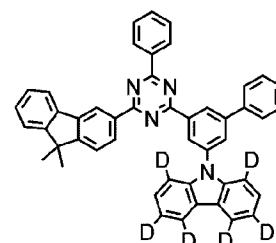
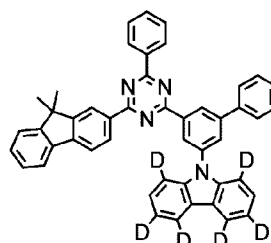
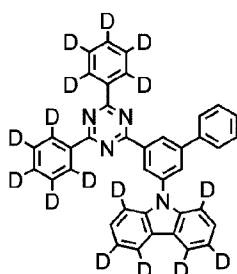
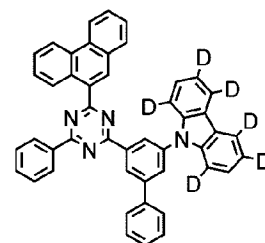
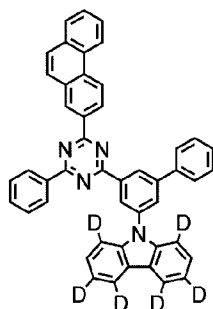
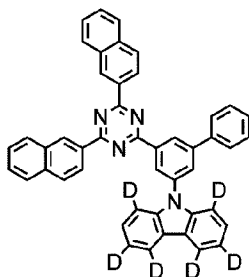
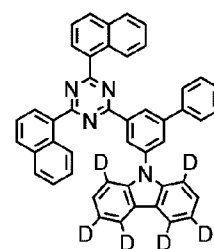
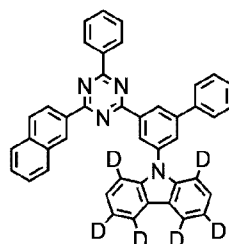
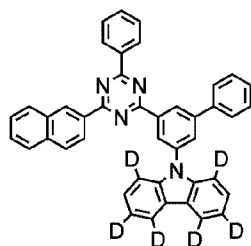
[155]



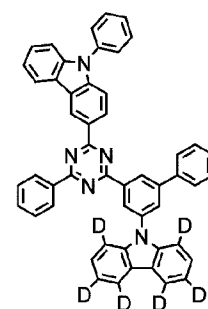
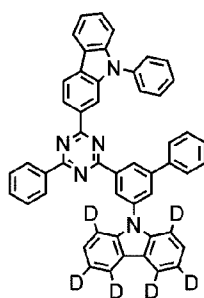
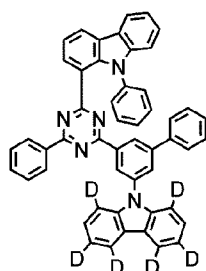
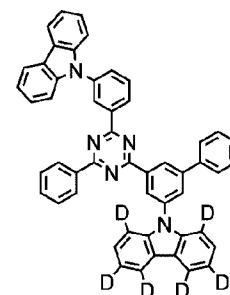
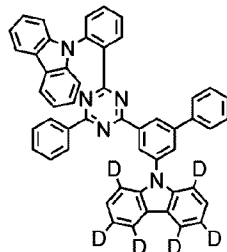
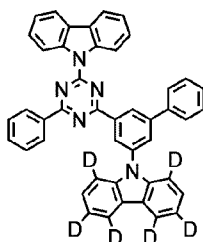
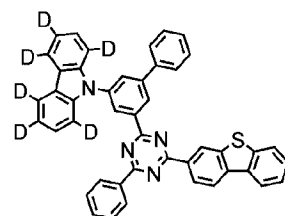
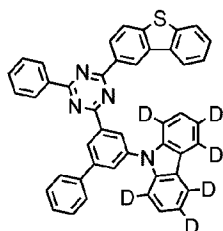
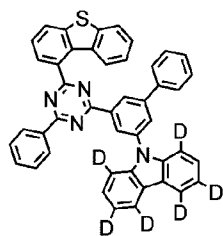
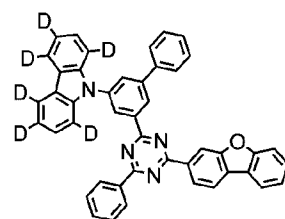
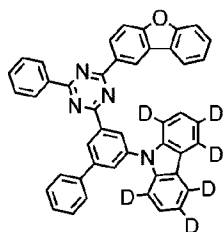
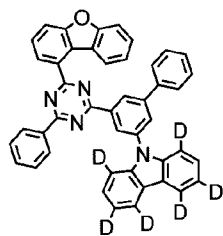
[156]



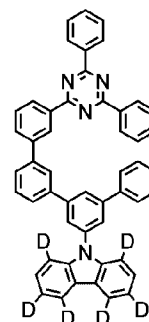
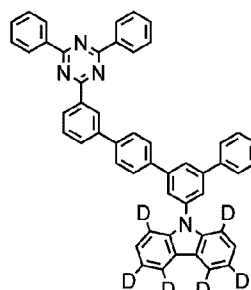
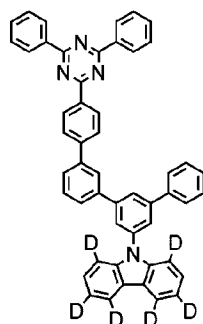
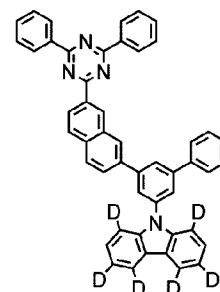
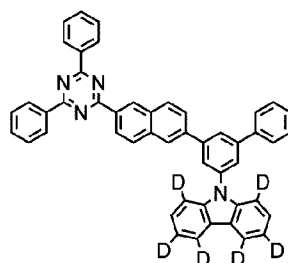
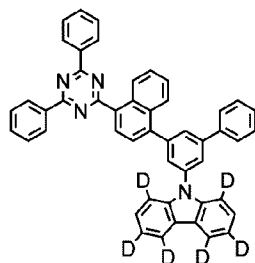
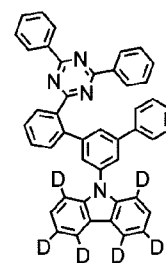
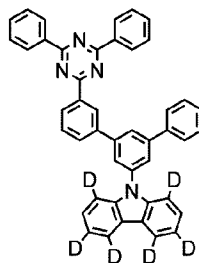
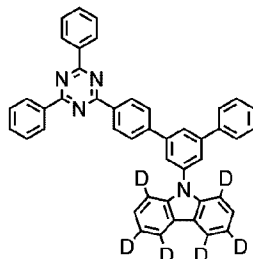
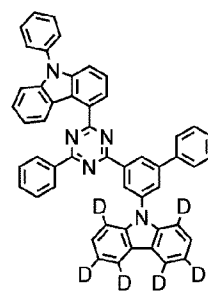
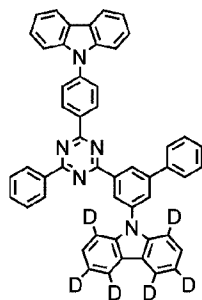
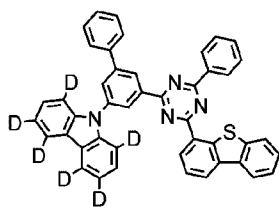
[157]



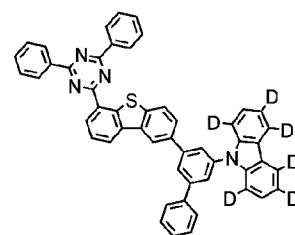
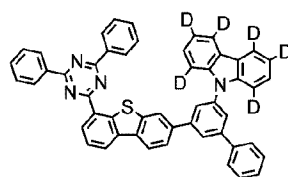
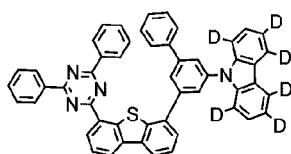
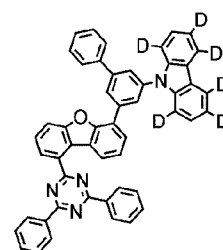
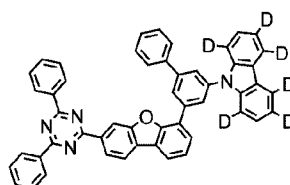
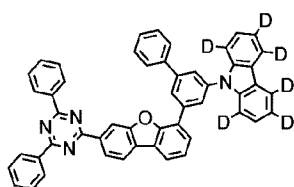
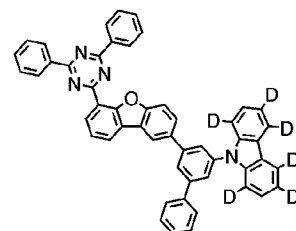
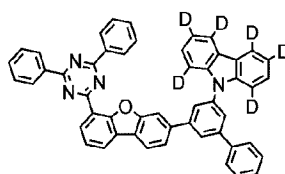
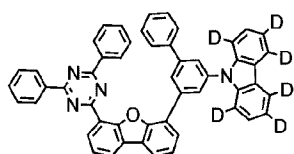
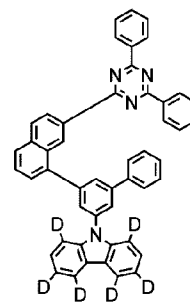
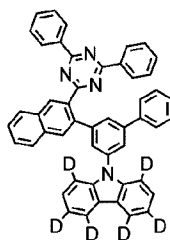
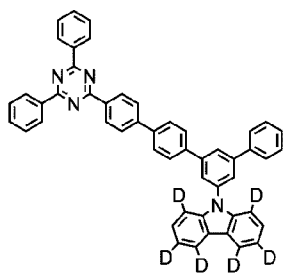
[158]



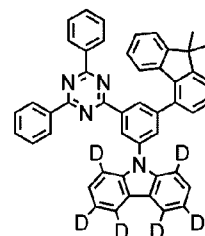
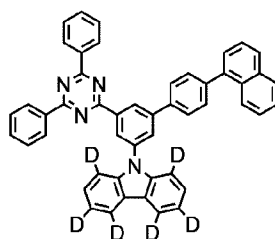
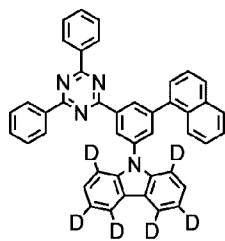
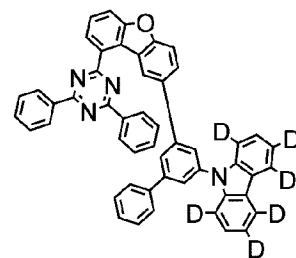
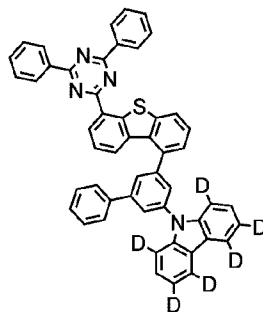
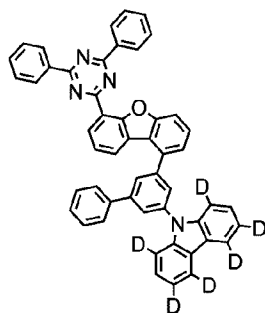
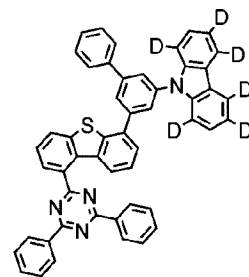
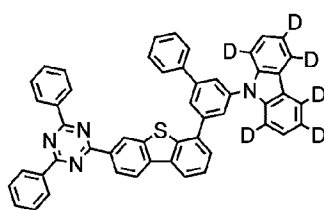
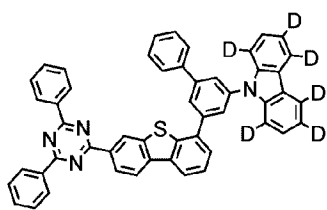
[159]



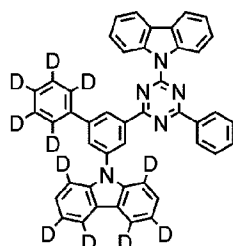
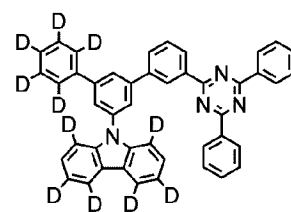
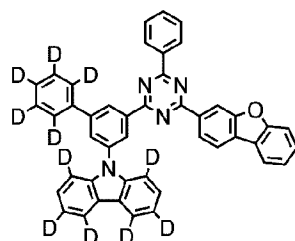
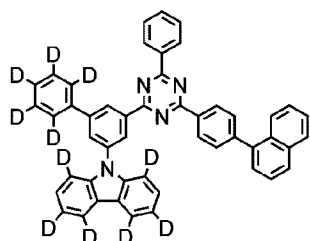
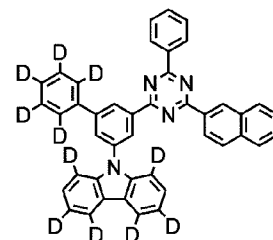
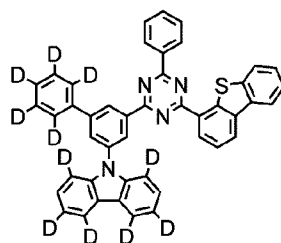
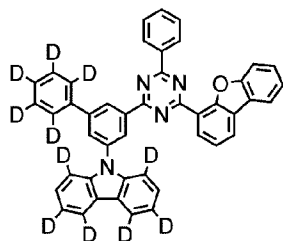
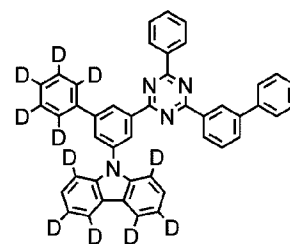
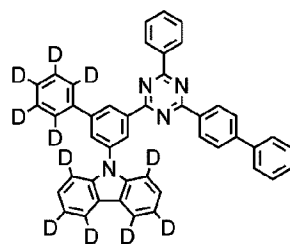
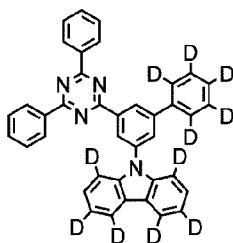
[160]

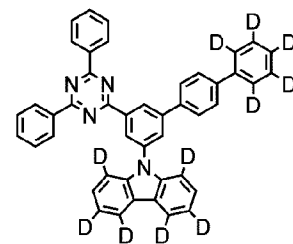
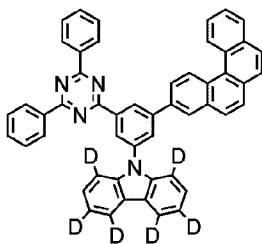
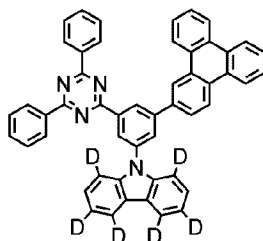
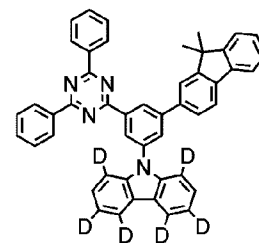
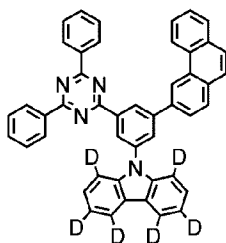
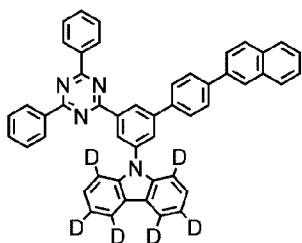
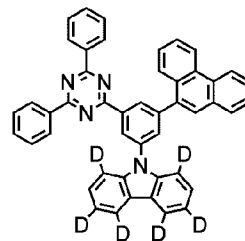
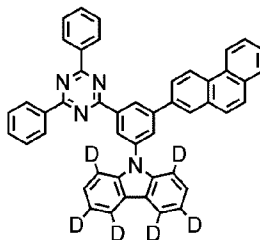
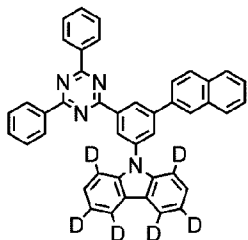
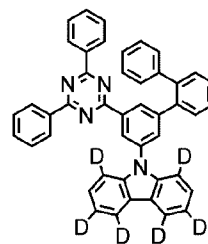
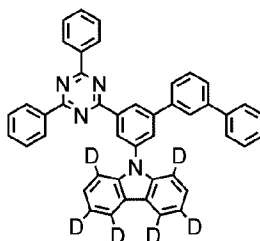


[161]

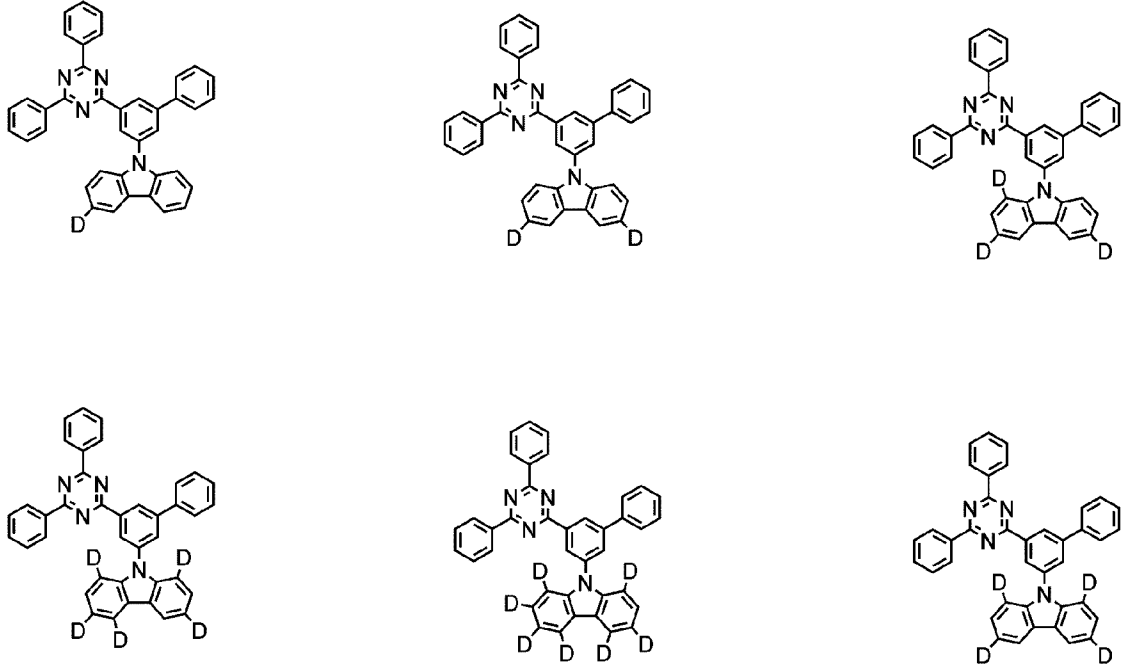


[162]





[164]



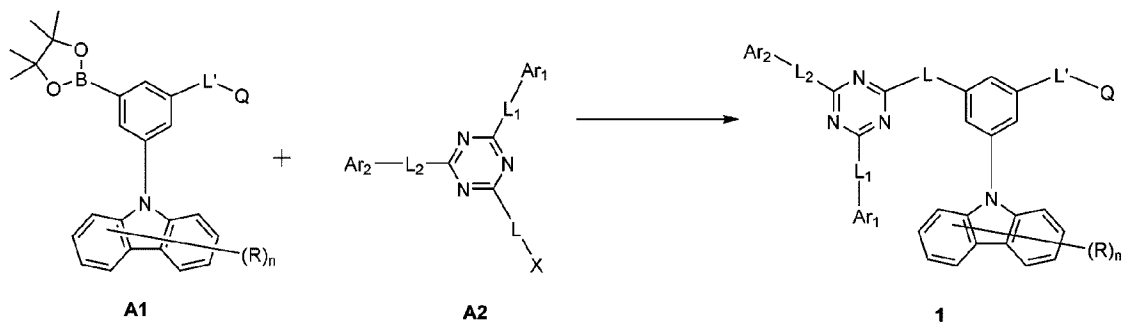
[165]

[166]

[167] 한편, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 일례로 하기 반응식 1과 같은 제조 방법으로 제조할 수 있다:

[168] [반응식 1]

[169]



[170] 상기 반응식 1에서, X는 할로젠이고, 바람직하게는 브로모, 또는 클로로이며, 나머지 치환기에 대한 설명은 앞서 정의한 바와 같다.

[171] 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 반응 물질인 A1 및 A2의 Suzuki-coupling 반응에 의해 제조될 수 있다. 이때, Suzuki-coupling 반응은 팔라듐 촉매 및 염기 하에서 수행되는 것이 바람직하며, 반응을 위한 반응기는 당해 기술 분야에서 알려진 반응기로 변경될 수 있다. 이러한 제조 방법은 후술할 제조예에서 보다 구체화될 수 있다.

[172]

[173] (유기 발광 소자)

[174] 한편, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다. 일례로, 본 발명은 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된

제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는, 유기 발광 소자를 제공한다.

[175]

[176] 본 발명의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기층을 포함할 수 있다.

[177]

[178] 일 구현예에서, 상기 유기물층은 발광층을 포함할 수 있고, 이때 상기 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층일 수 있다.

[179]

[180] 다른 구현예에서, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층을 포함할 수 있고, 이때 상기 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층 또는 전자수송층일 수 있다.

[181]

[182] 또 다른 구현예에서, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층을 포함할 수 있고, 이때 상기 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층 또는 전자수송층일 수 있다.

[183]

[184] 또 다른 구현예에서, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 발광층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층을 포함할 수 있고, 이때 상기 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층 또는 전자수송층일 수 있다.

[185]

[186] 본 발명의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 발광층 이외에, 상기 제1전극과 상기 발광층 사이의 정공주입층 및 정공수송층, 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이의 전자수송층 및 전자주입층을 더 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수 또는 더 많은 수의 유기층을 포함할 수 있다.

[187]

[188] 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는, 상기 제1 전극이 양극이고 상기 제2 전극은 음극인, 기판 상에 양극, 1층 이상의 유기물층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조(normal type)의 유기 발광 소자일 수 있다. 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는, 상기 제1 전극이 음극이고 상기 제2 전극은 양극인, 기판 상에 음극, 1층 이상의 유기물층 및 양극이 순차적으로 적층된 역방향 구조(inverted type)의

유기 발광 소자일 수 있다. 예컨대, 본 발명의 일실시예에 따른 유기 발광 소자의 구조는 도 1 및 2에 예시되어 있다.

[189]

[190] 도 1은 기판(1), 양극(2), 발광층(3) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층에 포함될 수 있다.

[191]

[192] 도 2는 기판(1), 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 전자저지층(7), 발광층(3), 전자수송층(8), 전자주입층(9) 및 음극(4)으로 이루어진 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층에 포함될 수 있다.

[193]

[194] 본 발명에 따른 유기 발광 소자는, 상기 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다. 또한, 상기 유기 발광 소자가 복수개의 유기물층을 포함하는 경우, 상기 유기물층은 동일한 물질 또는 다른 물질로 형성될 수 있다.

[195]

[196] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 기판 상에 제1 전극, 유기물층 및 제2 전극을 순차적으로 적층시켜 제조할 수 있다. 이때, 스퍼터링법(sputtering)이나 전자빔 증발법(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical Vapor Deposition)방법을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자수송층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시켜 제조할 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수 있다.

[197]

[198] 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자의 제조시 진공 증착법 뿐만 아니라 용액 도포법에 의하여 유기물층으로 형성될 수 있다. 여기서, 용액 도포법이라 함은 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.

[199]

[200] 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질로부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 제조할 수 있다(WO 2003/012890). 다만, 제조 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.

[201]

[202] 일례로, 상기 제1 전극은 양극이고, 상기 제2 전극은 음극이거나, 또는 상기 제1 전극은 음극이고, 상기 제2 전극은 양극이다.

[203]

[204] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 상기 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[205]

[206] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 상기 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[207]

[208] 또한, 상기 정공주입층은 전극으로부터 정공을 주입하는 층으로, 정공 주입 물질로는 정공을 수송하는 능력을 가져 양극에서의 정공 주입효과, 발광층 또는 발광재료에 대하여 우수한 정공 주입 효과를 갖고, 발광층에서 생성된 여기자의 전자주입층 또는 전자주입재료에의 이동을 방지하며, 또한, 박막 형성 능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrin), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone)계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[209]

[210] 또한, 상기 정공수송층은 정공주입층으로부터 정공을 수취하여 발광층까지 정공을 수송하는 층으로, 정공 수송 물질로는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 상기 정공 수송 물질로 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[211]

[212] 또한, 상기 전자저지층은 상기 정공수송층 상에 형성되어, 바람직하게는 발광층에 접하여 구비되어, 정공이동도를 조절하고, 전자의 과도한 이동을

방지하여 정공-전자간 결합 확률을 높여줌으로써 유기 발광 소자의 효율을 개선하는 역할을 하는 층을 의미한다. 상기 전자저지층은 전자저지물질을 포함하고, 이러한 전자저지물질의 예로 아릴아민 계열의 유기물 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[213]

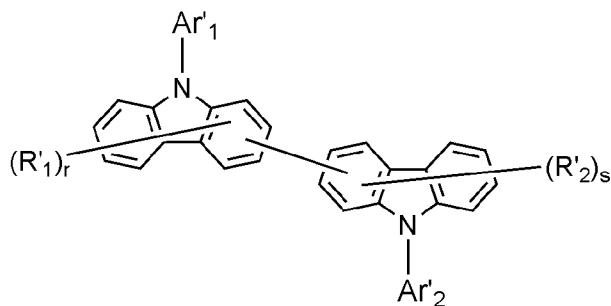
[214] 또한, 상기 발광층은 호스트 재료 및 도펀트 재료를 포함할 수 있다. 이러한 호스트 재료로 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 사용할 수 있다. 또한, 상기 호스트 재료로 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 외 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로환 함유 화합물 등을 더 포함할 수도 있다. 구체적으로 축합 방향족환 유도체로는 안트라센 유도체, 피렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 펜타센 유도체, 페난트렌 화합물, 플루오란텐 화합물 등이 있고, 헤테로환 함유 화합물로는 카바졸 유도체, 디벤조퓨란 유도체, 래더형 퓨란 화합물, 피리미딘 유도체 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[215]

[216] 일 구현예에서, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 외에, 하기 화학식 2로 표시되는 화합물을 더 포함할 수 있다:

[217] [화학식 2]

[218]



[219] 상기 화학식 2에서,

[220] Ar'_1 및 Ar'_2 는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_{6-60} 아릴; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C_{2-60} 헤테로아릴이고,

[221] R'_1 및 R'_2 는 각각 독립적으로, 수소; 중수소; C_{1-60} 알킬; C_{6-60} 아릴; 또는 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C_{2-60} 헤테로아릴이고,

[222] r 및 s 는 각각 독립적으로, 0 내지 7의 정수이다.

[223]

[224] 상기 유기 발광 소자가 발광층의 호스트 물질로 정공을 도펀트 물질로 효율적으로 전달할 수 있는 상기 화학식 2로 표시되는 화합물을 더 포함하는 경우, 전자 수송 능력이 우수한 상기 화학식 1로 표시되는 화합물과 함께 발광층 내에서의 정공과 전자의 재결합 확률이 높아져, 유기 발광 소자의 효율 및 수명이 향상될 수 있다.

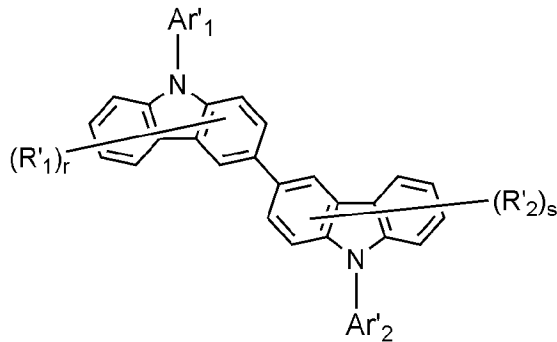
[225]

[226] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2'로

표시될 수 있다:

[227] [화학식 2']

[228]



[229] 상기 화학식 2'에서,

[230] Ar'_1 , Ar'_2 , R'_1 , R'_2 , r 및 s 는 상기 화학식 2에서 정의한 바와 같다.

[231]

[232] 또한, 상기 화학식 2에서, Ar'_1 및 Ar'_2 는 각각 독립적으로, C_{6-20} 아릴, 또는 N, O 및 S 중 1개의 헤테로원자를 포함하는 C_{2-20} 헤테로아릴이고,

[233] 여기서, Ar'_1 은 비치환되거나, 또는 중수소 및 C_{6-20} 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

[234]

[235] 예를 들어, Ar'_1 및 Ar'_2 는 각각 독립적으로, 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 나프틸, 디벤조푸라닐, 또는 디벤조티오펜일이고,

[236] 여기서, Ar'_1 은 비치환되거나, 또는 중수소 및 C_{6-20} 아릴로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

[237]

[238] 이때, Ar'_1 및 Ar'_2 중 적어도 하나는 페닐 또는 비페닐릴일 수 있다.

[239]

[240] 또한, 상기 화학식 2에서, R'_1 및 R'_2 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 또는 C_{6-20} 아릴일 수 있다.

[241]

[242] 예를 들어, R'_1 및 R'_2 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 또는 페닐일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[243]

[244] 또한, R'_1 및 R'_2 의 개수를 각각 나타내는, r 및 s 는 각각 독립적으로, 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 또는 7일 수 있다.

[245]

[246] 보다 구체적으로, r 및 s 는 각각 독립적으로, 0, 1, 또는 7일 수 있다.

[247]

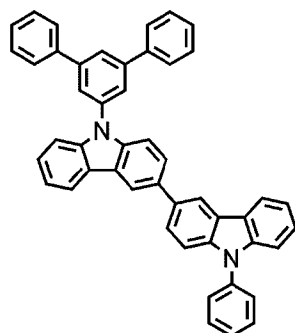
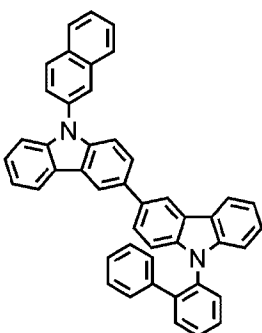
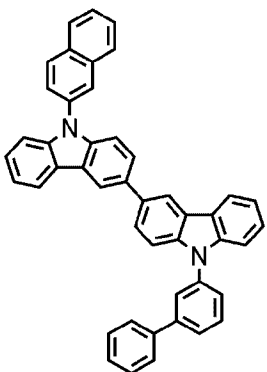
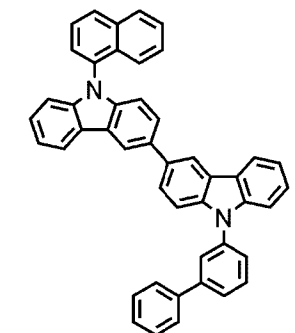
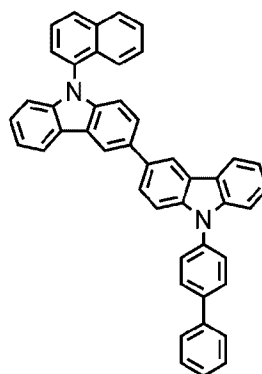
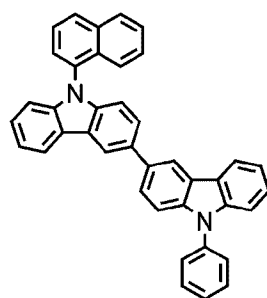
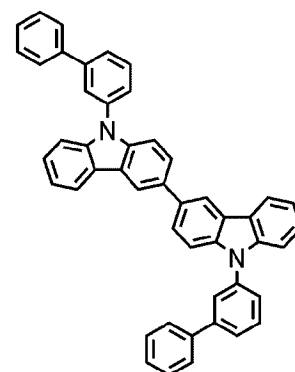
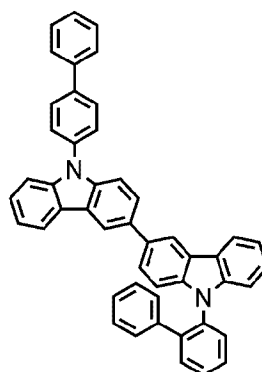
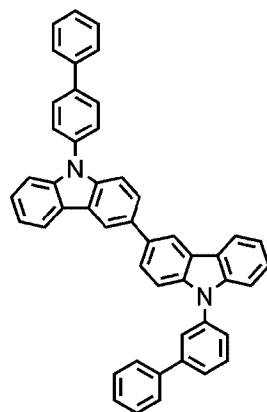
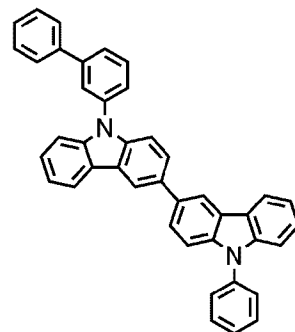
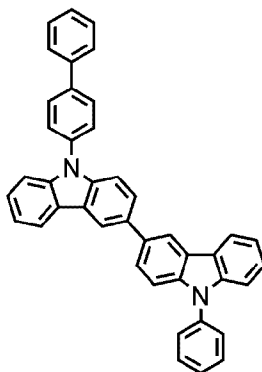
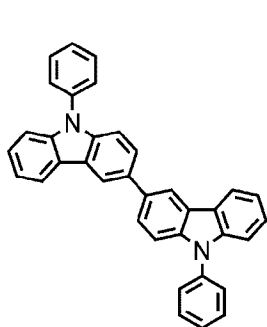
[248] 예를 들어, $r+s$ 는 0 또는 1일 수 있다.

[249]

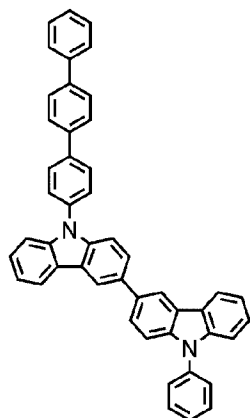
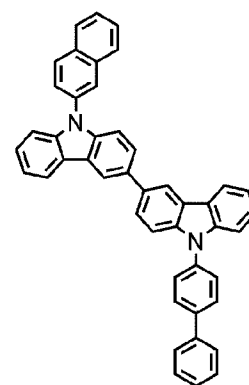
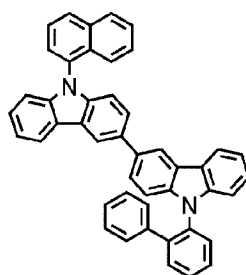
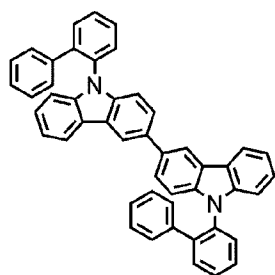
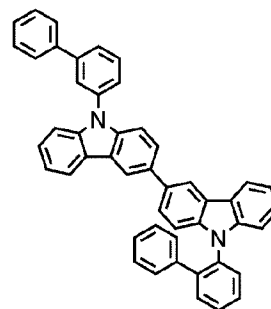
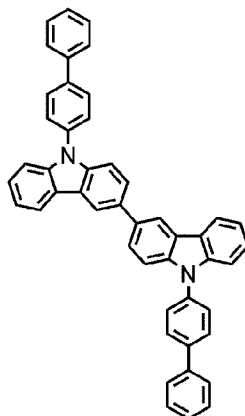
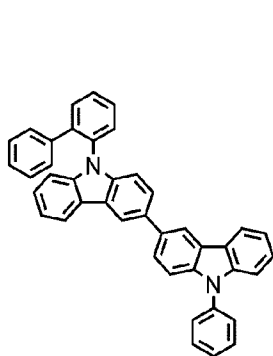
[250] 상기 화학식 2로 표시되는 화합물의 대표적인 예는 하기와 같다:

[251]

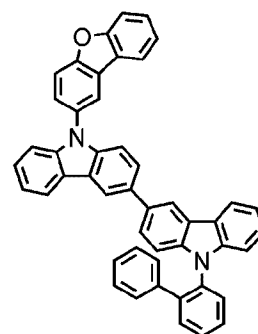
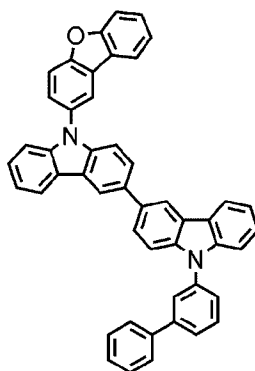
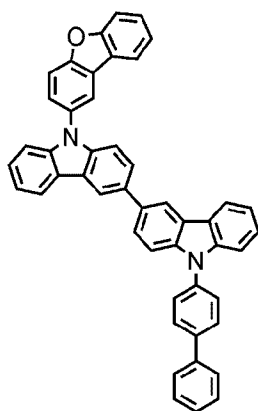
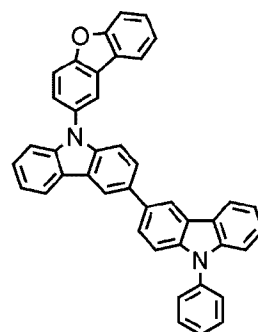
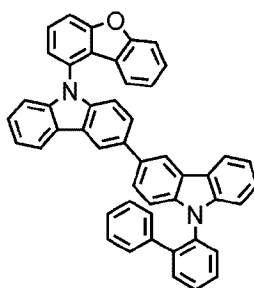
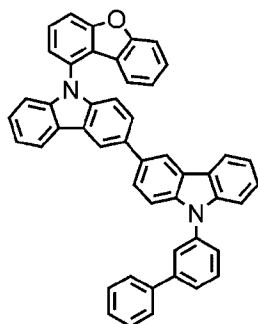
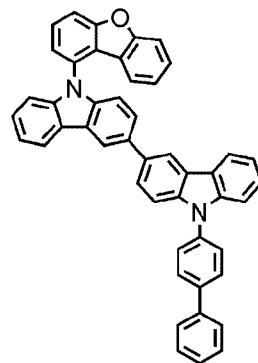
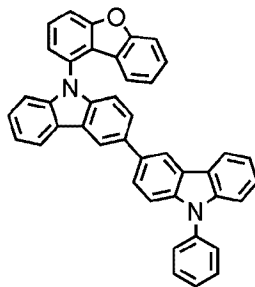
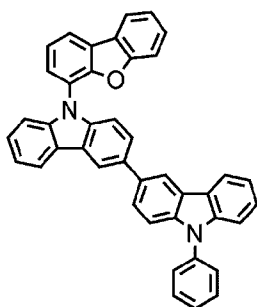
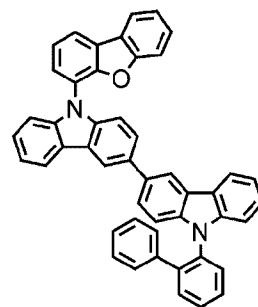
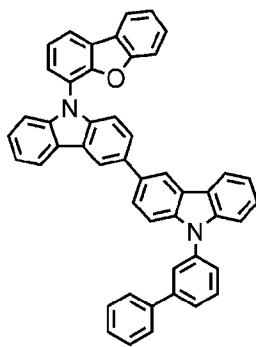
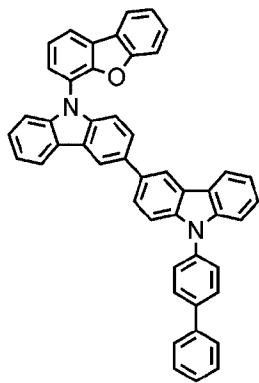
[252]



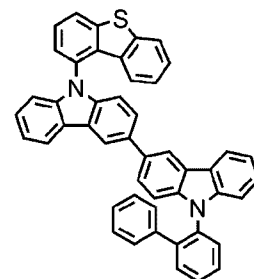
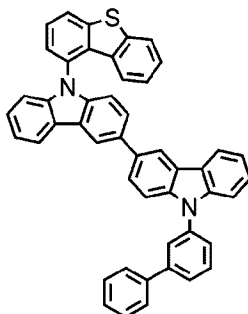
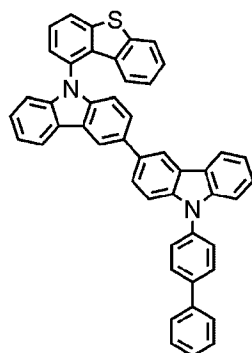
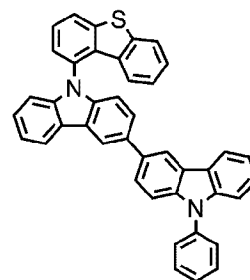
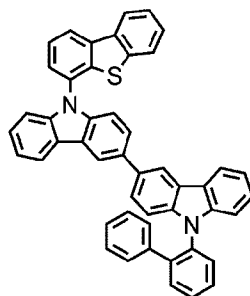
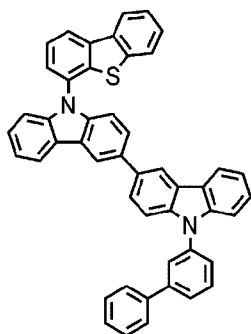
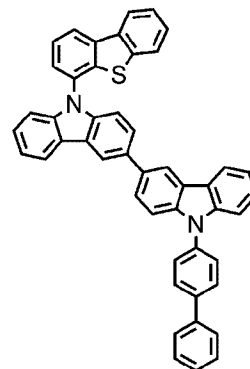
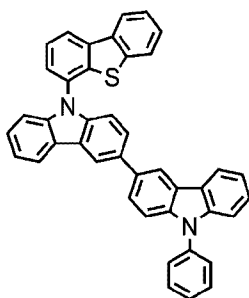
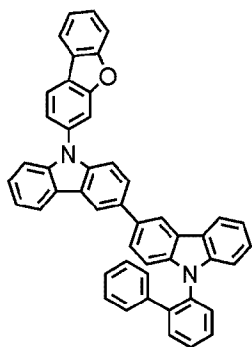
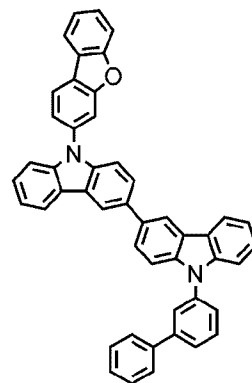
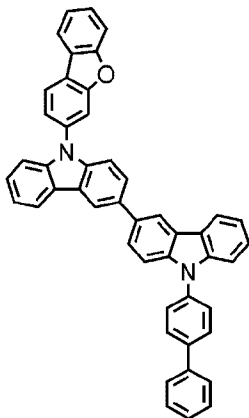
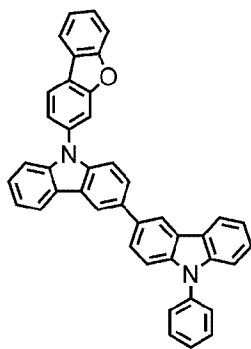
[253]



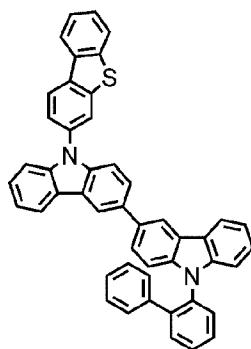
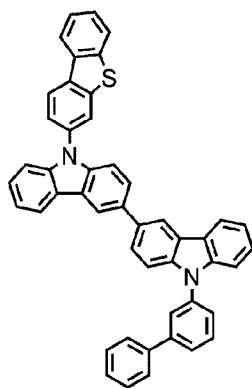
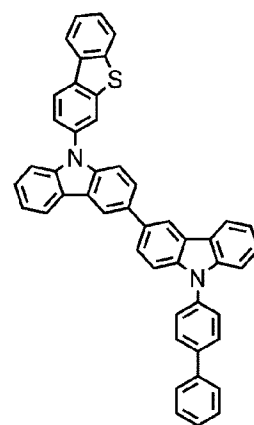
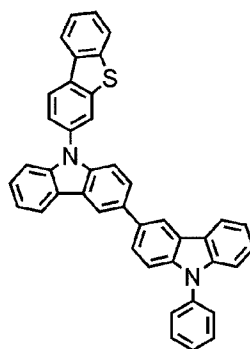
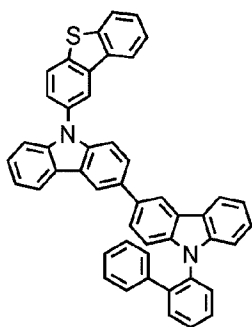
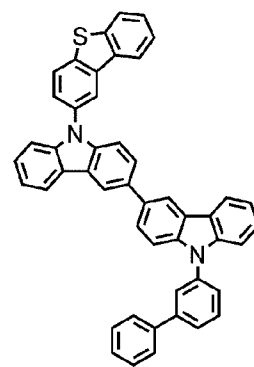
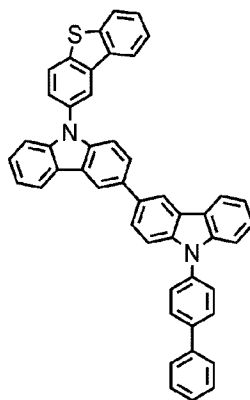
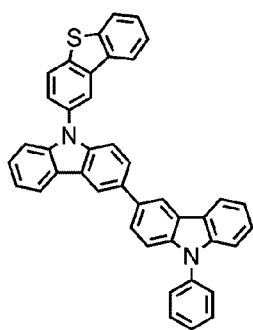
[254]



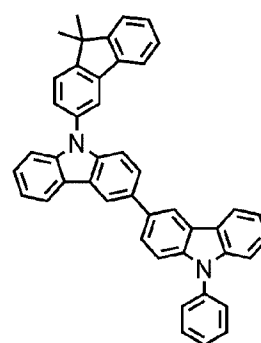
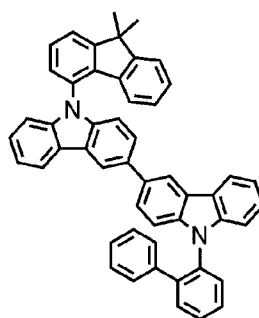
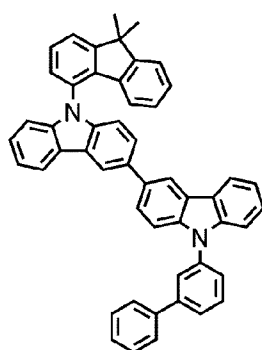
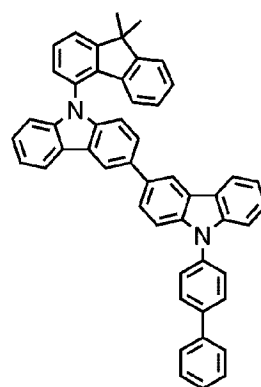
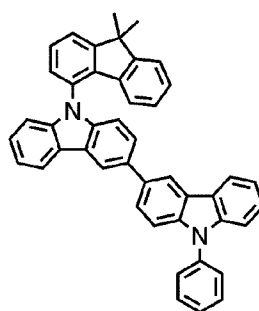
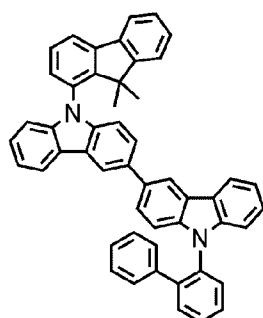
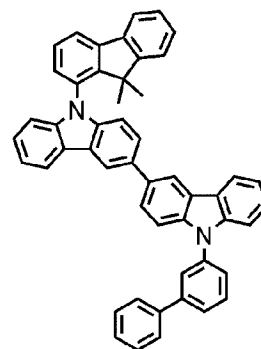
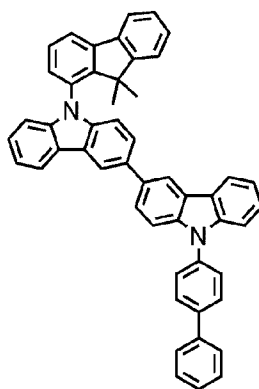
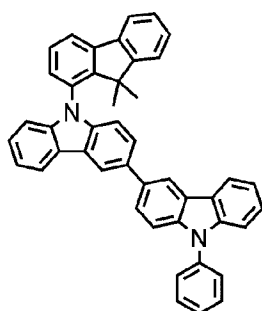
[255]



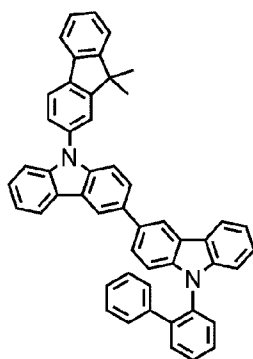
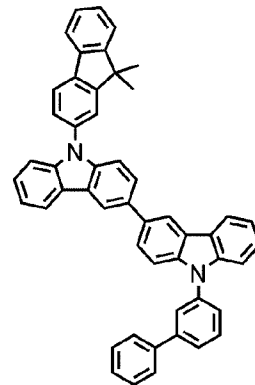
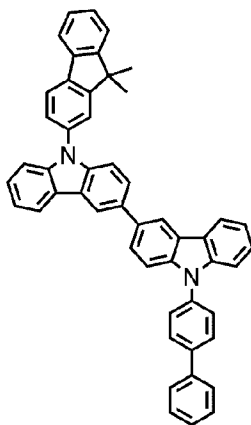
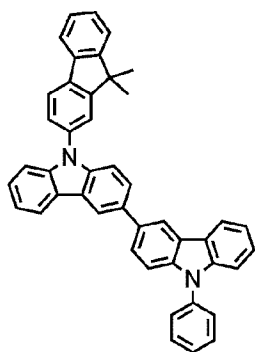
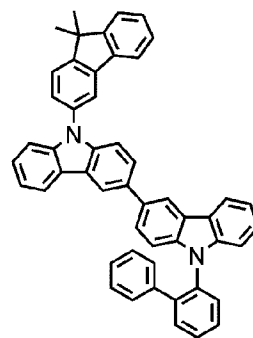
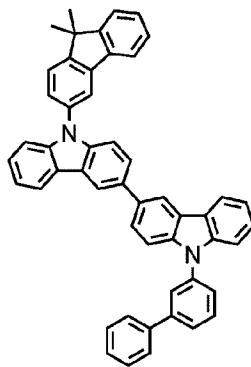
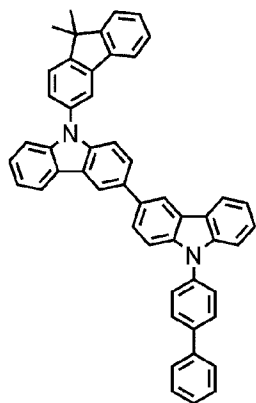
[256]



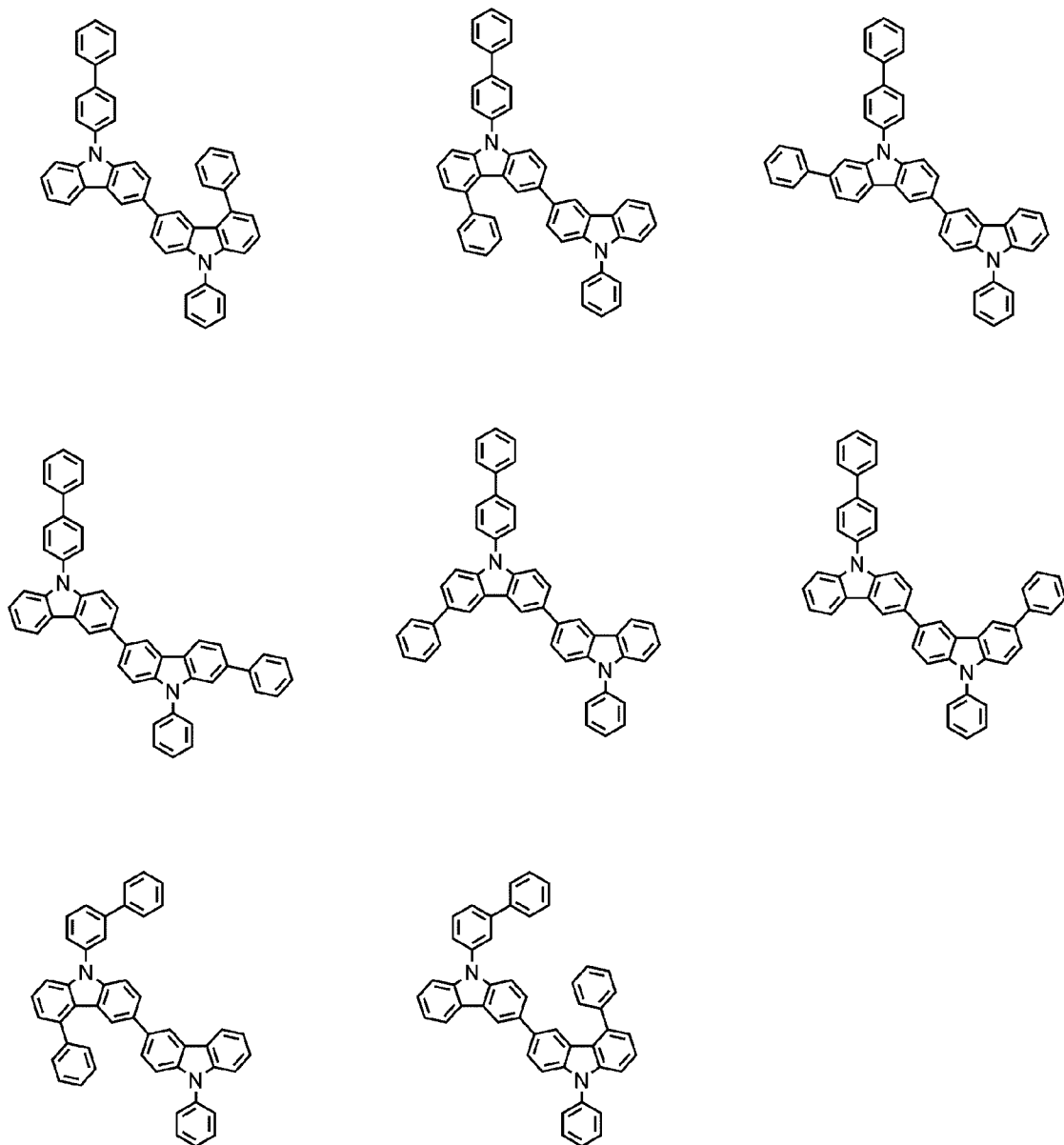
[257]



[258]



[259]



[260]

[261] 이러한 2종의 호스트 물질인 상기 화학식 1로 표시되는 화합물과 상기 화학식 2로 표시되는 화합물은 발광층 내에 10:90 내지 90:10의 중량비, 일례로 50:50의 중량비로 포함될 수 있다.

[262]

[263] 또한, 도펀트 재료로는 방향족 아민 유도체, 스테릴아민 화합물, 붕소 착체, 플루오란텐 화합물, 금속 착체 등이 있다. 구체적으로 방향족 아민 유도체로는 치환 또는 비치환된 아릴아미노기를 갖는 축합 방향족환 유도체로서, 아릴아미노기를 갖는 피렌, 안트라센, 크리센, 페리플란텐 등이 있으며, 스테릴아민 화합물로는 치환 또는 비치환된 아릴아민에 적어도 1개의 아릴비닐기가 치환되어 있는 화합물로, 아릴기, 실릴기, 알킬기, 사이클로알킬기

및 아릴아미노기로 이루어진 군에서 1 또는 2 이상 선택되는 치환기가 치환 또는 비치환된다. 구체적으로 스티릴아민, 스티릴디아민, 스티릴트리아민, 스티릴테트라아민 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 또한, 금속 착체로는 이리듐 착체, 백금 착체 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[264]

[265] 또한, 상기 정공저지층은 발광층 상에 형성되어, 바람직하게는 발광층에 접하여 구비되어, 전자이동도를 조절하고 정공의 과도한 이동을 방지하여 정공-전자간 결합 확률을 높여줌으로써 유기 발광 소자의 효율을 개선하는 역할을 하는 층을 의미한다. 상기 정공저지층은 정공저지물질을 포함하고, 이러한 정공저지물질의 예로 트리아진을 포함한 아진류유도체; 트리아졸 유도체; 옥사디아졸 유도체; 페난트롤린 유도체; 포스핀옥사이드 유도체 등의 전자흡인기가 도입된 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[266]

[267] 또한, 상기 전자수송층은 전자 주입층으로부터 수취된 전자를 발광층까지 수송하는 역할을 하는 층으로, 발광층 또는 정공저지층 상에 형성된다. 상기 전자수송층은 전자수송물질을 포함하고, 이러한 전자수송물질로는 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 전자수송물질의 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq₃를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물; 트리아진 유도체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다. 또는 이들과 플루오레논, 안트라퀴노다이메탄, 다이페노퀸논, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사다리아졸, 트리아졸, 이미다졸, 페릴렌테트라카복실산, 플루오레닐리덴 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물, 또는 질소 함유 5원환 유도체 등을 전자수송물질로 함께 사용할 수도 있다.

[268]

[269] 또한, 전자주입층은 전극으로부터 전자를 주입하는 역할을 하는 층으로, 상기 전자 수송층 상에 형성된다. 상기 전자주입층에 포함되는 전자주입 물질로는 LiF, NaCl, CsF, Li₂O, BaO, 플루오레논, 안트라퀴노다이메탄, 다이페노퀸논, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사다리아졸, 트리아졸, 이미다졸, 페릴렌테트라카복실산, 플루오레닐리덴 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물 및 질소 함유 5원환 유도체 등이 사용될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[270]

[271] 여기서, 상기 금속 착체 화합물로서는 8-하이드록시퀴놀리나토 리튬, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)아연, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)구리, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)망간, 트리스(8-하이드록시퀴놀리나토)알루미늄, 트리스(2-메틸-8-하이드록시퀴놀리나토)알루미늄, 트리스(8-하이드록시퀴놀리나토)갈륨,

비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀리나토)베릴륨,
 비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀리나토)아연,
 비스(2-메틸-8-하이드록시퀴놀리나토)클로로갈륨,
 비스(2-메틸-8-하이드록시퀴놀리나토)(o-크레졸라토)갈륨,
 비스(2-메틸-8-하이드록시퀴놀리나토)(1-나프톨라토)알루미늄,
 비스(2-메틸-8-하이드록시퀴놀리나토)(2-나프톨라토)갈륨 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[272]

[273] 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 배면 발광(bottom emission) 소자, 전면 발광(top emission) 소자, 또는 양면 발광 소자일 수 있으며, 특히 상대적으로 높은 발광 효율이 요구되는 배면 발광 소자일 수 있다.

[274]

[275] 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자 외에도 유기 태양 전지 또는 유기 트랜지스터에 포함될 수 있다.

[276]

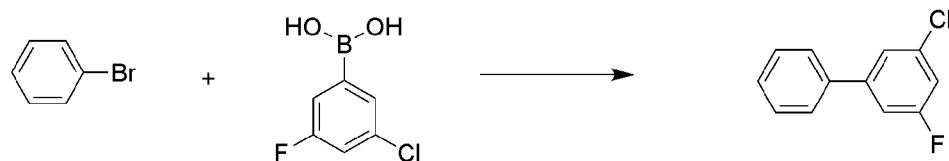
[277] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자의 제조는 이하 실시예에서 구체적으로 설명한다. 그러나 하기 실시예는 본 발명을 예시하기 위한 것이며, 본 발명의 범위가 이들에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[278]

[279] **제조예 1: 화합물 A-3의 제조**

[280] 1) 화합물 A-1의 제조

[281]



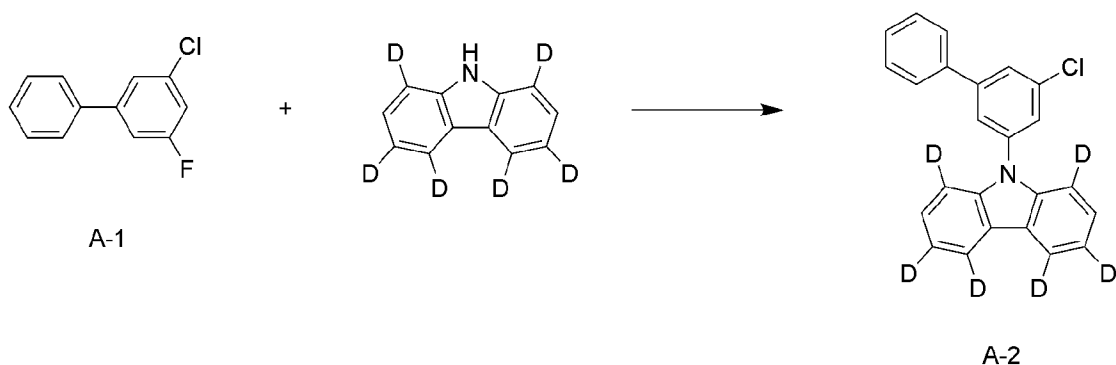
A-1

[282] 질소 분위기에서 Bromobenzene(100 g, 641.2 mmol)와 (3-chloro-5-fluorophenyl)boronic acid(111.6 g, 641.2 mmol)를 테트라하이드로퓨란 2000 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(265.9 g, 1923.6 mmol)를 물 266 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(22.2 g, 19.2 mmol)을 투입하였다. 1시간 반응 후 상온으로 식인 후 유기층과 물층을 분리 후 유기층을 증류하였다. 이를 다시 클로로포름 2642 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 회색의 고체 화합물 A-1(80.6g, 61%, MS: $[M+H]^+ = 207$)을 제조하였다.

[283]

[284] 2) 화합물 A-2의 제조

[285]

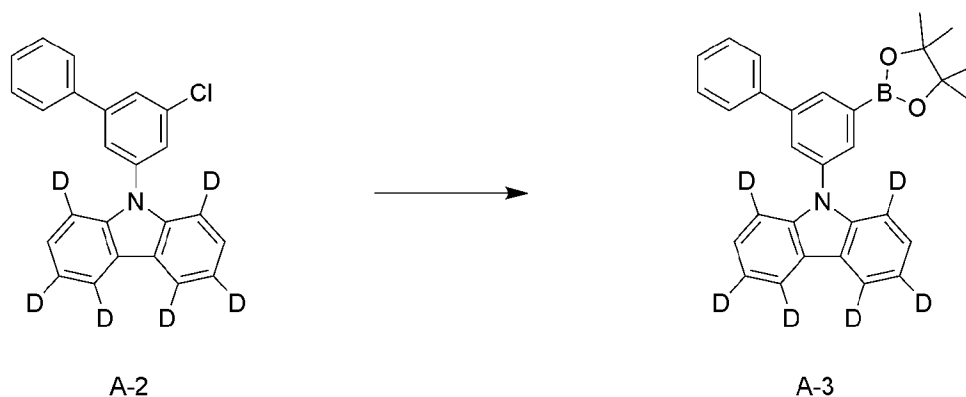


[286] 질소 분위기에서 A-1(100 g, 485.4 mmol)와 9H-carbazole-1,3,4,5,6,8-d₆(84 g, 485.4 mmol)를 자일렌 2000 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 나트륨 터셔리-부톡사이드 (140 g, 1456.1 mmol)를 투입하고 충분히 교반한 후 비스(트리 터셔리-부틸포스핀)팔라듐(7.4 g, 14.6 mmol)을 투입하였다. 4시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 5229 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트를 이용하여 실리카 컬럼을 통해 정제하여 흰색의 고체 화합물 A-2(111.6g, 64%, MS: [M+H]⁺ = 360.1)를 제조하였다.

[287]

[288] 3) 화합물 A-3의 제조

[289]



[290] 질소 분위기에서 A-2(50 g, 139.2 mmol)와 비스(피나콜라토)디보론(38.9 g, 153.1 mmol)를 1,4-디옥산 1000 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘아세테이트(40.1 g, 417.7 mmol)를 투입하고 충분히 교반한 후 팔라듐디벤질리덴아세톤팔라듐(2.4 g, 4.2 mmol) 및 트리스클로헥실포스핀 (2.3 g, 8.4 mmol)을 투입하였다. 5시간 반응 후 상온으로 식인 후 유기층을 필터처리하여 염을 제거한 후 걸러진 유기층을 증류하였다. 이를 다시 클로로포름 628 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에탄올재결정을 통해 회색의 고체 화합물 A-3(51.5g,

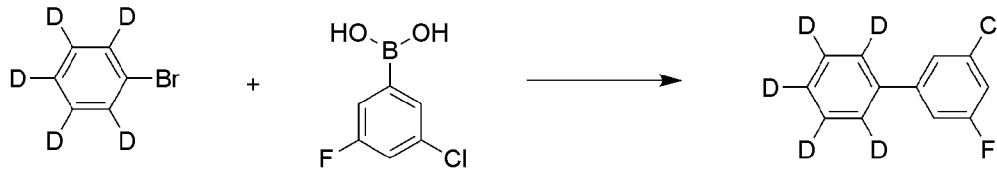
82%, MS: $[M+H]^+ = 452.3$)을 제조하였다.

[291]

[292] 제조예 2: 화합물 B-3의 제조

[293] 1) 화합물 B-1의 제조

[294]



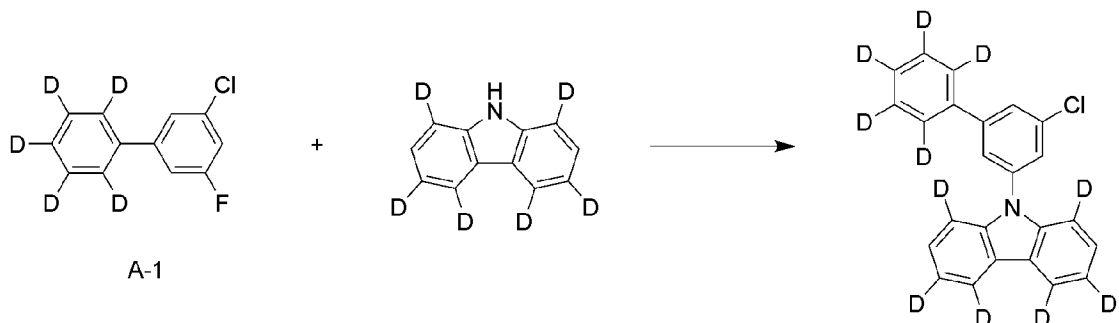
B-1

[295] 질소 분위기에서 1-bromobenzene-2,3,4,5,6-d5(100 g, 621.2 mmol)와 (3-chloro-5-fluorophenyl)boronic acid(108.1 g, 621.2 mmol)를 테트라하이드로퓨란 2000 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(257.6 g, 1863.5 mmol)를 물 258 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(21.5 g, 18.6 mmol)을 투입하였다. 1시간 반응 후 상온으로 식인 후 유기층과 물층을 분리 후 유기층을 증류하였다. 이를 다시 클로로포름 2622 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 회색의 고체 화합물 B-1(80g, 61%, MS: $[M+H]^+ = 212.1$)을 제조하였다.

[296]

[297] 2) 화합물 B-2의 제조

[298]



B-2

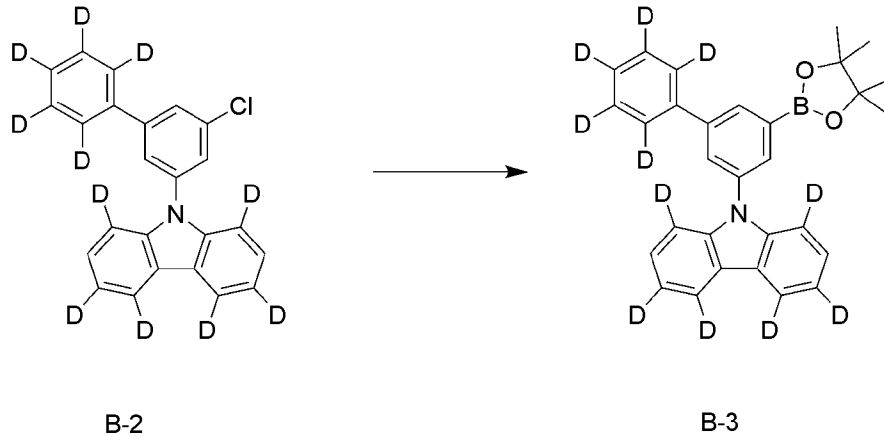
[299] 질소 분위기에서 B-1(100 g, 473.8 mmol)와 9H-carbazole-1,3,4,5,6,8-d6(82 g, 473.8 mmol)를 자일렌 2000 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 나트륨 터셔리-부톡사이드 (136.6 g, 1421.4 mmol)를 투입하고 충분히 교반한 후 비스(트리 터셔리-부틸포스핀)팔라듐(7.3 g, 14.2 mmol)을 투입하였다. 1시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 5176 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한

화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트를 이용하여 실리카 컬럼을 통해 정제하여 흰색의 고체 화합물 B-2(103.5g, 60%, MS: $[M+H]^+ = 365.2$)을 제조하였다.

[300]

[301] 3) 화합물 B-3의 제조

[302]



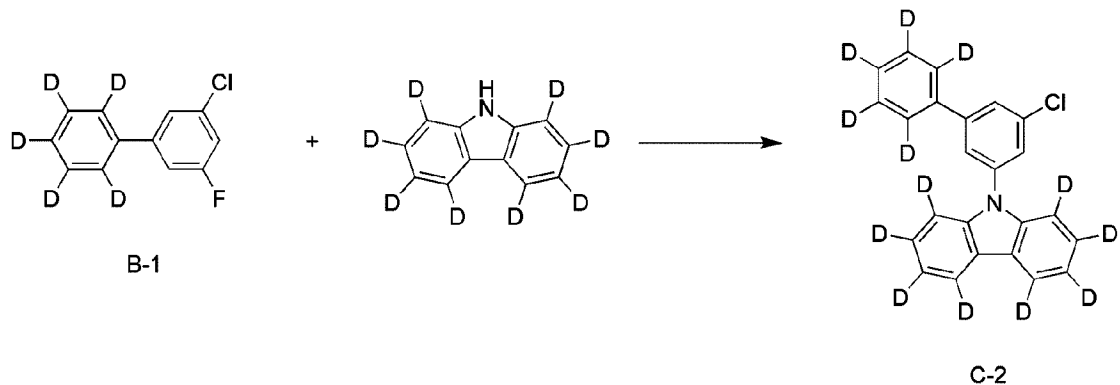
[303] 질소 분위기에서 B-2(50 g, 137.3 mmol)와 비스(피나콜라토)디보론(38.4 g, 151 mmol)를 1,4-디옥산 1000 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘아세테이트(39.6 g, 411.9 mmol)를 투입하고 충분히 교반한 후 팔라듐디벤질리덴아세톤팔라듐(2.4 g, 4.1 mmol) 및 트리시클로헥실포스핀 (2.3 g, 8.2 mmol)을 투입하였다. 4시간 반응 후 상온으로 식인 후 유기층을 필터처리하여 염을 제거한 후 걸러진 유기층을 증류하였다. 이를 다시 클로로포름 626 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에탄올재결정을 통해 회색의 고체 화합물 B-3(32g, 51%, MS: $[M+H]^+ = 457.3$)을 제조하였다.

[304]

[305] 제조예 3: 화합물 C-3의 제조

[306] 1) 화합물 C-2의 제조

[307]



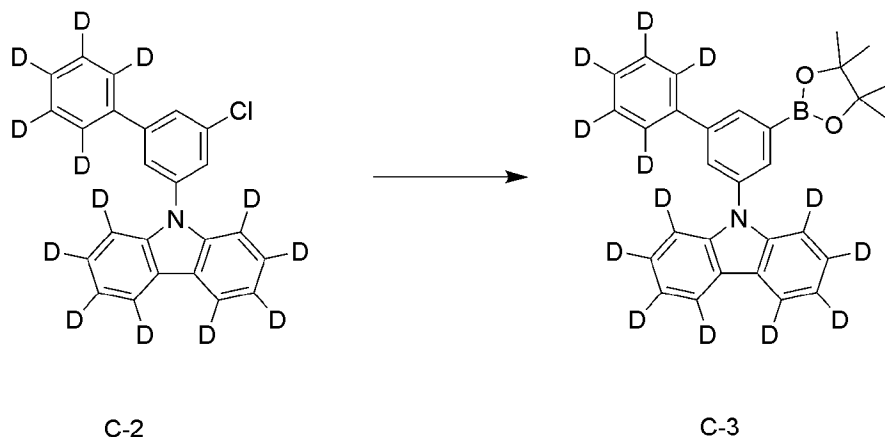
[308] 질소 분위기에서 B-1(100 g, 473.8 mmol)과 9H-carbazole-1,2,3,4,5,6,7,8-d₈(83 g, 473.8 mmol)을 자일렌 2000 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 나트륨

터셔리-부톡사이드 (136.6 g, 1421.4 mmol)를 투입하고 충분히 교반한 후 비스(트리 터셔리-부틸포스핀)팔라듐(7.3 g, 14.2 mmol)을 투입하였다. 5시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 5205 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트를 이용하여 실리카 컬럼을 통해 정제하여 흰색의 고체 화합물 C-2(131.9g, 76%, MS: $[M+H]^+ = 367.2$)을 제조하였다.

[309]

[310] 2) 화합물 C-3의 제조

[311]



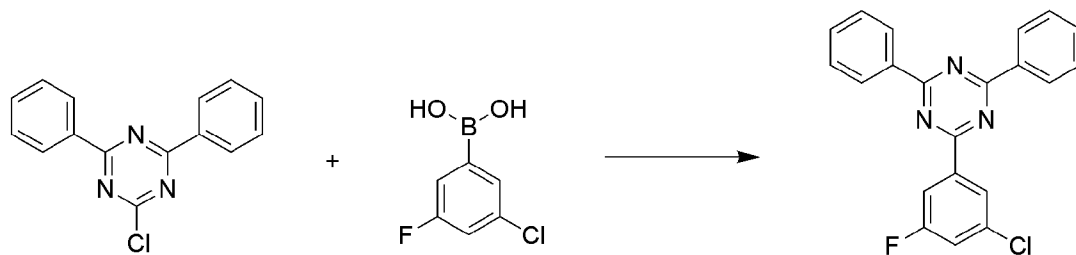
[312] 질소 분위기에서 C-2(50 g, 137.3 mmol)와 비스(피나콜라토)디보론(38.4 g, 151 mmol)를 1,4-디옥산 1000 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘아세테이트(39.6 g, 411.9 mmol)를 투입하고 충분히 교반한 후 팔라듐디벤질리덴아세톤팔라듐(2.4 g, 4.1 mmol) 및 트리스클로헥실포스핀 (2.3 g, 8.2 mmol)을 투입하였다. 5시간 반응 후 상온으로 식인 후 유기층을 필터처리하여 염을 제거한 후 걸러진 유기층을 증류하였다. 이를 다시 클로로포름 626 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에탄올재결정을 통해 회색의 고체 화합물 C-3(48.9g, 78%, MS: $[M+H]^+ = 457.3$)을 제조하였다.

[313]

[314] 제조예 4: 화합물 D-3의 제조

[315] 1) 화합물 D-1의 제조

[316]



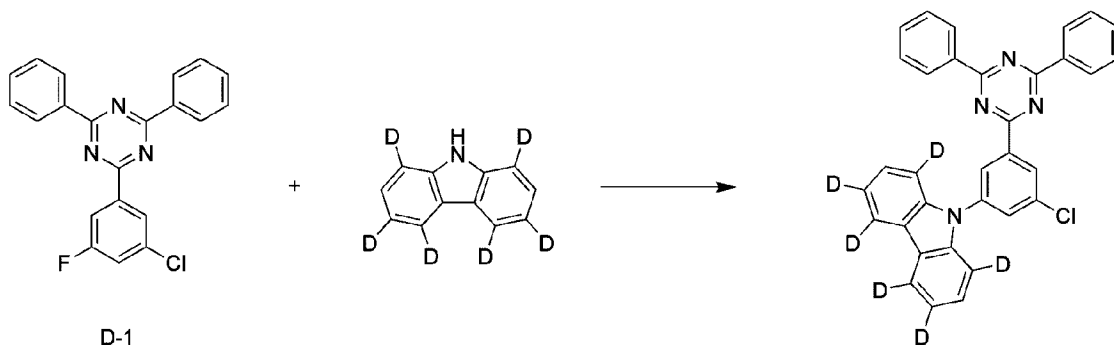
D-1

[317] 질소 분위기에서 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(100 g, 200.3 mmol)과 (3-chloro-5-fluorophenyl)boronic acid(68.7 g, 200.3 mmol)를 테트라하이드로퓨란 2000 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(83.1 g, 601 mmol)를 물 83 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(6.9 g, 6 mmol)을 투입하였다. 2시간 반응 후 상온으로 식인 후 유기층과 물층을 분리 후 유기층을 증류하였다. 이를 다시 클로로포름 1447 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 회색의 고체 화합물 D-1(41.2g, 57%, MS: $[M+H]^+ = 362.1$)을 제조하였다.

[318]

[319] 2) 화합물 D-2의 제조

[320]



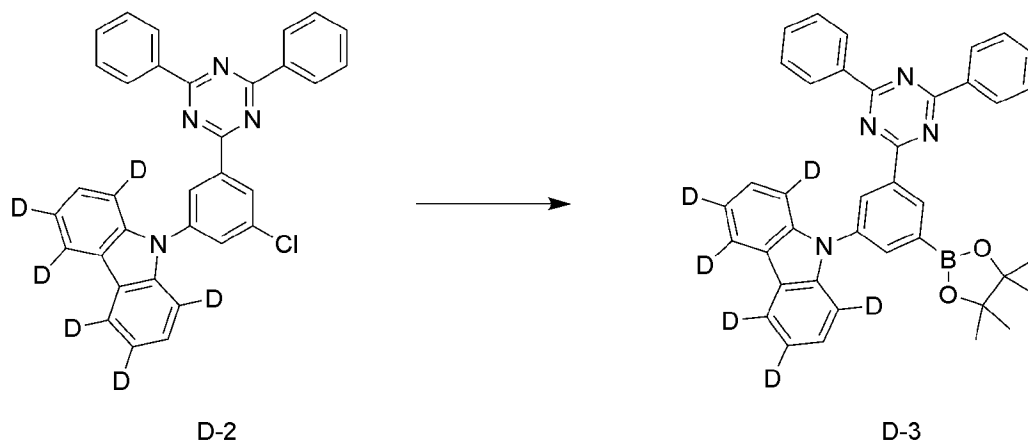
D-2

[321] 질소 분위기에서 D-1(30 g, 83.1 mmol)와 9H-carbazole-1,3,4,5,6,8-d₆(14.4 g, 83.1 mmol)를 다이메틸포름아마이드 600 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 삼인산포타슘(52.9 g, 249.3 mmol)를 투입하고 충분히 교반한 후 5시간 반응 후 상온으로 식인 후 유기층을 필터처리하여 염을 제거한 후 걸러진 유기층을 증류하였다. 이를 다시 클로로포름 427 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트를 이용하여 실리카 컬럼을 통해 정제하여 노랑의 고체 화합물 D-2(25.6g, 60%, MS: $[M+H]^+ = 515.2$)을 제조하였다.

[322]

[323] 3) 화합물 D-3의 제조

[324]

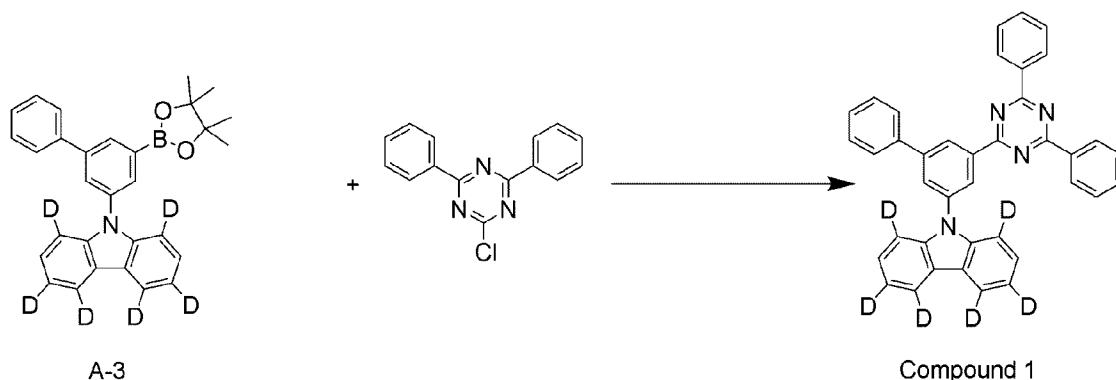


[325] 질소 분위기에서 D-2(50 g, 97.2 mmol)와 비스(피나콜라토)디보론(27.2 g, 107 mmol)를 1,4-디옥산 1000 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘아세테이트(28 g, 291.7 mmol)를 투입하고 충분히 교반한 후 팔라듐디벤질리덴아세톤팔라듐(1.7 g, 2.9 mmol) 및 트리시클로헥실포스핀 (1.6 g, 5.8 mmol)을 투입하였다. 7시간 반응 후 상온으로 식인 후 유기층을 필터처리하여 염을 제거한 후 걸러진 유기층을 증류하였다. 이를 다시 클로로포름 590 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에탄올재결정을 통해 회색의 고체 화합물 D-3(35.4g, 60%, MS: $[M+H]^+ = 607.3$)을 제조하였다.

[326]

[327] 합성예 1: 화합물 1의 제조

[328]



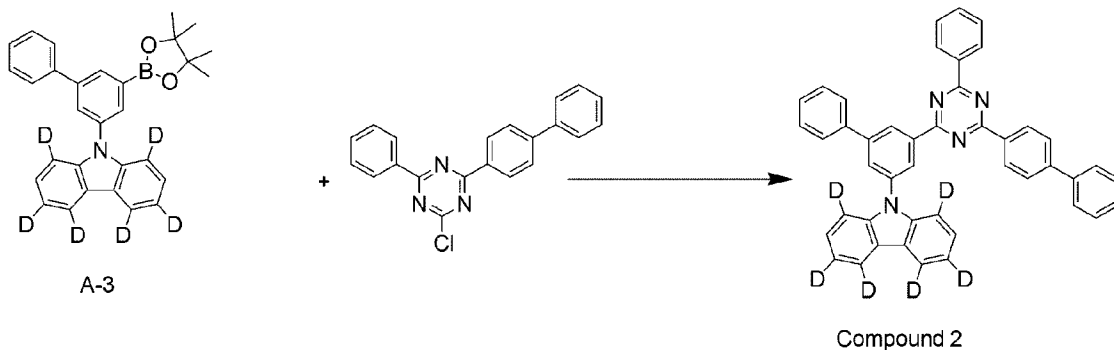
[329] 질소 분위기에서 A-3(20 g, 44.3 mmol)와 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(11.8 g, 44.3 mmol)를 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(18.4 g, 133 mmol)를 물 18 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.5 g, 1.3 mmol)을 투입하였다. 3시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1233 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여,

무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 Compound 1(19.2g, 78%, MS: $[M+H]^+ = 557.3$)을 제조하였다.

[330]

[331] **합성예 2: 화합물 2의 제조**

[332]



[333] 질소 분위기에서 A-3(20 g, 44.3 mmol)와

2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazine(15.2 g, 44.3 mmol)을

테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후

포타슘카보네이트(18.4 g, 133 mmol)를 물 18 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한

후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.5 g, 1.3 mmol)을 투입하였다. 2시간

반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1401

mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여,

무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한

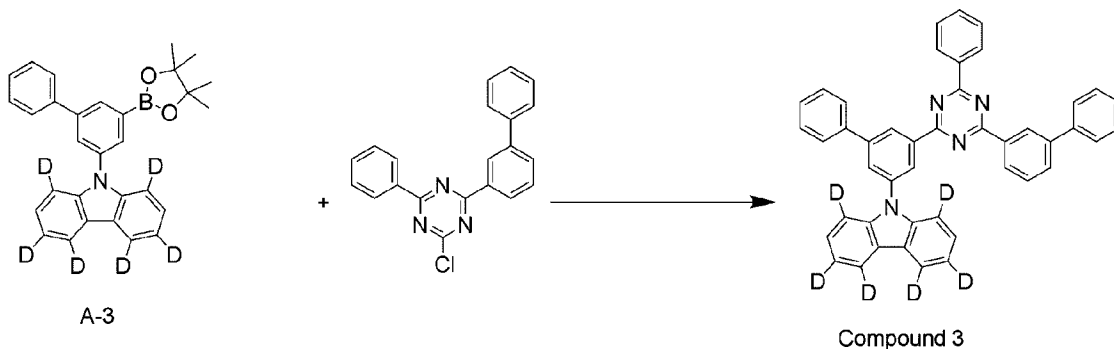
화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물

Compound 2(17.1g, 61%, MS: $[M+H]^+ = 633.3$)를 제조하였다.

[334]

[335] **합성예 3: 화합물 3의 제조**

[336]



[337] 질소 분위기에서 A-3(20 g, 44.3 mmol)와

2-([1,1'-biphenyl]-3-yl)-3-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazine(15.2 g, 44.3 mmol)를

테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후

포타슘카보네이트(18.4 g, 133 mmol)를 물 18 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한

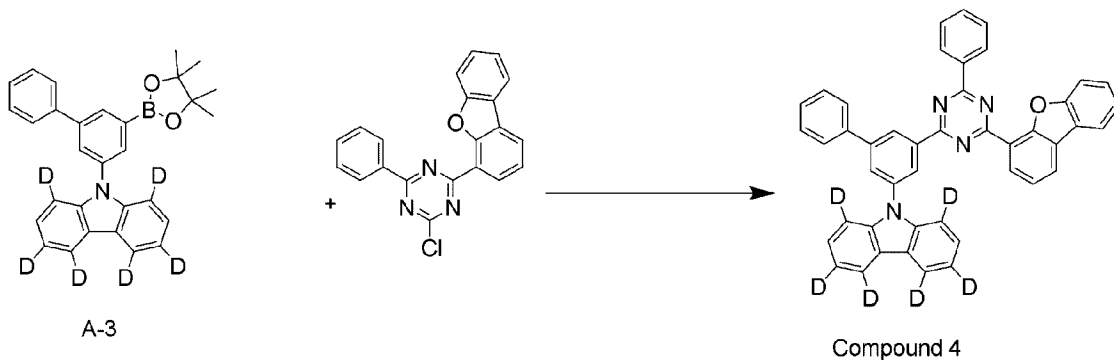
후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.5 g, 1.3 mmol)을 투입하였다. 3시간

반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1401 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 Compound 3(15.7g, 56%, MS: $[M+H]^+ = 633.3$)을 제조하였다.

[338]

[339] **합성예 4: 화합물 4의 제조**

[340]



[341] 질소 분위기에서 A-3(20 g, 44.3 mmol)과

2-chloro-4-(dibenzo[b,d]furan-4-yl)-6-phenyl-1,3,5-triazine(15.8 g, 44.3 mmol)를

테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후

포타슘카보네이트(18.4 g, 133 mmol)를 물 18 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.5 g, 1.3 mmol)을 투입하였다. 3시간

반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1432 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여,

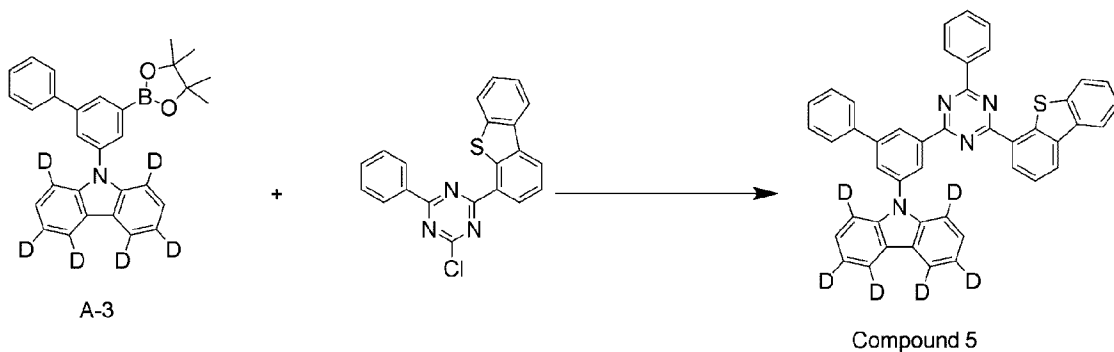
무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물

Compound 4(14.9g, 52%, MS: $[M+H]^+ = 647.3$)를 제조하였다.

[342]

[343] **합성예 5: 화합물 5의 제조**

[344]



[345] 질소 분위기에서 A-3(20 g, 44.3 mmol)와

2-chloro-4-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)-6-phenyl-1,3,5-triazine(16.5 g, 44.3 mmol)를

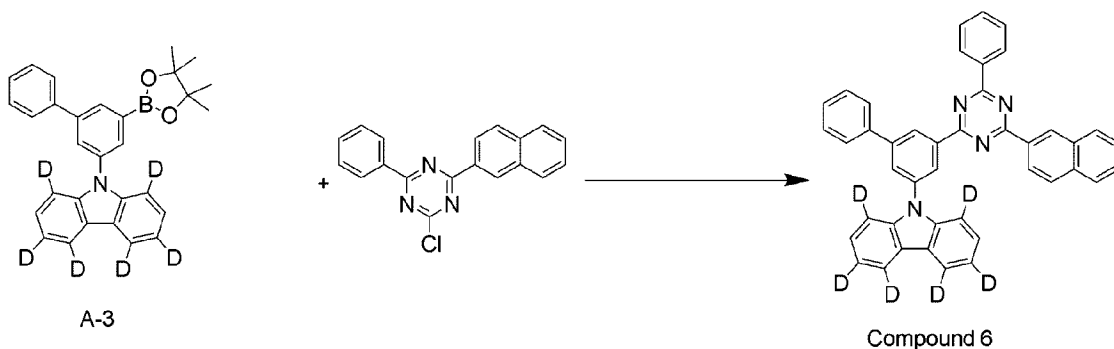
테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후

포타슘카보네이트(18.4 g, 133 mmol)를 물 18 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.5 g, 1.3 mmol)을 투입하였다. 3시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1468 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 Compound 5(21.1g, 72%, MS: $[M+H]^+ = 663.2$)를 제조하였다.

[346]

[347] **합성예 6: 화합물 6의 제조**

[348]



[349] 질소 분위기에서 A-3(20 g, 44.3 mmol)와

2-chloro-4-(naphthalen-2-yl)-6-phenyl-1,3,5-triazine(14.1 g, 44.3 mmol)를

테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후

포타슘카보네이트(18.4 g, 133 mmol)를 물 18 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한

후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.5 g, 1.3 mmol)을 투입하였다. 3시간

반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1344

mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여,

무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한

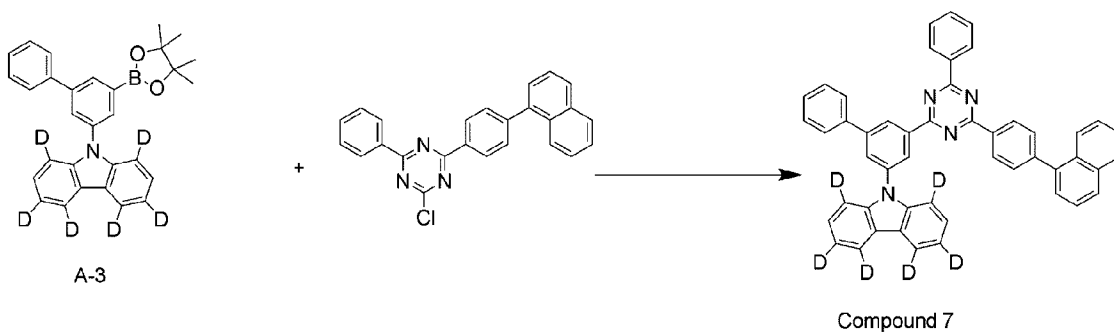
화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물

Compound 6(19.1g, 71%, MS: $[M+H]^+ = 607.3$)을 제조하였다.

[350]

[351] **합성예 7: 화합물 7의 제조**

[352]



[353] 질소 분위기에서 A-3(20 g, 44.3 mmol)와

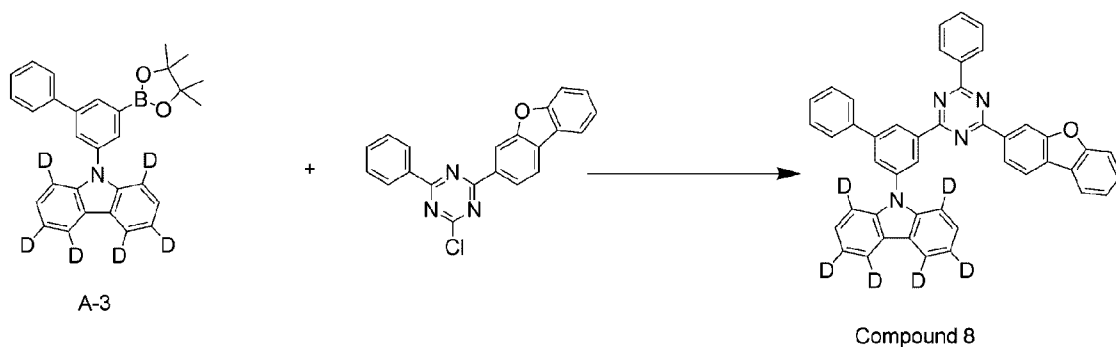
2-chloro-4-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)-6-phenyl-1,3,5-triazine(17.4 g, 44.3 mmol)를

테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후
 포타슘카보네이트(18.4 g, 133 mmol)를 물 18 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한
 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.5 g, 1.3 mmol)을 투입하였다. 2시간
 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1512
 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여,
 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한
 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물
 Compound 7(23.6g, 78%, MS: $[M+H]^+ = 683.3$)을 제조하였다.

[354]

[355] 합성예 8: 화합물 8의 제조

[356]



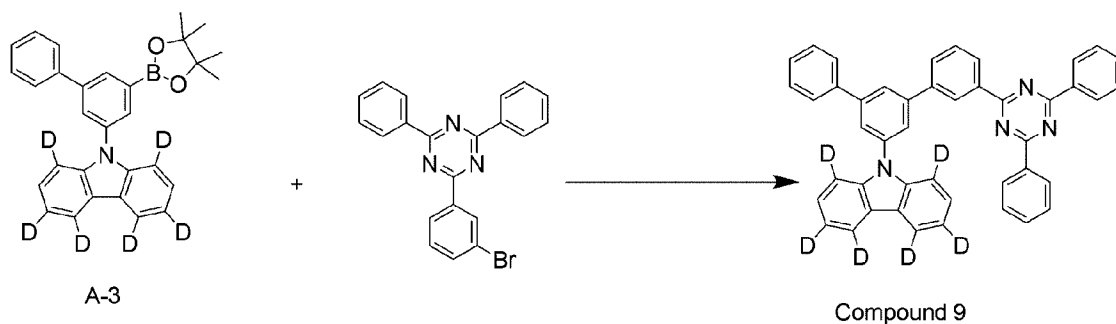
[357] 질소 분위기에서 A-3(20 g, 44.3 mmol)와

2-chloro-3-(dibenzo[b,d]furan-4-yl)-6-phenyl-1,3,5-triazine(15.8 g, 44.3 mmol)를
 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후
 포타슘카보네이트(18.4 g, 133 mmol)를 물 18 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한
 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.5 g, 1.3 mmol)을 투입하였다. 3시간
 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1432
 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여,
 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한
 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물
 Compound 8(18.9g, 66%, MS: $[M+H]^+ = 647.3$)을 제조하였다.

[358]

[359] 합성예 9: 화합물 9의 제조

[360]



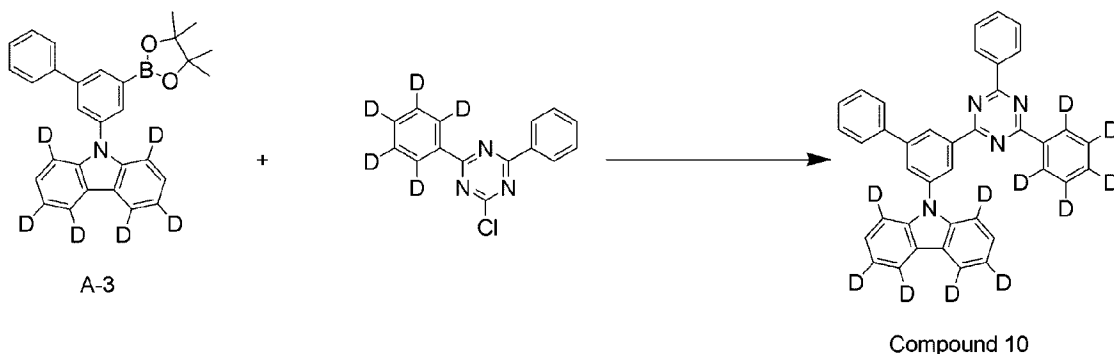
[361] 질소 분위기에서 A-3(20 g, 44.3 mmol)과

2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(17.2 g, 44.3 mmol)를 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(18.4 g, 133 mmol)를 물 18 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.5 g, 1.3 mmol)을 투입하였다. 3시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1401 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 Compound 9(15.4g, 55%, MS: $[M+H]^+ = 633.3$)을 제조하였다.

[362]

[363] 합성예 10: 화합물 10의 제조

[364]



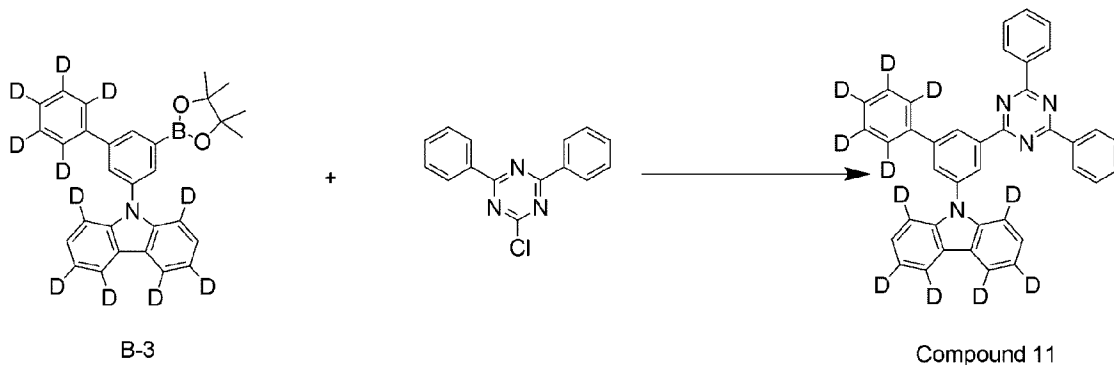
[365]

질소 분위기에서 A-3(20 g, 44.3 mmol)와 2-chloro-4-phenyl-6-(phenyl-d5)-1,3,5-triazine(12.3 g, 44.3 mmol)를 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(18.4 g, 133 mmol)를 물 18 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.5 g, 1.3 mmol)을 투입하였다. 1시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1244 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 Compound 10(15.7g, 63%, MS: $[M+H]^+ = 562.3$)을 제조하였다.

[366]

[367] 합성예 11: 화합물 11의 제조

[368]

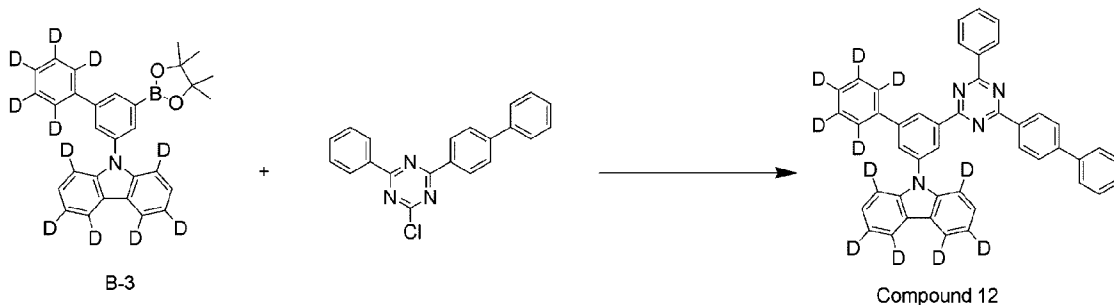


[369] 질소 분위기에서 B-3(20 g, 43.8 mmol)와 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(11.7 g, 43.8 mmol)를 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(18.2 g, 131.5 mmol)를 물 18 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.5 g, 1.3 mmol)을 투입하였다. 3시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1230 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 Compound 11(18.2g, 74%, MS: $[M+H]^+ = 562.3$)을 제조하였다.

[370]

[371] 합성예 12: 화합물 12의 제조

[372]

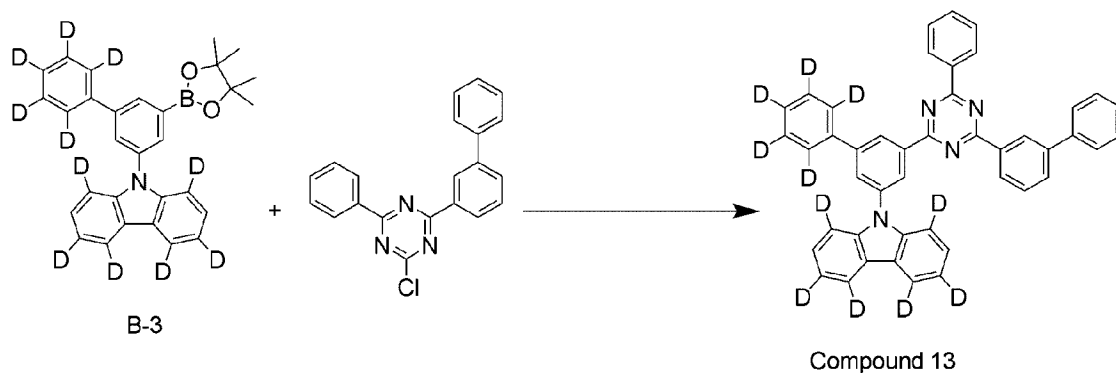


[373] 질소 분위기에서 B-3(20 g, 43.8 mmol)와 2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazine(15 g, 43.8 mmol)를 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(18.2 g, 131.5 mmol)를 물 18 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.5 g, 1.3 mmol)을 투입하였다. 2시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1397 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 Compound 12(15.4g, 55%, MS: $[M+H]^+ = 638.3$)을 제조하였다.

[374]

[375] 합성예 13: 화합물 13의 제조

[376]



[377]

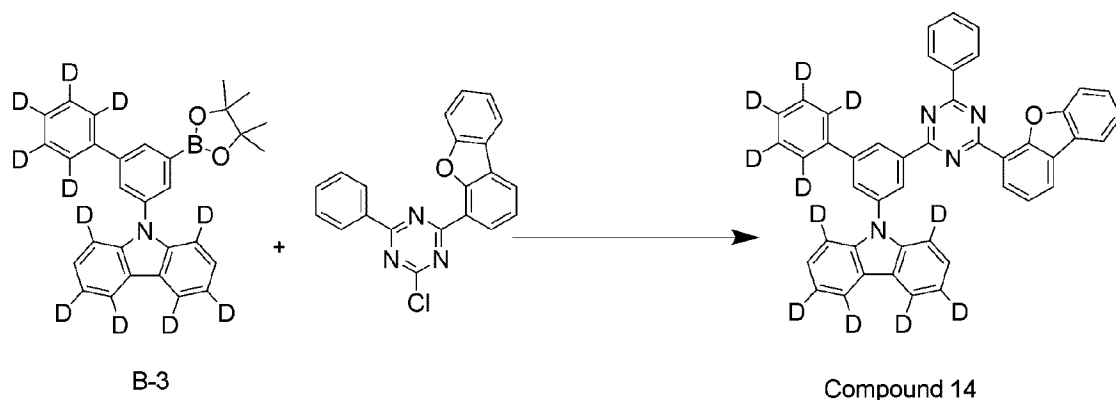
질소 분위기에서 B-3(20 g, 43.8 mmol)와 2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-3-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazine(15 g, 43.8 mmol)를 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(18.2 g, 131.5 mmol)를 물 18 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.5 g, 1.3 mmol)을 투입하였다. 2시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1397 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 Compound 13(14.8g, 53%, MS: $[M+H]^+ = 638.3$)을 제조하였다.

[378]

[379]

합성예 14: 화합물 14의 제조

[380]



[381]

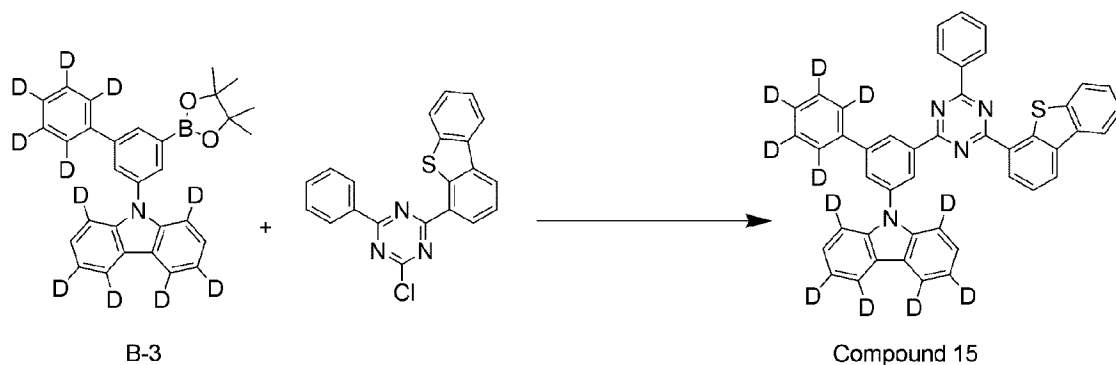
질소 분위기에서 B-3(20 g, 43.8 mmol)와 2-chloro-4-(dibenzo[b,d]furan-4-yl)-6-phenyl-1,3,5-triazine(15.7 g, 43.8 mmol)를 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(18.2 g, 131.5 mmol)를 물 18 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.5 g, 1.3 mmol)을 투입하였다. 1시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1427 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물

Compound 14(22.3g, 78%, MS: $[M+H]^+ = 652.3$)을 제조하였다.

[382]

[383] 합성예 15: 화합물 15의 제조

[384]



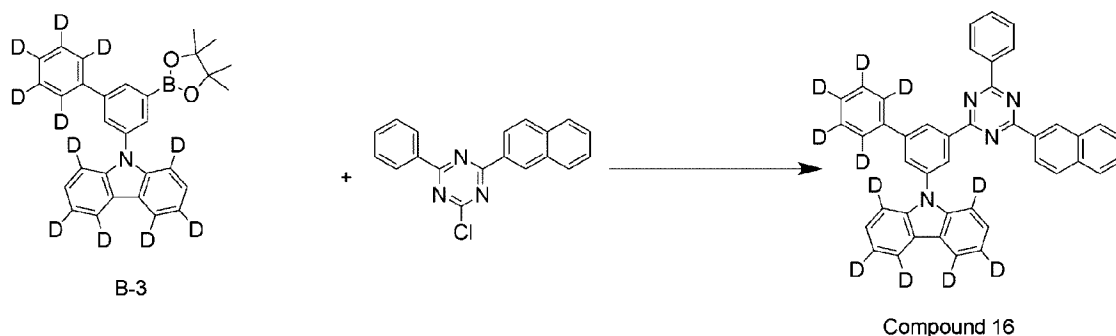
[385] 질소 분위기에서 B-3(20 g, 43.8 mmol)와

2-chloro-4-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)-6-phenyl-1,3,5-triazine(16.4 g, 43.8 mmol)를 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(18.2 g, 131.5 mmol)를 물 18 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.5 g, 1.3 mmol)을 투입하였다. 1시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1462 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 Compound 15(17.8g, 61%, MS: $[M+H]^+ = 668.2$)을 제조하였다.

[386]

[387] 합성예 16: 화합물 16의 제조

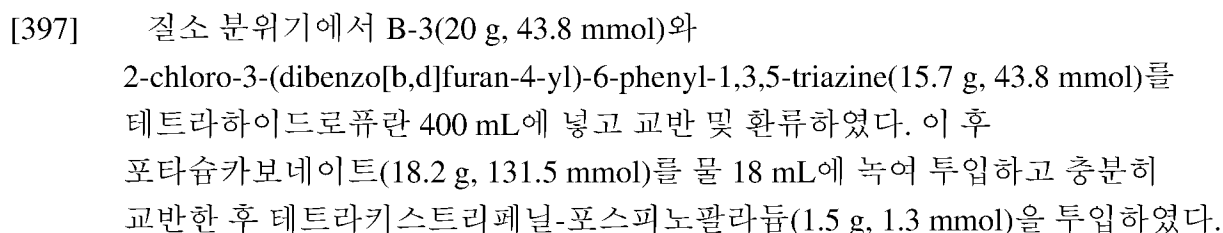
[388]



[389] 질소 분위기에서 B-3(20 g, 43.8 mmol)와

2-chloro-4-(naphthalen-2-yl)-6-phenyl-1,3,5-triazine(13.9 g, 43.8 mmol)를 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(18.2 g, 131.5 mmol)를 물 18 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.5 g, 1.3 mmol)을 투입하였다. 2시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1340 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여,

[392]

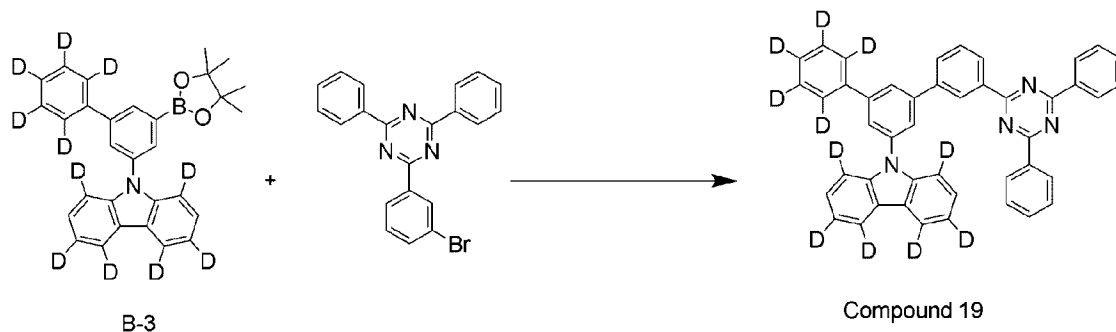


2시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1427 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 Compound 18(15.1g, 53%, MS: $[M+H]^+ = 652.3$)을 제조하였다.

[398]

[399] **합성 예 19: 화합물 19의 제조**

[400]



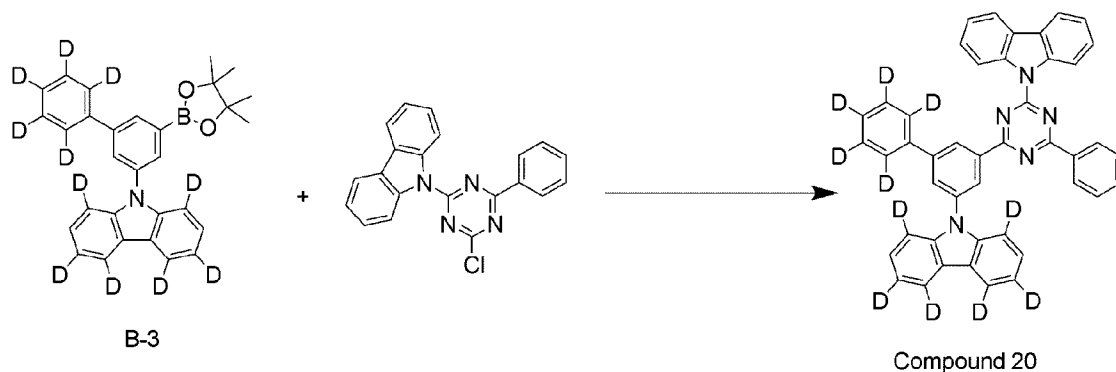
[401] 질소 분위기에서 B-3(20 g, 43.8 mmol)와

2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(17 g, 43.8 mmol)를 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(18.2 g, 131.5 mmol)를 물 18 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.5 g, 1.3 mmol)을 투입하였다. 3시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1408 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 Compound 19(22.5g, 80%, MS: $[M+H]^+ = 643.3$)를 제조하였다.

[402]

[403] **합성 예 20: 화합물 20의 제조**

[404]



[405] 질소 분위기에서 B-3(100 g, 219.2 mmol)와

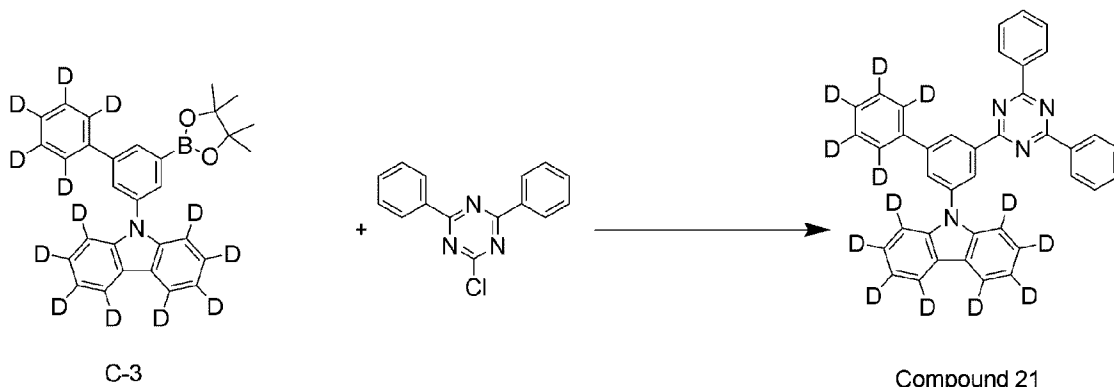
9-(4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazole(78 g, 219.2 mmol)를 테트라하이드로퓨란 2000 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후

포타슘카보네이트(90.9 g, 657.5 mmol)를 물 91 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(7.6 g, 6.6 mmol)을 투입하였다. 2시간 반응 후 상온으로 식인 후 유기층과 물층을 분리 후 유기층을 증류하였다. 이를 다시 클로로포름 2850 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 회색의 고체 화합물 Compound 20(102.6g, 72%, MS: $[M+H]^+ = 651.3$)을 제조하였다.

[406]

[407] 합성예 21: 화합물 21의 제조

[408]

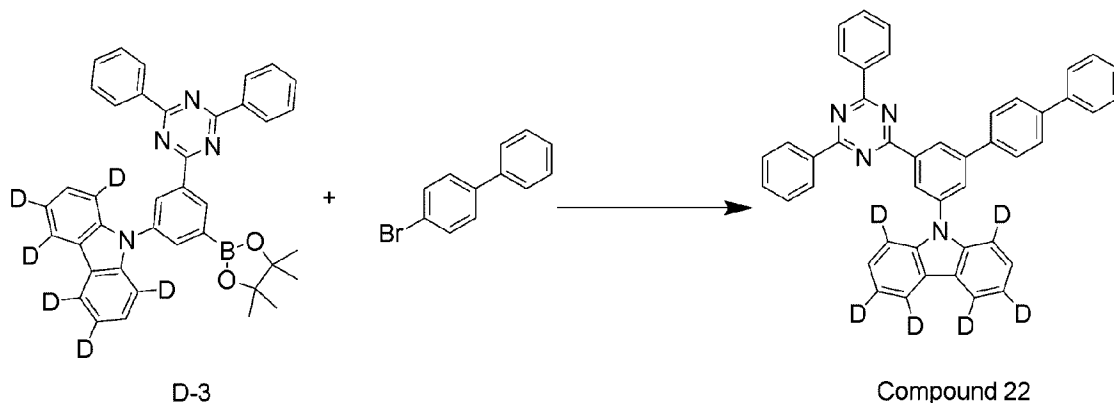


[409] 질소 분위기에서 C-3(20 g, 43.6 mmol)와 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(11.7 g, 43.6 mmol)를 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(18.1 g, 130.9 mmol)를 물 18 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.5 g, 1.3 mmol)을 투입하였다. 2시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1229 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 Compound 21(13g, 53%, MS: $[M+H]^+ = 564.3$)을 제조하였다.

[410]

[411] 합성예 22: 화합물 22의 제조

[412]

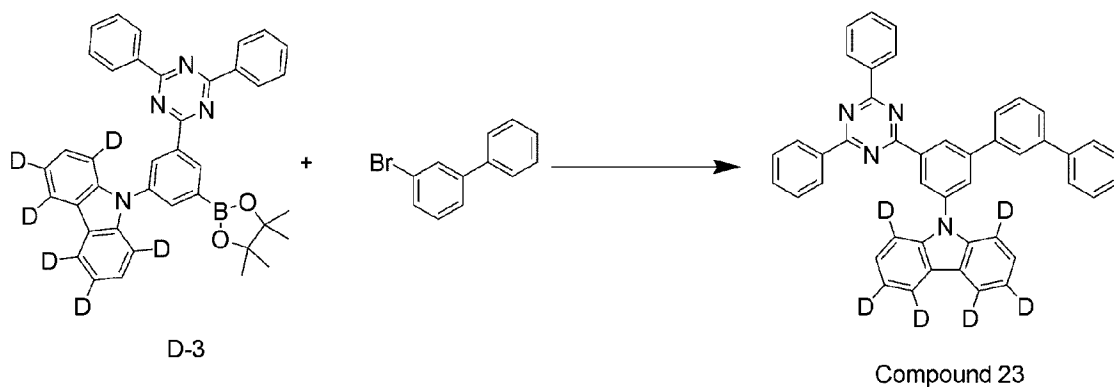


[413] 질소 분위기에서 D-3(20 g, 32.9 mmol)와 4-bromo-1,1'-biphenyl(7.6 g, 32.9 mmol)를 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(13.6 g, 98.6 mmol)를 물 14 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.1 g, 1 mmol)을 투입하였다. 1시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1040 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 Compound 22(13.3g, 64%, MS: $[M+H]^+ = 633.3$)을 제조하였다.

[414]

[415] 합성예 23: 화합물 23의 제조

[416]

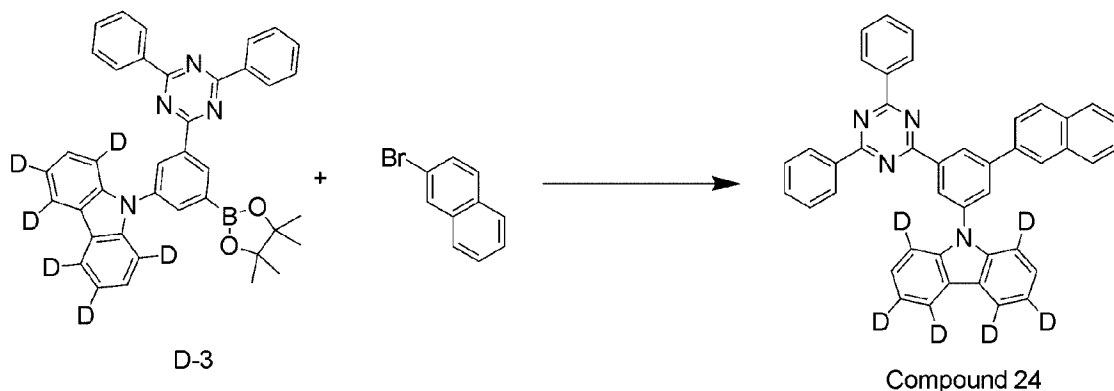


[417] 질소 분위기에서 D-3(20 g, 32.9 mmol)와 3-bromo-1,1'-biphenyl(7.6 g, 32.9 mmol)를 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(13.6 g, 98.6 mmol)를 물 14 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.1 g, 1 mmol)을 투입하였다. 2시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1040 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 Compound 23(16.2g, 78%, MS: $[M+H]^+ = 633.3$)을 제조하였다.

[418]

[419] 합성예 24: 화합물 24의 제조

[420]

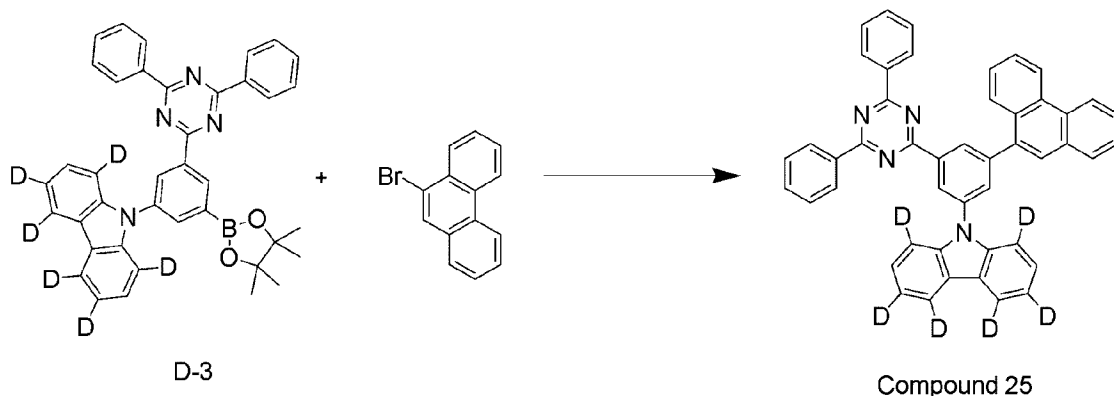


[421] 질소 분위기에서 D-3(20 g, 32.9 mmol)와 2-bromonaphthalene(6.8 g, 32.9 mmol)를 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(13.6 g, 98.6 mmol)를 물 14 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.1 g, 1 mmol)을 투입하였다. 3시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 997 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 Compound 24(13g, 65%, MS: $[M+H]^+ = 607.3$)를 제조하였다.

[422]

[423] 합성예 25: 화합물 25의 제조

[424]

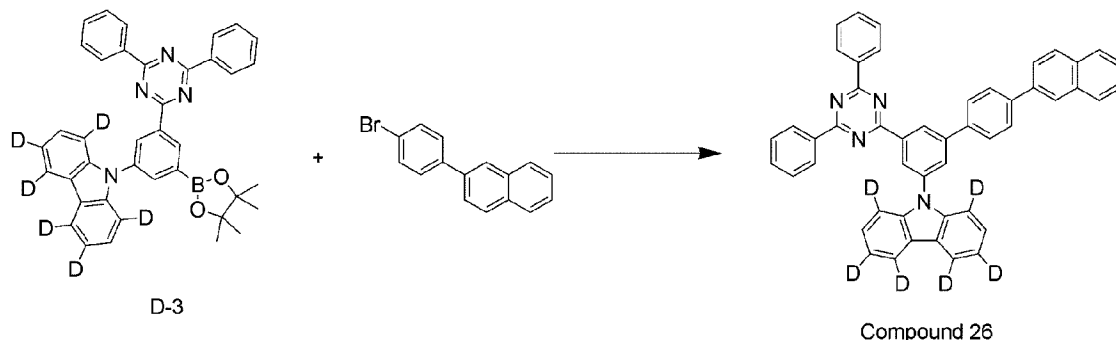


[425] 질소 분위기에서 D-3(20 g, 32.9 mmol)와 9-bromophenanthrene(8.4 g, 32.9 mmol)를 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(13.6 g, 98.6 mmol)를 물 14 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.1 g, 1 mmol)을 투입하였다. 3시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1079 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 Compound 25(13.6g, 63%, MS: $[M+H]^+ = 657.3$)를 제조하였다.

[426]

[427] 합성예 26: 화합물 26의 제조

[428]

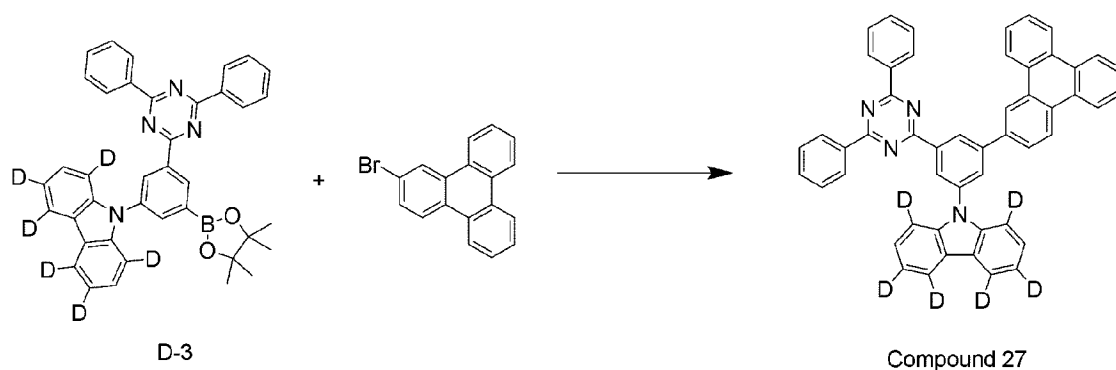


[429] 질소 분위기에서 D-3(20 g, 32.9 mmol)와 2-(4-bromophenyl)naphthalene(9.3 g, 32.9 mmol)를 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(13.6 g, 98.6 mmol)를 물 14 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.1 g, 1 mmol)을 투입하였다. 3시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1122 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 Compound 26(15g, 67%, MS: $[M+H]^+ = 683.3$)을 제조하였다.

[430]

[431] 합성예 27: 화합물 27의 제조

[432]

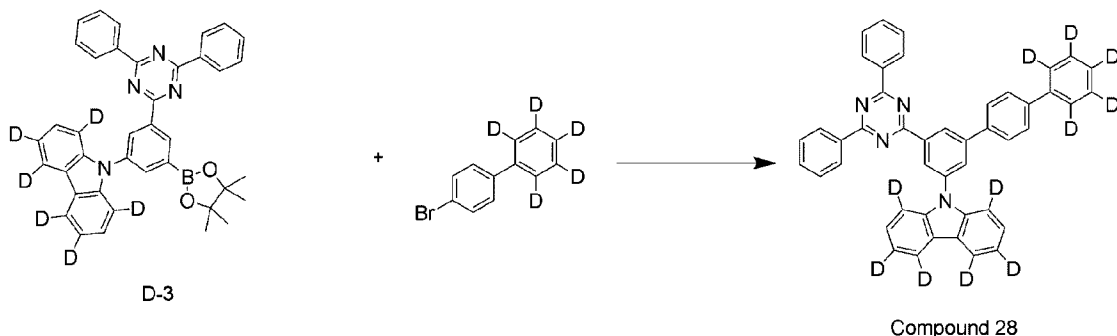


[433] 질소 분위기에서 D-3(20 g, 32.9 mmol)와 2-bromotriphenylene(11.7 g, 32.9 mmol)를 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(13.6 g, 98.6 mmol)를 물 14 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.1 g, 1 mmol)을 투입하였다. 1시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1161 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 Compound 27(16.7g, 72%, MS: $[M+H]^+ = 707.3$)을 제조하였다.

[434]

[435] 합성예 28: 화합물 28의 제조

[436]

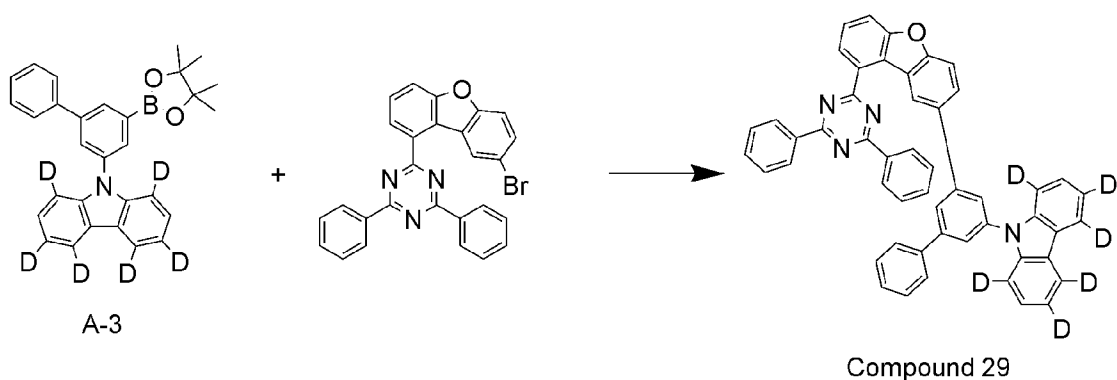


[437] 질소 분위기에서 D-3(20 g, 32.9 mmol)와 4-bromo-1,1'-biphenyl-2',3',4',5',6'-d₅(7.8 g, 32.9 mmol)를 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(13.6 g, 98.6 mmol)를 물 14 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.1 g, 1 mmol)을 투입하였다. 3시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1048 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 Compound 28(11.1g, 53%, MS: [M+H]⁺ = 638.3)을 제조하였다.

[438]

[439] 합성예 29: 화합물 29의 제조

[440]



[441] 질소 분위기에서 A-3(20 g, 44.3 mmol)와 2-(8-bromodibenzo[b,d]furan-1-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(21.1 g, 44.3 mmol)를 테트라하이드로퓨란 400 mL에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(18.4 g, 133 mmol)를 물 18 mL에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(1.5 g, 1.3 mmol)을 투입하였다. 3시간 반응 후 상온으로 식인 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름 1601 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에틸아세테이트 재결정을 통해 노랑의 고체 화합물

Compound 29(23.4g, 73%, MS: $[M+H]^+ = 723.3$)를 제조하였다.

[442]

[443] 실시예 1: 유기 발광 소자의 제조

[444] ITO(indium tin oxide)가 1,300Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이때, 세제로는 피셔사(Fischer Co.) 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀리포어사(Millipore Co.) 제품의 필터(Filter)로 2차로 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30분간 세척한 후 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한, 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 수송시켰다.

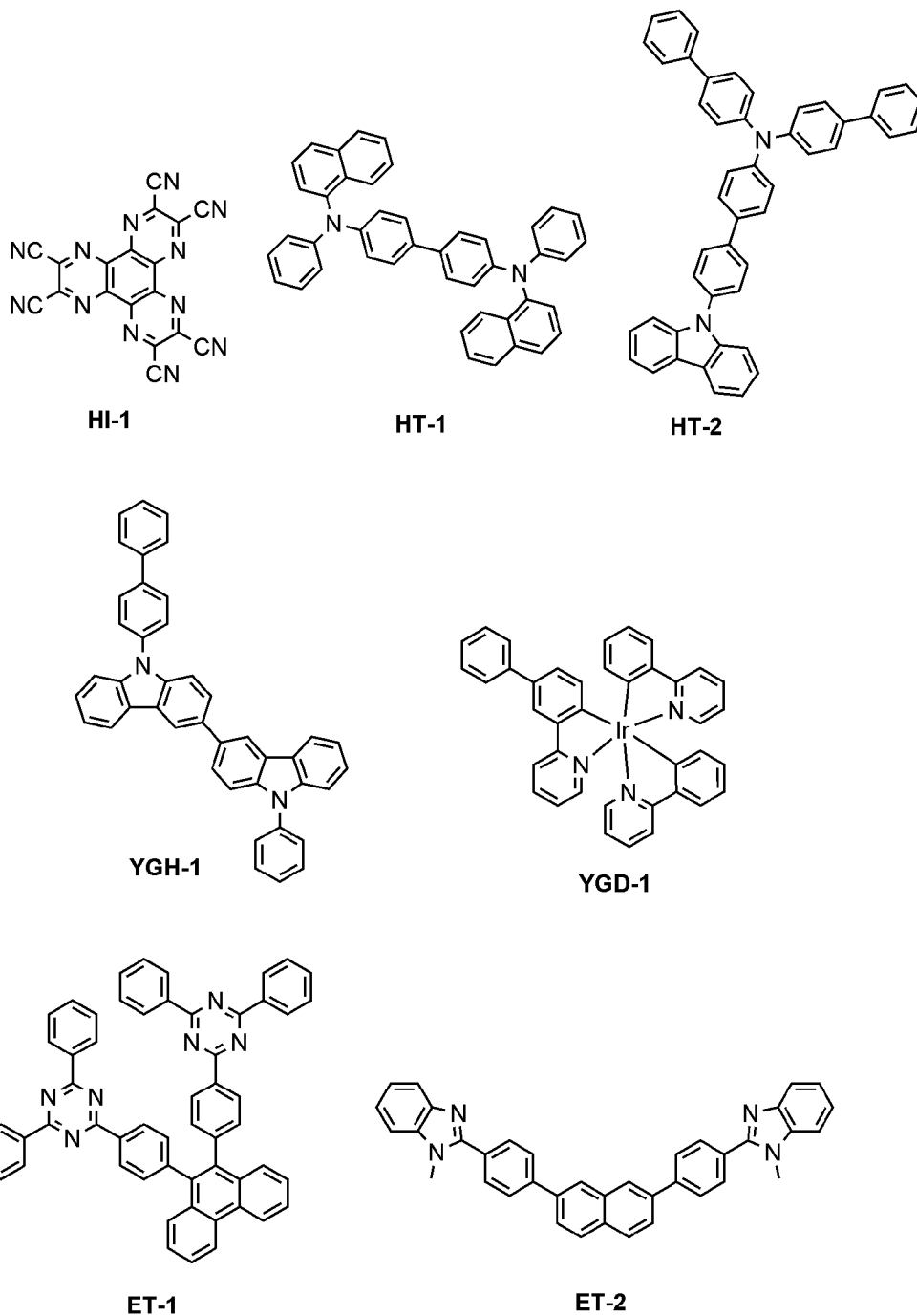
[445] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에 하기 HI-1 화합물을 50Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 위에 하기 HT-1 화합물을 250Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공수송층을 형성하고, HT-1 증착막 위에 하기 HT-2 화합물을 50Å 두께로 진공 증착하여 전자저지층을 형성하였다.

[446] 상기 HT-2 증착막 위에 발광층으로서 앞서 합성에 1에서 제조한 화합물 1, 하기 YGH-1 화합물, 및 인광도펀트 YGD-1을 44:44:12의 중량비로 공증착하여 400Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[447] 상기 발광층 위에 하기 ET-1 화합물을 250Å의 두께로 진공 증착하여 전자수송층을 형성하고, 상기 전자수송층 위에 하기 ET-2 화합물 및 LiF를 8:2의 중량비로 진공 증착하여 100Å 두께의 전자주입층을 형성하였다. 상기 전자주입층 위에 1000Å 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다.

[448]

[449]



[450]

[451] 상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 $0.4 \sim 0.7 \text{ \AA/sec}$ 를 유지하였고, 알루미늄은 $2 \text{ \AA/sec}$ 의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는 $1 \times 10^{-7} \sim 5 \times 10^{-8} \text{ torr}$ 를 유지하였다.

[452]

[453] 실시예 2 내지 29

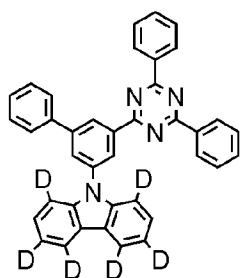
[454] 상기 실시예 1에서 발광층의 호스트 물질 중 하나로 합성에 1의 화합물 1 대신 하기 표 1에 기재된 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

[455]

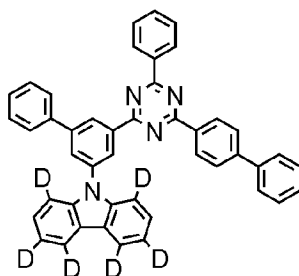
[456] 이 때, 실시예 1 내지 29에 사용된 화합물의 구조를 정리하면 하기와 같다.

[457]

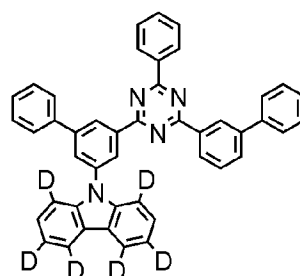
[458]



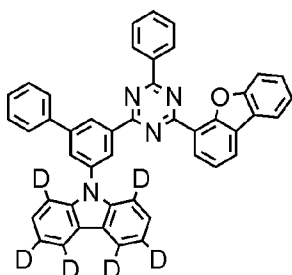
Compound 1



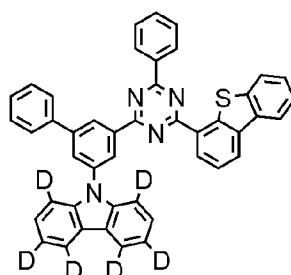
Compound 2



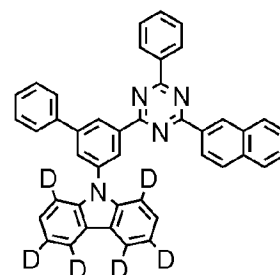
Compound 3



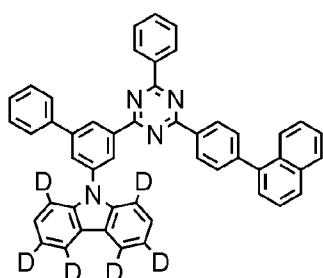
Compound 4



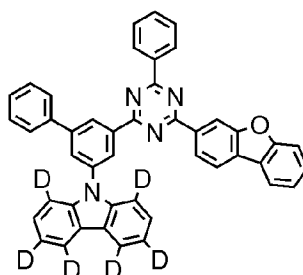
Compound 5



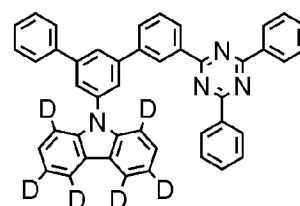
Compound 6



Compound 7



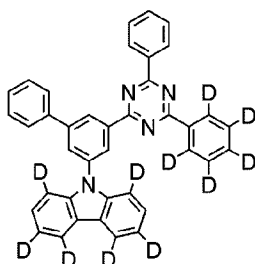
Compound 8



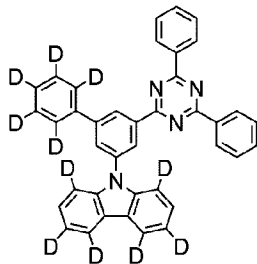
Compound 9

[459]

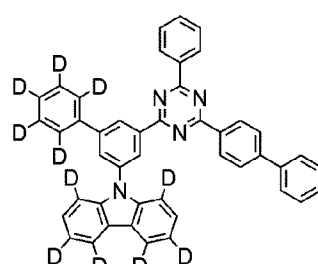
[460]



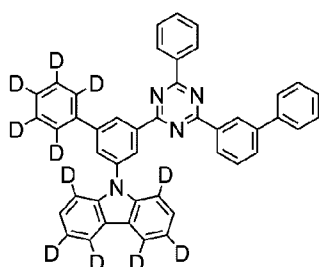
Compound 10



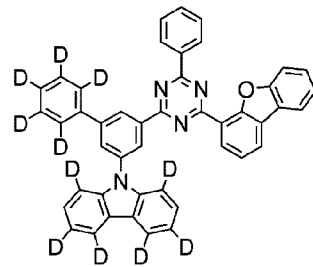
Compound 11



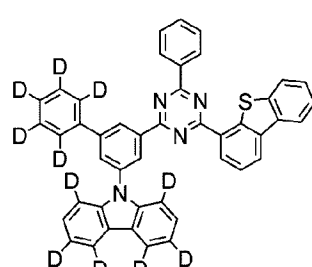
Compound 12



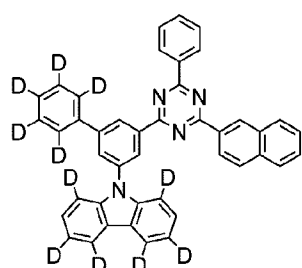
Compound 13



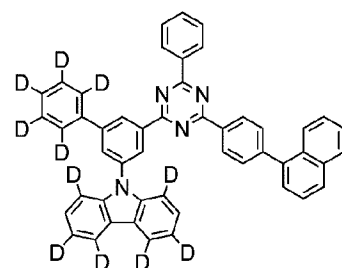
Compound 14



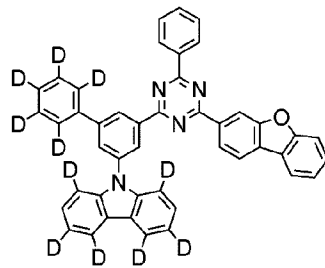
Compound 15



Compound 16

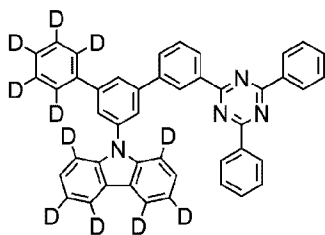


Compound 17

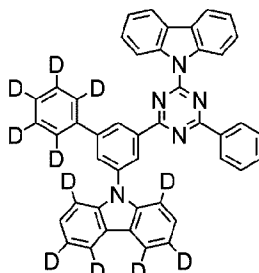


Compound 18

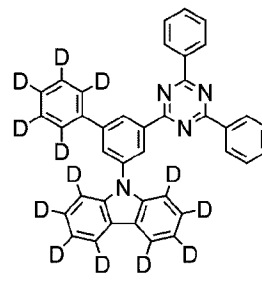
[461]



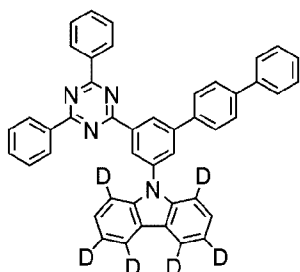
Compound 19



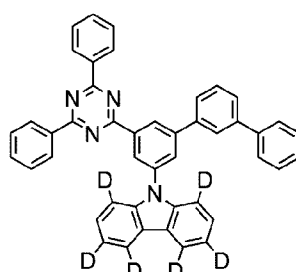
Compound 20



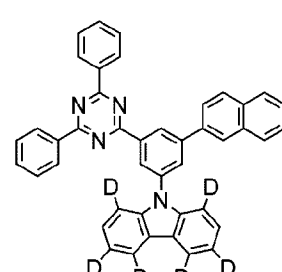
Compound 21



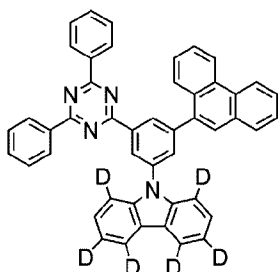
Compound 22



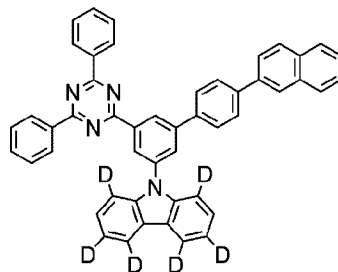
Compound 23



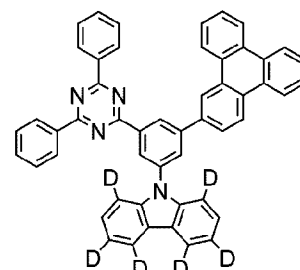
Compound 24



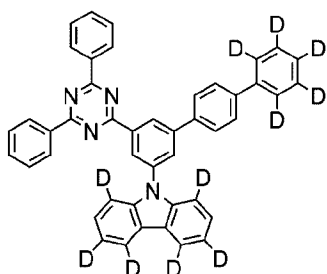
Compound 25



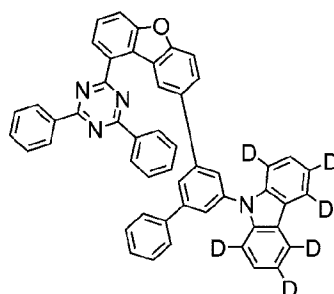
Compound 26



Compound 27



Compound 28



Compound 29

[462]

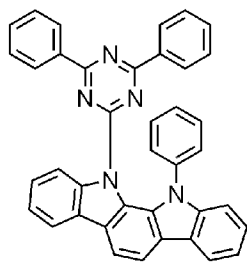
[463] **비교예 1 내지 4**

[464] 상기 실시예 1에서 발광층의 호스트 물질 중 하나로 합성에 1의 화합물 1 대신 하기 표 1에 기재된 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다. 이 때, 하기 표 1의 CE1 내지

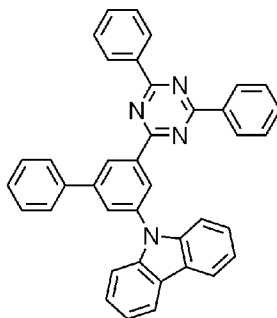
CE4의 화합물은 하기와 같다.

[465]

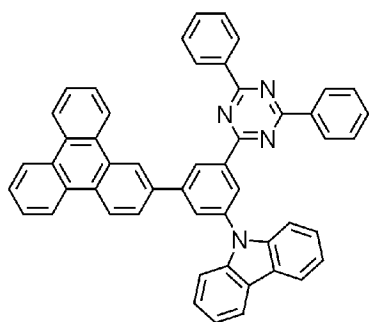
[466]



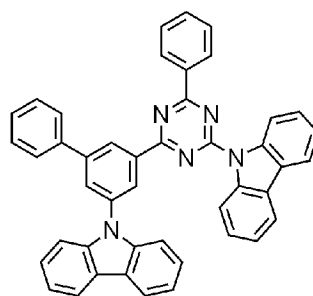
CE1



CE2



CE3



CE4

[467]

[468] 실험예 1: 소자 특성 평가

[469] 상기 실시예 및 비교예에서 제조된 유기 발광 소자 각각에 대하여 10 mA/cm²의 전류 밀도에서 전압과 효율을 측정하였고, 50 mA/cm²의 전류 밀도에서 수명을 측정하여 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다. 이때, LT95는 초기 휘도 대비 95%가 되는 시간을 의미한다.

[470]

[471] [표1]

	화합물	전압(V) (@10mA/cm ²)	효율(Cd/A) (@10mA/cm ²)	색좌표 (x,y)	수명(h) (LT ₉₅ at 50mA/cm ²)
실시예 1	화합물 1	4	82	0.45, 0.54	160
실시예 2	화합물 2	4.1	83	0.45, 0.54	180
실시예 3	화합물 3	4.2	81	0.45, 0.54	200
실시예 4	화합물 4	4.2	82	0.45, 0.53	170
실시예 5	화합물 5	4.3	80	0.45, 0.54	220
실시예 6	화합물 6	4.2	81	0.45, 0.54	150
실시예 7	화합물 7	4.3	80	0.45, 0.53	150
실시예 8	화합물 8	4.2	81	0.45, 0.54	230
실시예 9	화합물 9	4.2	84	0.45, 0.53	140
실시예 10	화합물 10	4	82	0.45, 0.54	180
실시예 11	화합물 11	4	82	0.45, 0.54	180
실시예 12	화합물 12	4.1	83	0.45, 0.54	200
실시예 13	화합물 13	4.2	81	0.45, 0.54	220
실시예 14	화합물 14	4.2	82	0.45, 0.54	190
실시예 15	화합물 15	4.3	80	0.45, 0.53	240
실시예 16	화합물 16	4.2	81	0.45, 0.54	160
실시예 17	화합물 17	4.3	80	0.45, 0.54	160
실시예 18	화합물 18	4.2	81	0.45, 0.53	250
실시예 19	화합물 19	4.2	84	0.45, 0.54	150
실시예 20	화합물 20	4.3	77	0.45, 0.53	190
실시예 21	화합물 21	4	82	0.45, 0.53	190
실시예 22	화합물 22	4.1	82	0.45, 0.53	160
실시예 23	화합물 23	4.2	79	0.45, 0.53	170
실시예 24	화합물 24	4.2	79	0.45, 0.53	150
실시예 25	화합물 25	4.3	80	0.45, 0.53	160
실시예 26	화합물 26	4.2	80	0.45, 0.53	160
실시예 27	화합물 27	4.3	79	0.45, 0.53	200

실시예 28	화합물 28	4.1	82	0.45, 0.53	170
실시예 29	화합물 29	4.3	79	0.45, 0.53	230
비교예 1	CE1	4.1	75	0.45, 0.53	100
비교예 2	CE2	4	82	0.45, 0.54	100
비교예 3	CE3	4.3	79	0.45, 0.53	120
비교예 4	CE4	4.3	77	0.45, 0.53	110

[472]

[473]

상기 표 1에 나타난 바와 같이, 발광층의 호스트 물질로 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 사용한 실시예의 유기 발광 소자는, 이와는 상이한 구조를 갖는 화합물을 사용한 비교예의 유기 발광 소자에 비하여 효율의 감소 없이 현저히 향상된 수명 특성을 나타냄을 알 수 있다. 따라서, 일반적으로 유기 발광 소자의 발광 효율 및 수명 특성은 서로 트레이드-오프(Trade-off) 관계를 갖는 점을 고려할 때 본 발명의 화합물은 비교화합물 대비 유기 발광 소자의 특성을 향상시킬 수 있음이 확인 가능하다.

[474]

[475]

[부호의 설명]

[476]

1: 기판 2: 양극

[477]

3: 발광층 4: 음극

[478]

5: 정공주입층 6: 정공수송층

[479]

7: 전자저지층 8: 전자수송층

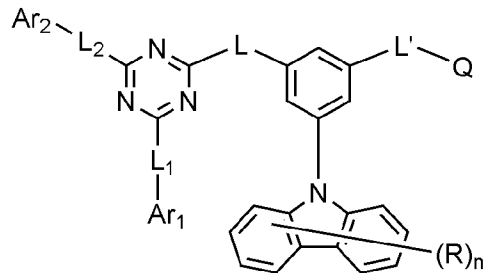
[480]

9: 전자주입층

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

L은 단일 결합; 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴렌; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C₂₋₆₀ 헤테로아릴렌이고,

L₁ 및 L₂는 각각 독립적으로 단일 결합; 또는 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴렌이고,

Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C₂₋₆₀ 헤테로아릴이고,

L'은 단일 결합; 또는 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴렌이고,

Q는 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴이고,

R은 중수소; 또는 중수소로 치환된 페닐이고,

n은 1 내지 8의 정수이다.

[청구항 2] 제1항에 있어서,

L은 단일 결합, 페닐렌, 비페닐디일, 나프틸렌, 또는 디벤조푸라닐렌, 디벤조티오페닐렌인, 화합물.

[청구항 3] 제1항에 있어서,

L₁ 및 L₂는 각각 독립적으로 단일 결합, 또는 페닐렌인, 화합물.

[청구항 4] 제1항에 있어서,

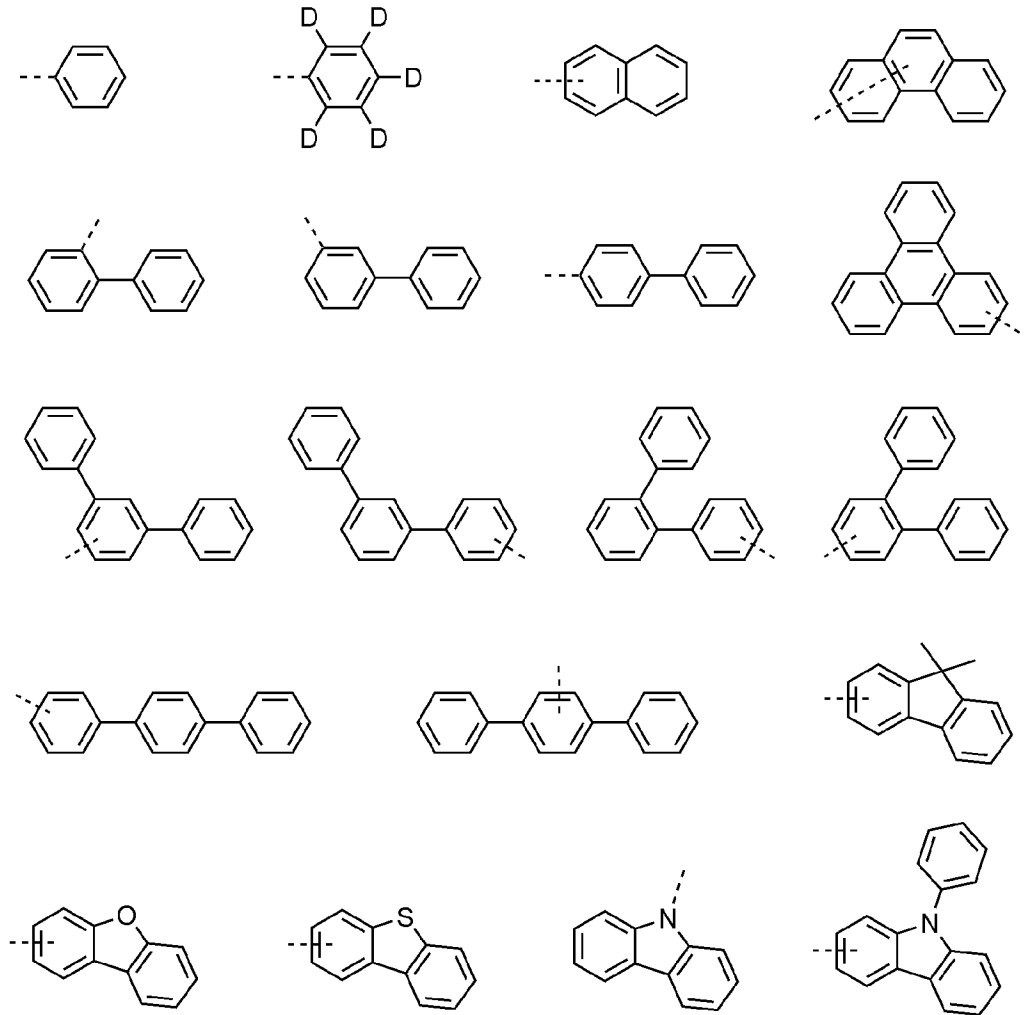
Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 트리페닐레닐, 플루오레닐, 디벤조푸라닐, 디벤조티오페닐, 또는 카바졸일이고,

여기서, Ar₁ 및 Ar₂는 비치환되거나, 또는 중수소, 메틸 및 페닐로 구성되는 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환되는, 화합물.

[청구항 5] 제4항에 있어서,

Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는

어느 하나인,
화합물:



[청구항 6] 제1항에 있어서,
 Ar_1 및 Ar_2 중 적어도 하나는 비치환되거나, 또는 중수소로 치환된 C_{6-12} 아릴인,
화합물.

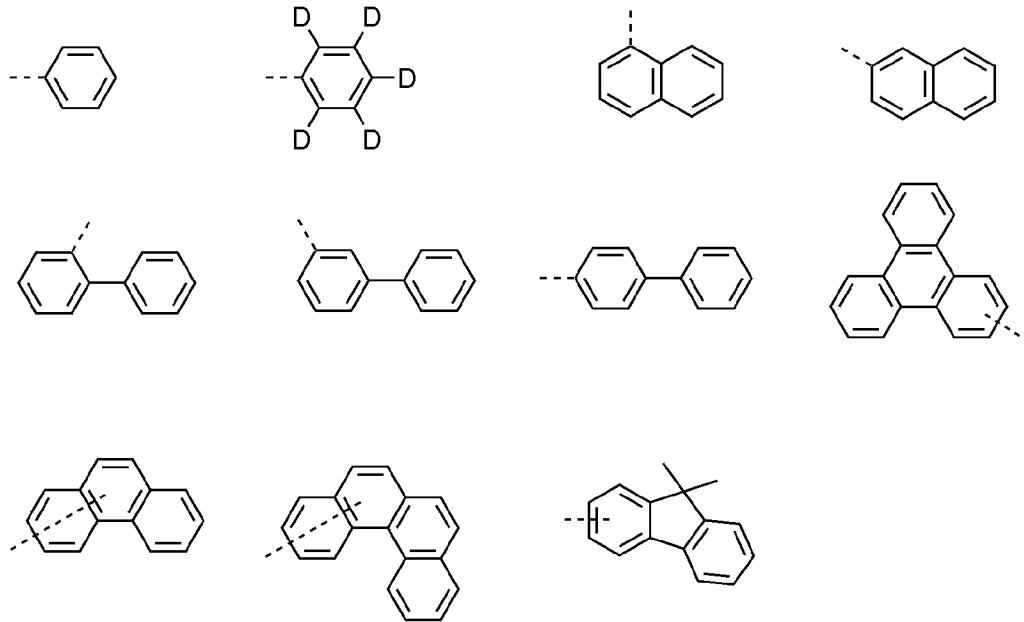
[청구항 7] 제1항에 있어서,
L이 단일 결합이면서, Ar_1 및 Ar_2 가 각각 독립적으로 페닐, 5개의 중수소로 치환된 페닐, 비페닐릴, 터페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 트리페닐레닐, 9,9-디메틸플루오레닐, 디벤조퓨라닐, 디벤조티오펜, 카바졸일, 또는 9-페닐카바졸일이거나; 또는
L이 C_{6-20} 아릴렌 또는 O 및 S 중 1개의 헤테로원자를 포함하는 C_{2-20} 헤테로아릴렌이면서, Ar_1 및 Ar_2 가 모두 페닐인,
화합물.

[청구항 8] 제1항에 있어서,

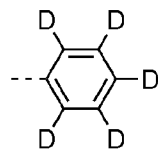
L'는 단일 결합, 또는 페닐렌인,
화합물.

[청구항 9] 제1항에 있어서,
Q는 페닐, 비페닐릴, 나프틸, 페난트릴, 트리페닐레닐, 벤조페난트릴,
또는 9,9-디메틸플루오레닐이고,
여기서, Q는 비치환되거나, 또는 중수소로 치환된,
화합물.

[청구항 10] 제9항에 있어서,
Q는 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나인,
화합물:



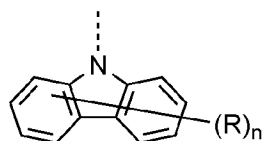
[청구항 11] 제1항에 있어서,
R은 중수소, 또는



인,

화합물.

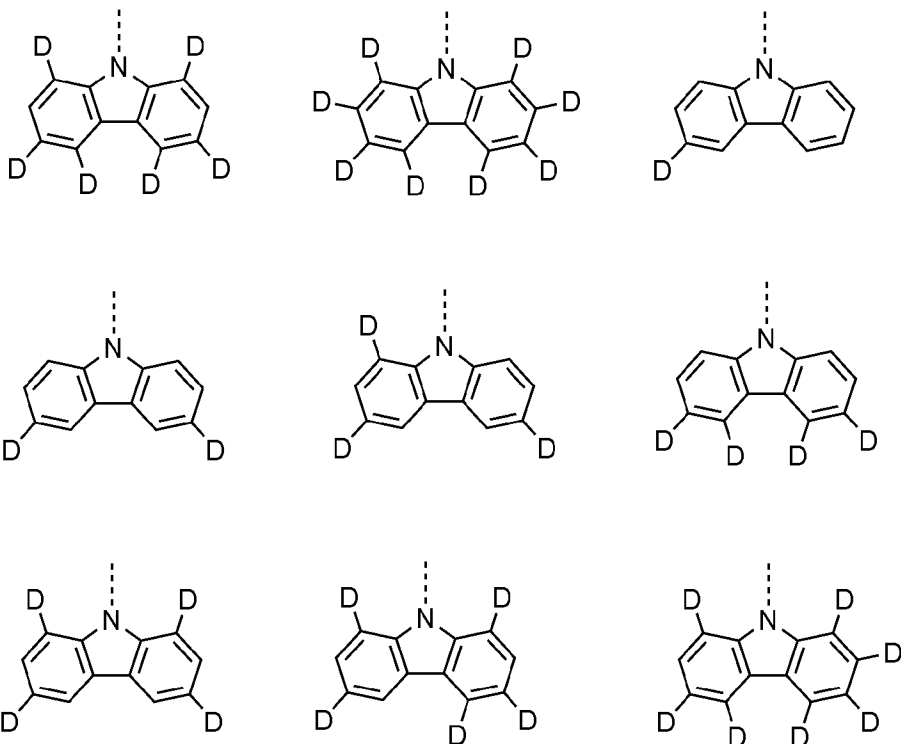
[청구항 12] 제1항에 있어서,
상기



는 하기로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느

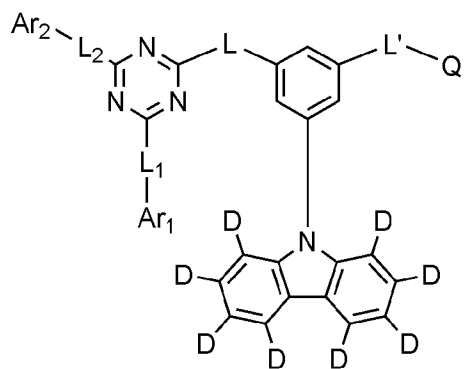
하나인,

화합물:

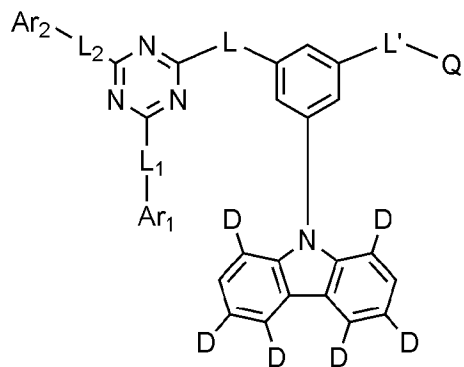


[청구항 13] 제1항에 있어서,
상기 화합물은 하기 화학식 1-1 내지 1-3 중 어느 하나로 표시되는,
화합물:

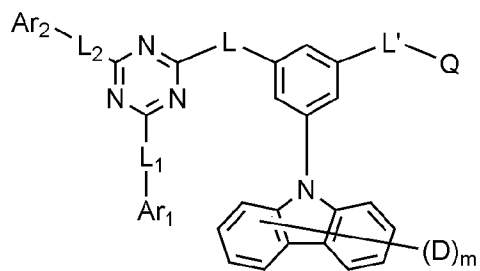
[화학식 1-1]



[화학식 1-2]



[화학식 1-3]



상기 화학식 1-1 내지 1-3에서,

D는 중수소이고,

m은 1, 2, 3, 4, 5, 또는 7이고,

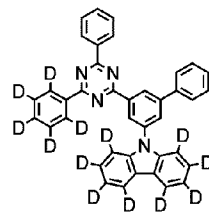
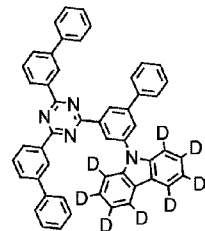
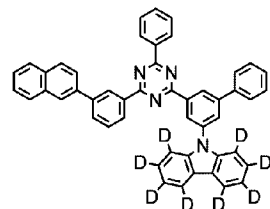
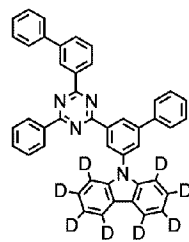
L, L₁, L₂, Ar₁, Ar₂, L' 및 Q는 제1항에서 정의한 바와 같다.

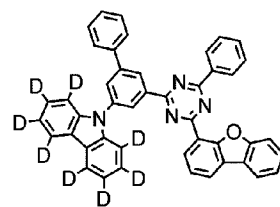
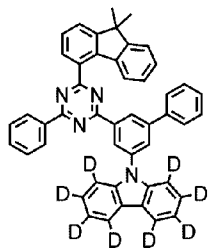
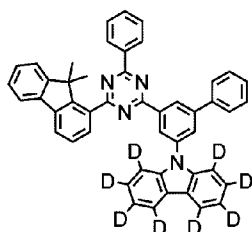
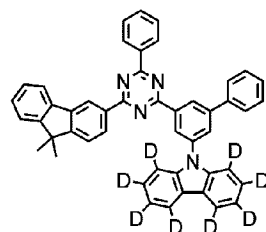
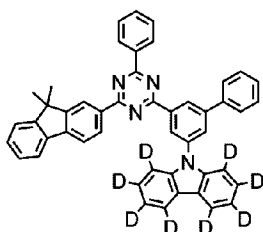
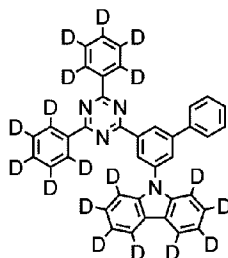
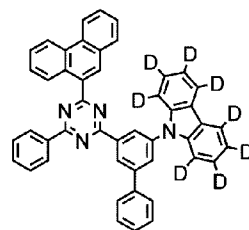
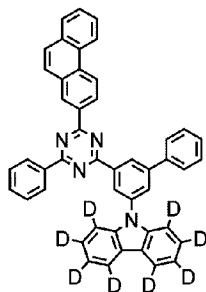
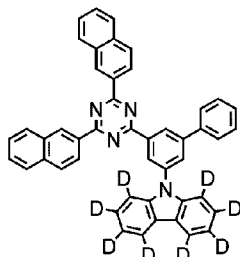
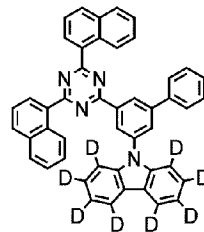
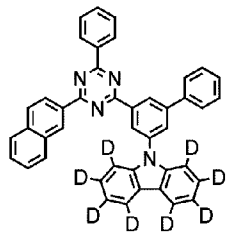
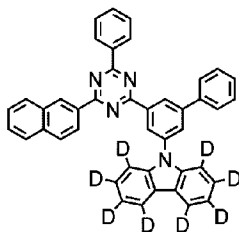
[청구항 14]

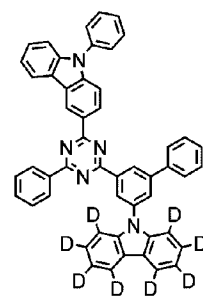
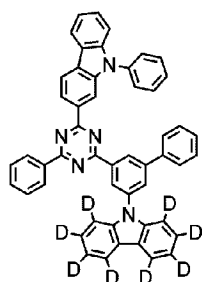
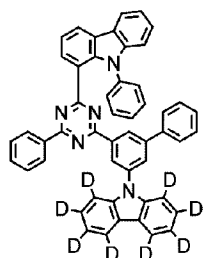
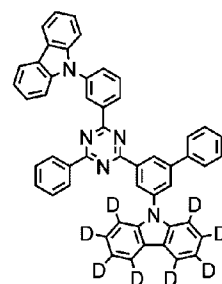
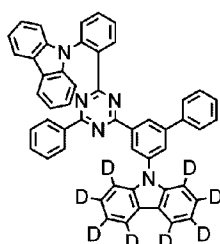
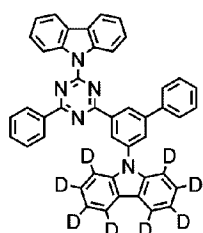
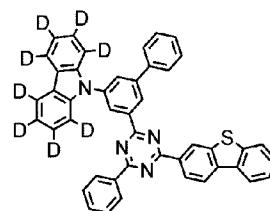
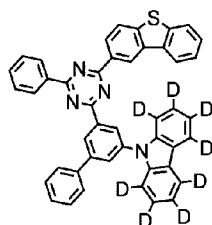
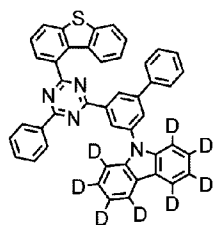
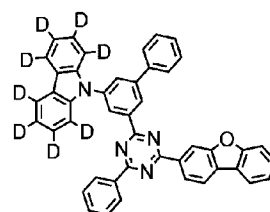
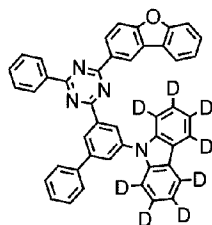
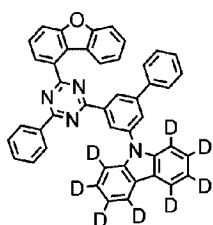
제1항에 있어서,

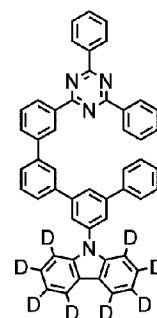
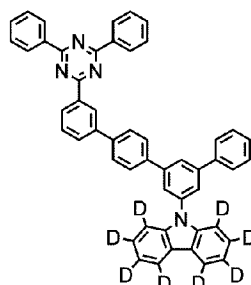
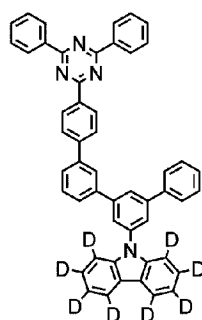
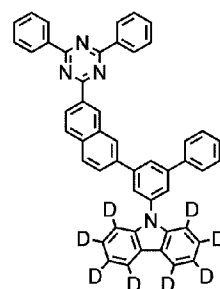
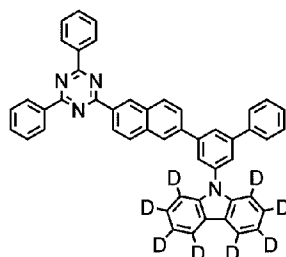
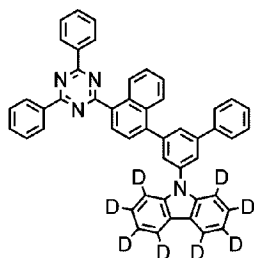
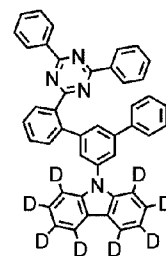
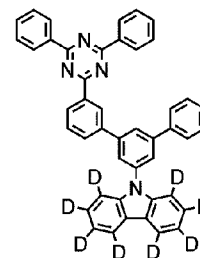
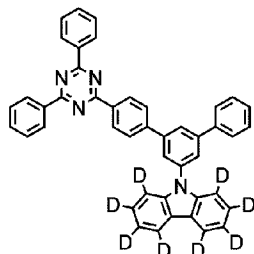
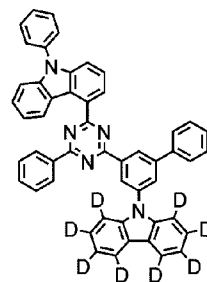
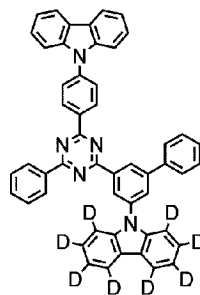
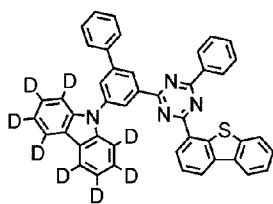
상기 화합물은 하기 화합물로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나인,

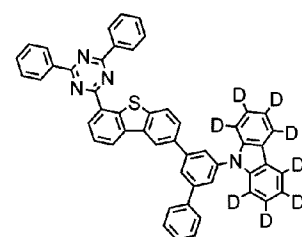
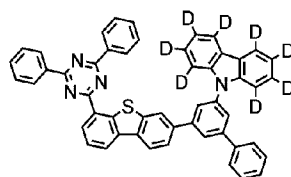
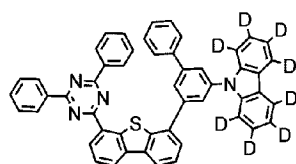
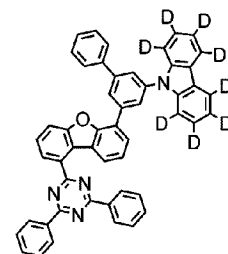
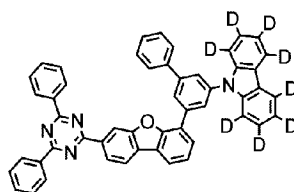
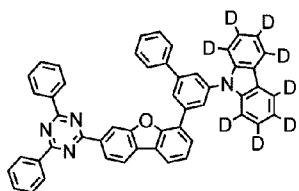
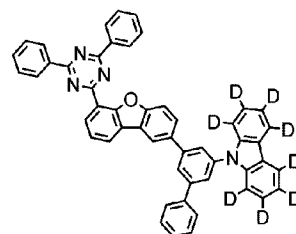
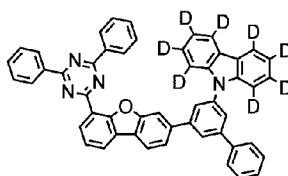
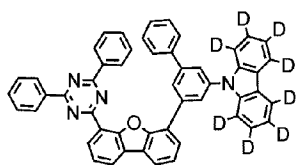
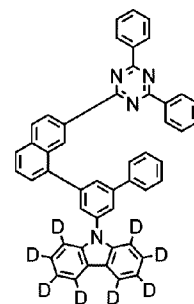
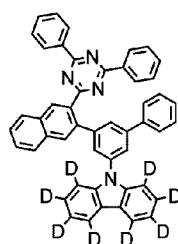
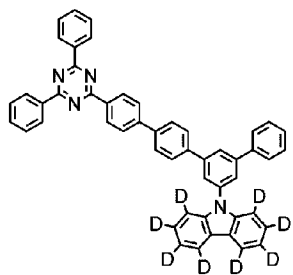
화합물:

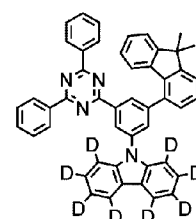
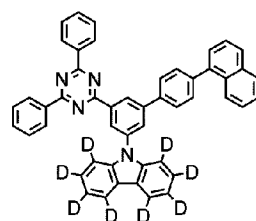
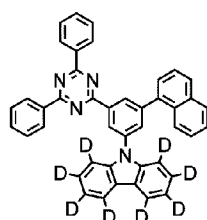
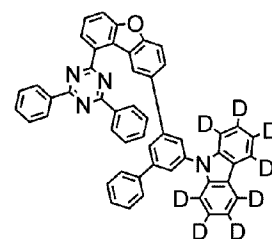
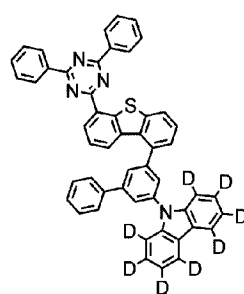
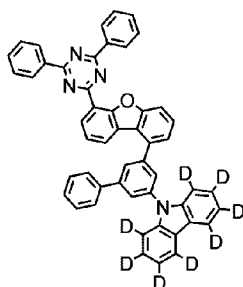
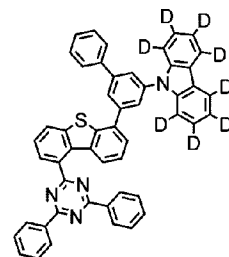
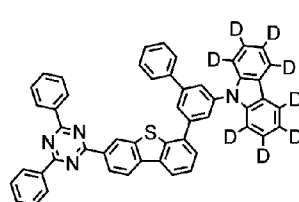
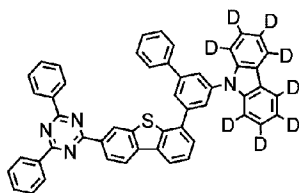


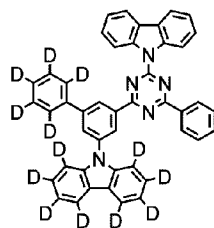
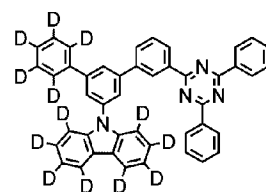
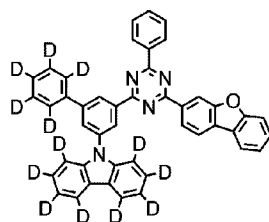
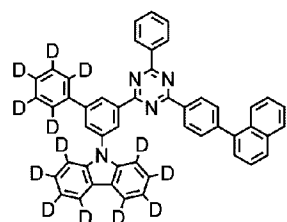
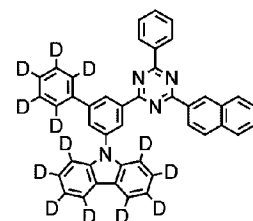
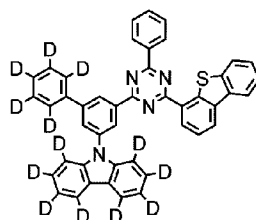
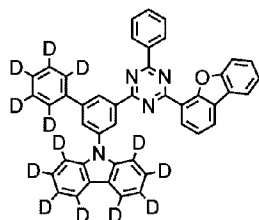
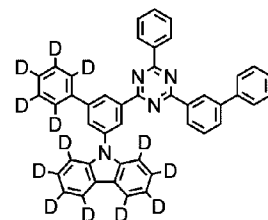
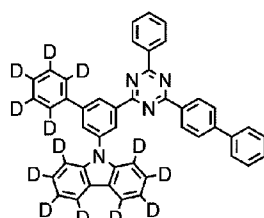
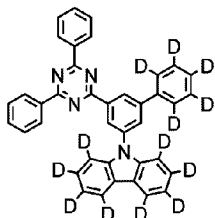


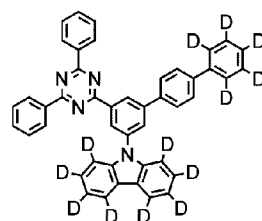
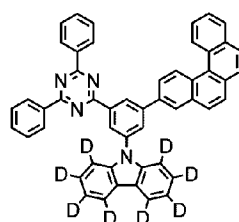
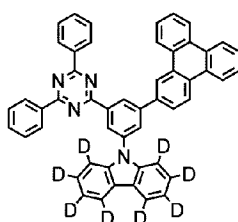
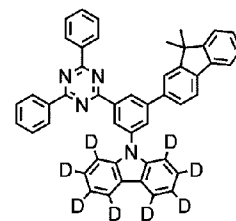
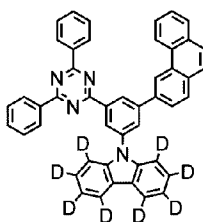
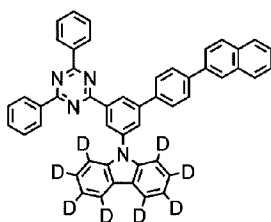
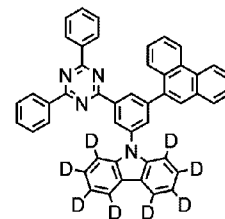
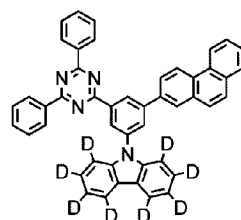
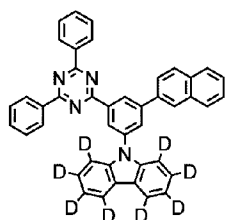
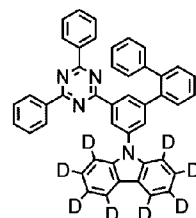
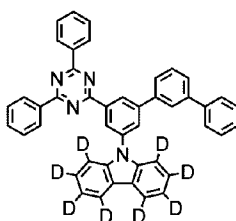
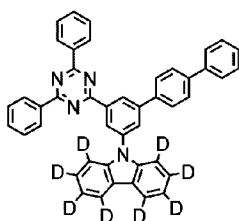


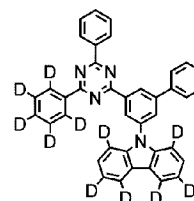
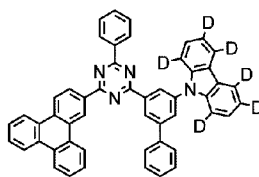
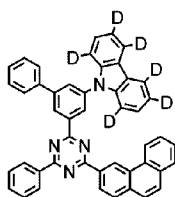
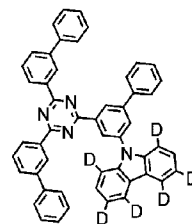
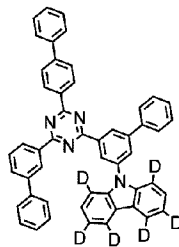
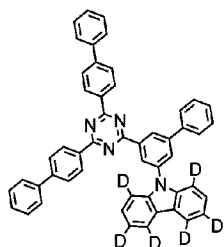
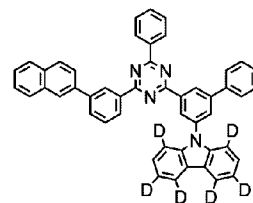
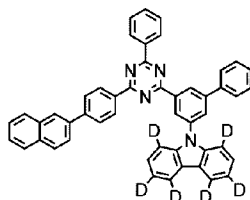
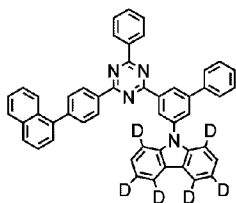
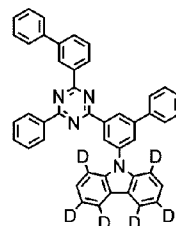
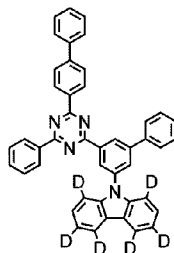
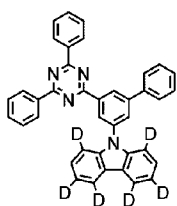


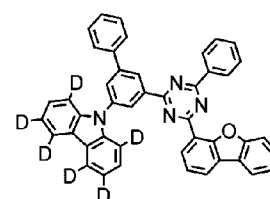
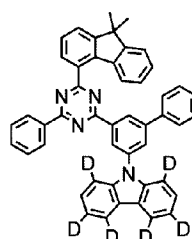
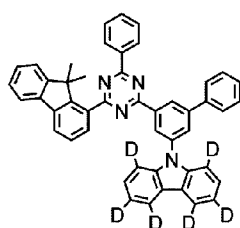
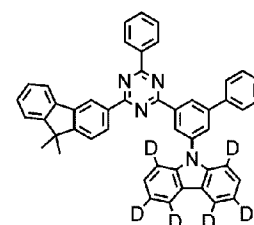
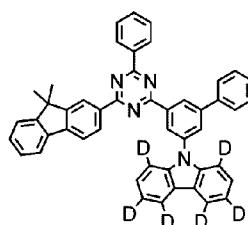
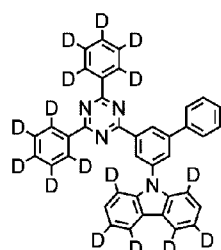
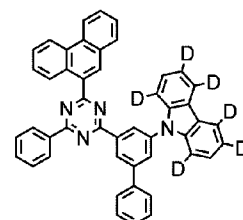
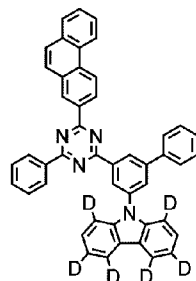
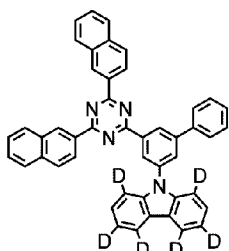
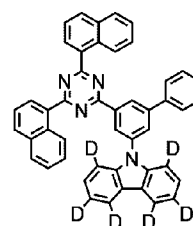
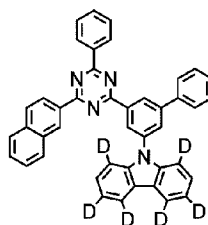
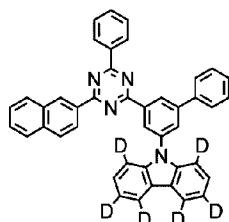


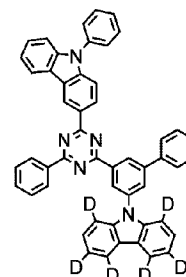
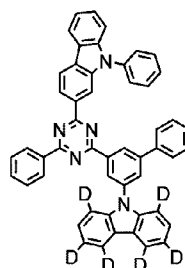
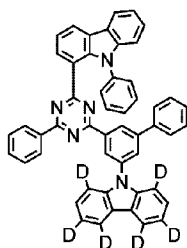
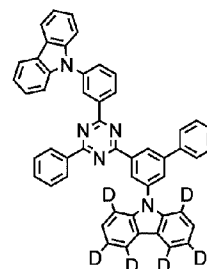
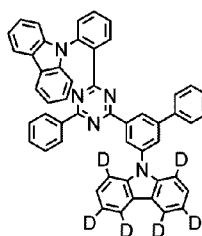
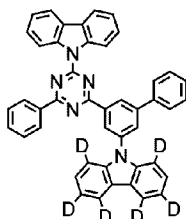
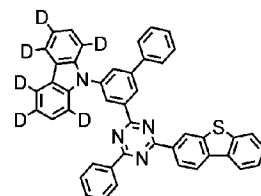
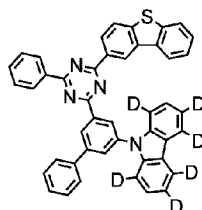
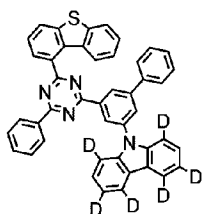
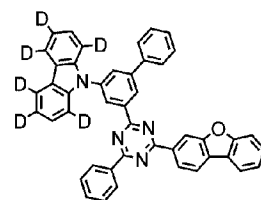
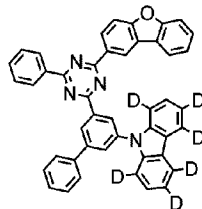
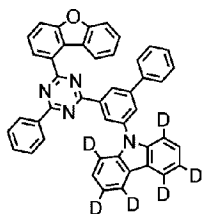


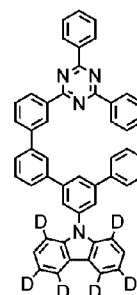
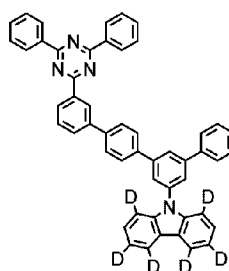
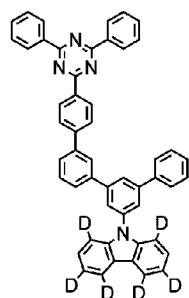
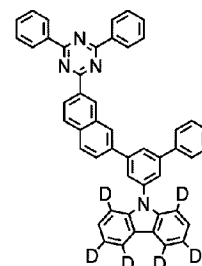
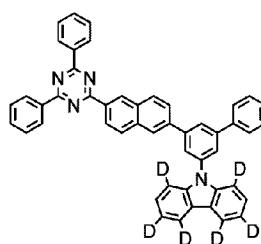
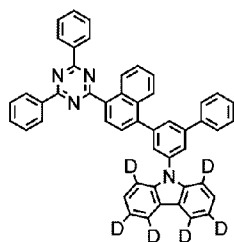
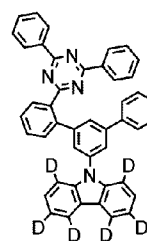
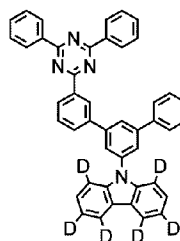
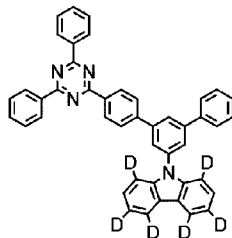
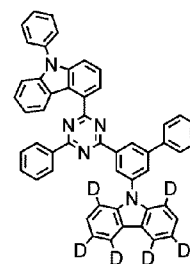
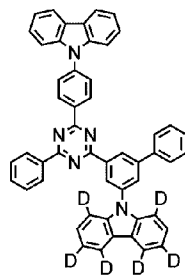
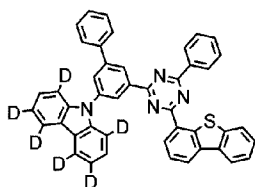


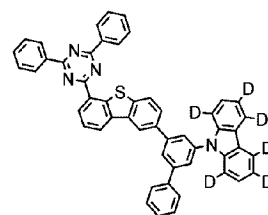
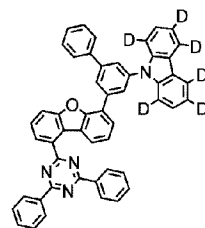
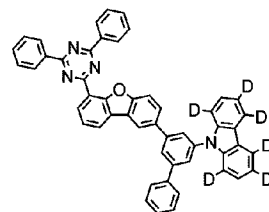
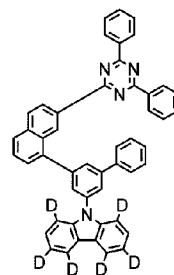


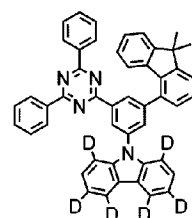
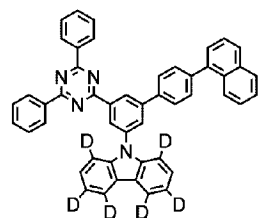
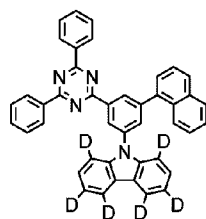
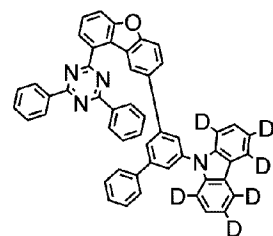
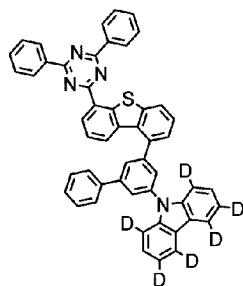
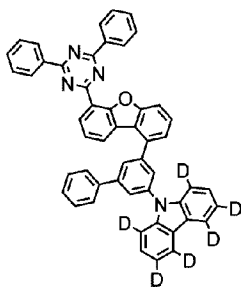
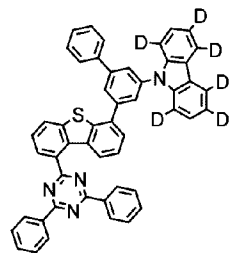
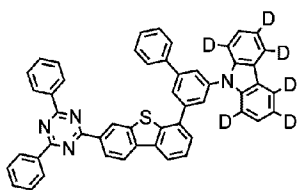
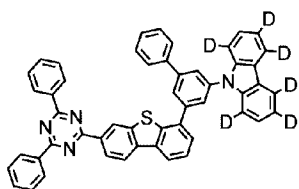


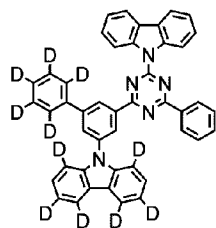
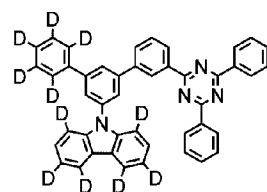
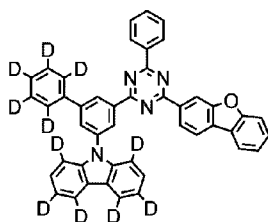
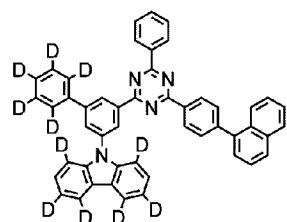
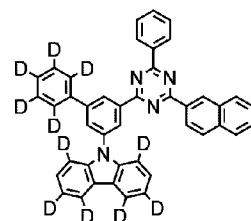
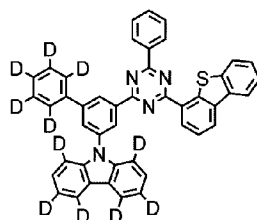
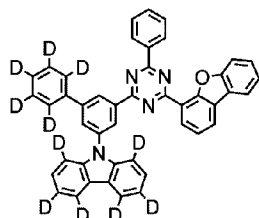
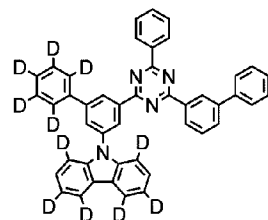
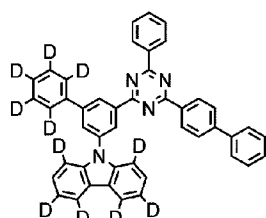
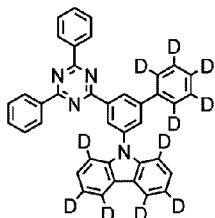


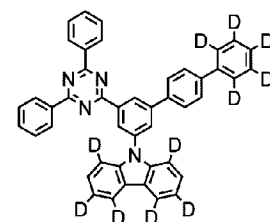
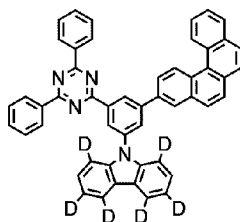
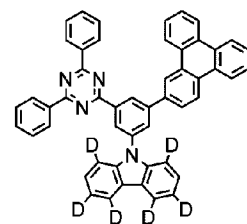
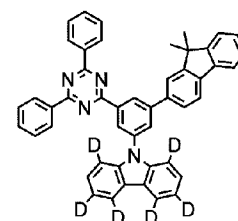
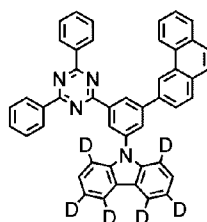
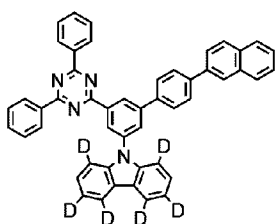
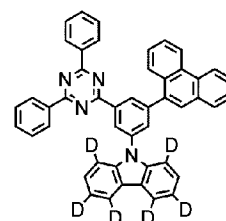
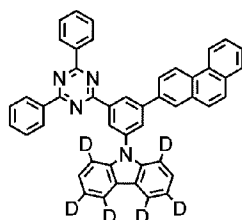
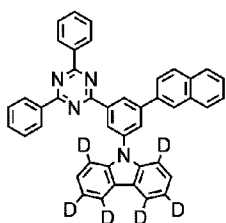
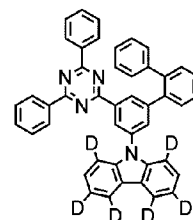
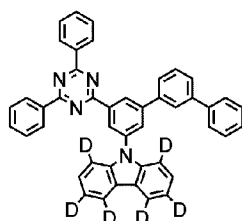
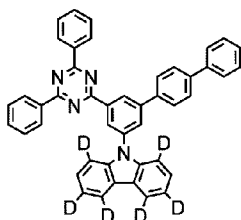


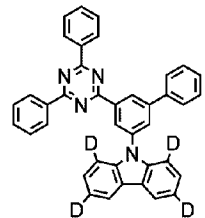
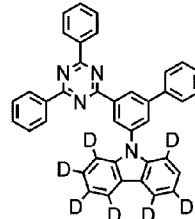
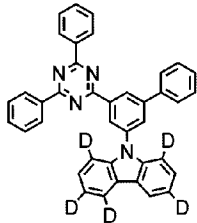
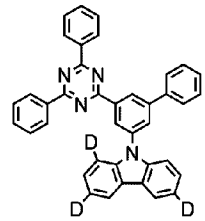
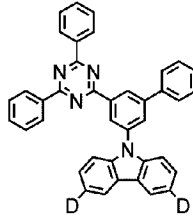
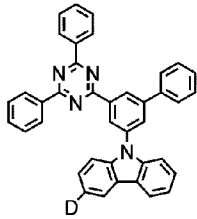










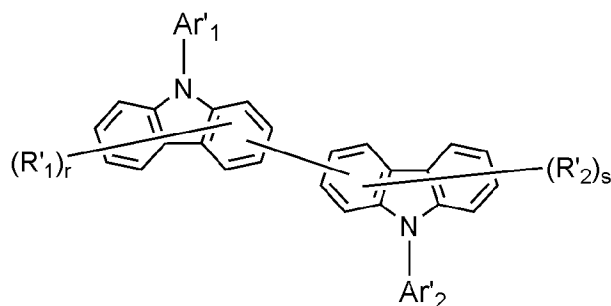


[청구항 15] 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 제1항 내지 제14항 중 어느 하나의 항에 따른 화합물을 포함하는 것인, 유기 발광 소자.

[청구항 16] 제15항에 있어서,
상기 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층인,
유기 발광 소자.

[청구항 17] 제16항에 있어서,
상기 발광층은 하기 화학식 2로 표시되는 화합물을 더 포함하는,
유기 발광 소자:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

Ar'₁ 및 Ar'₂는 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₆₋₆₀ 아릴; 또는 치환 또는 비치환된 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C₂₋₆₀ 헤테로아릴이고,

R'₁ 및 R'₂는 각각 독립적으로, 수소; 중수소; C₁₋₆₀ 알킬; C₆₋₆₀ 아릴; 또는 N, O 및 S 중 1개 이상의 헤테로원자를 포함하는 C₂₋₆₀ 헤테로아릴이고,

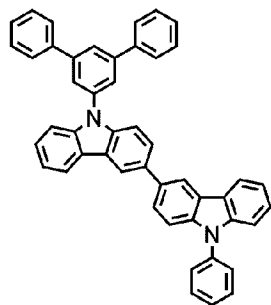
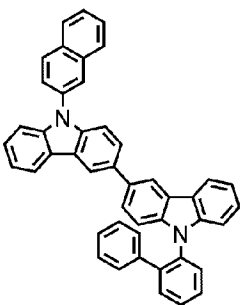
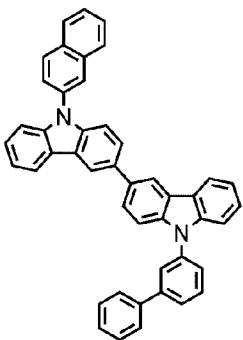
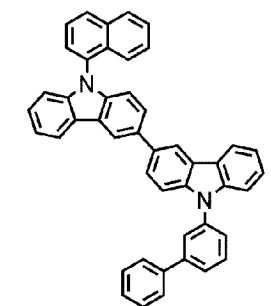
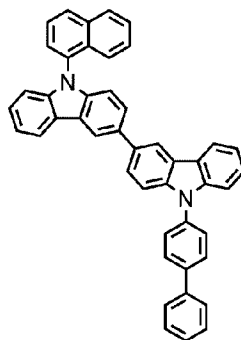
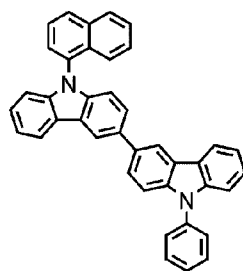
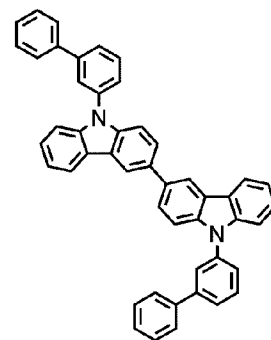
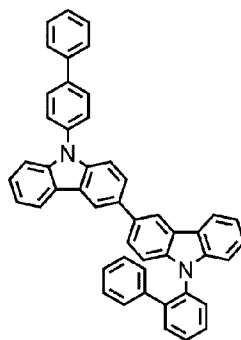
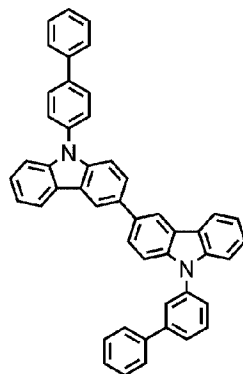
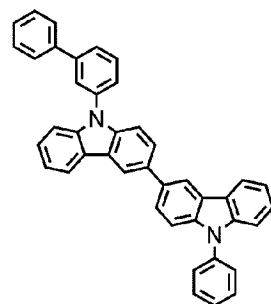
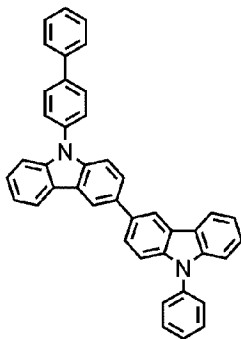
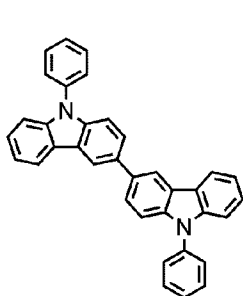
r 및 s는 각각 독립적으로, 0 내지 7의 정수이다.

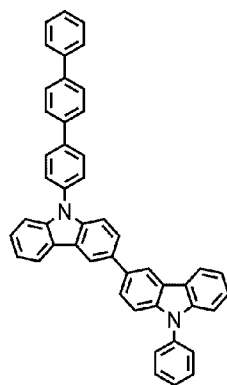
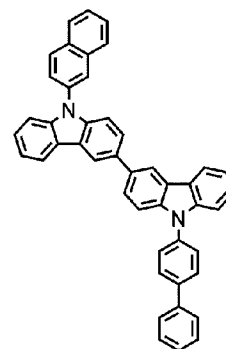
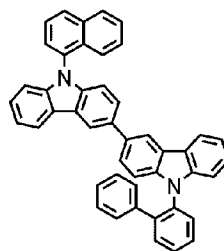
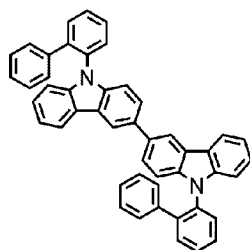
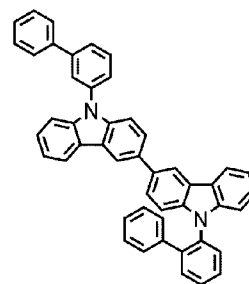
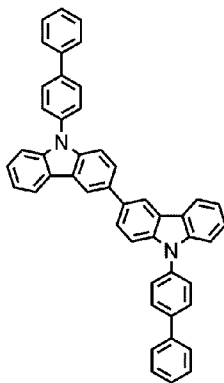
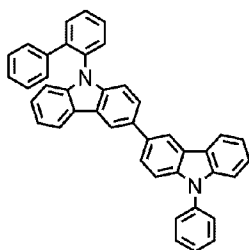
[청구항 18]

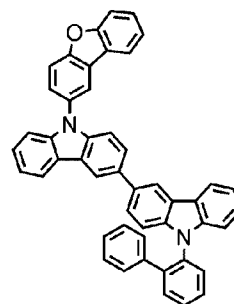
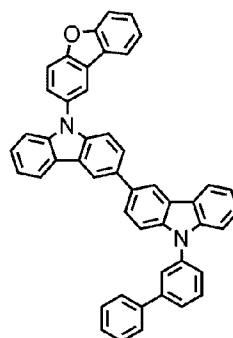
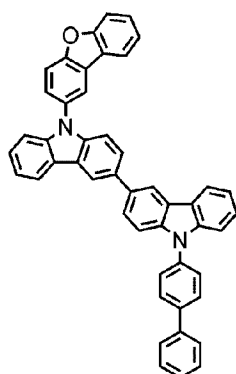
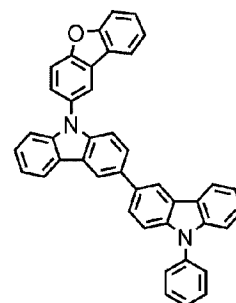
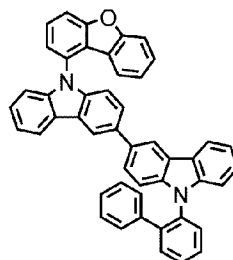
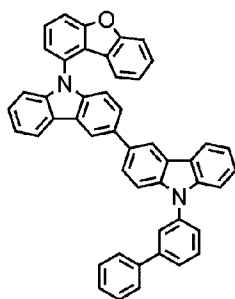
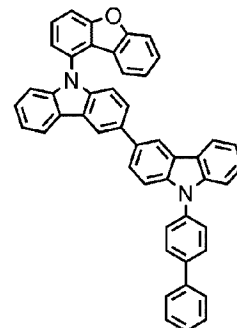
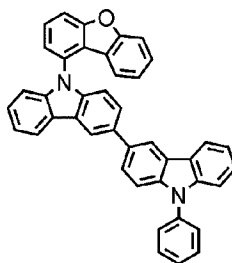
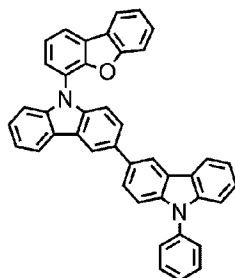
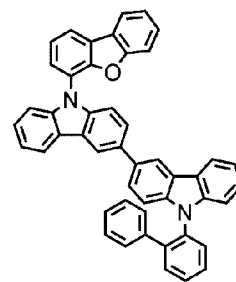
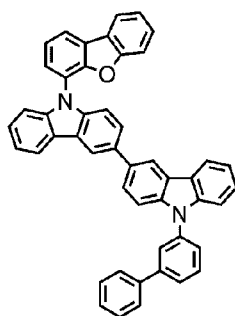
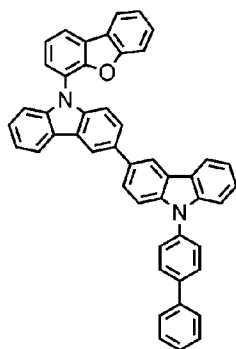
제17항에 있어서,

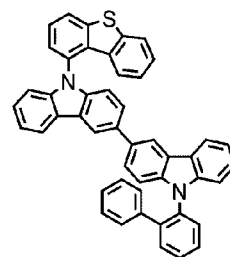
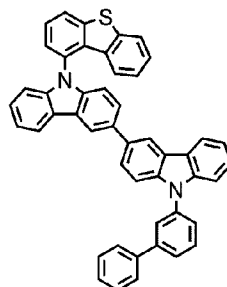
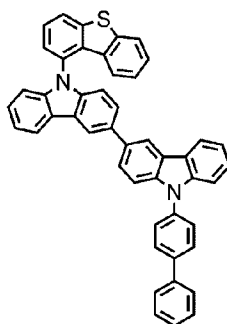
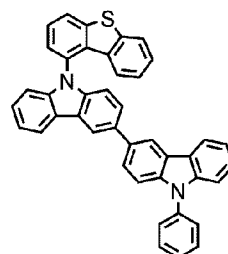
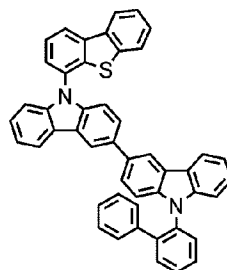
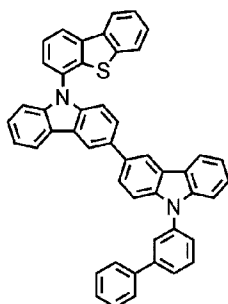
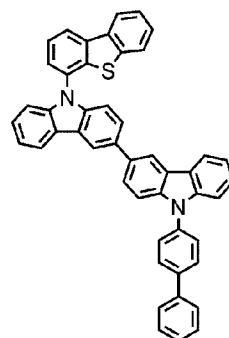
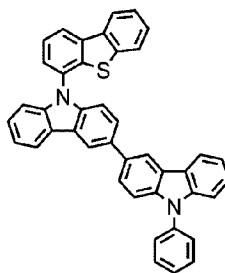
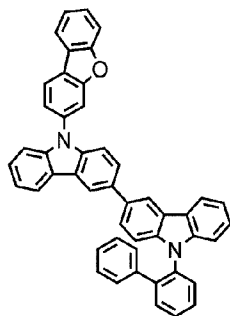
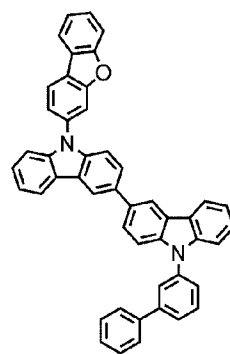
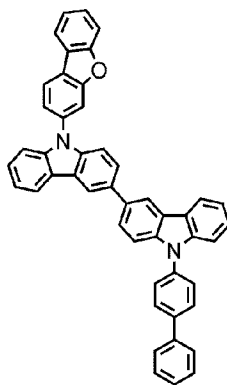
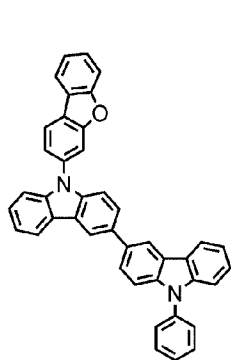
상기 화학식 2로 표시되는 화합물은 하기 화합물로 구성되는 군으로부터 선택되는 어느 하나인,

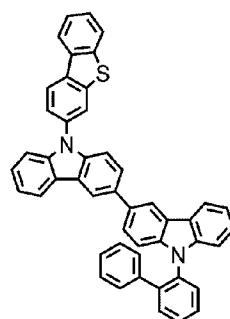
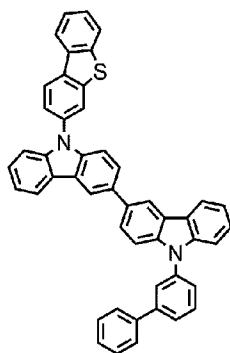
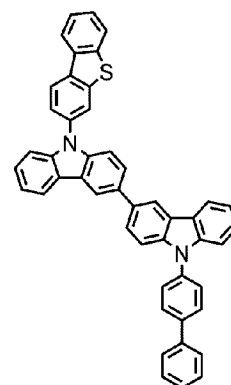
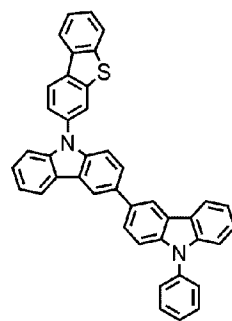
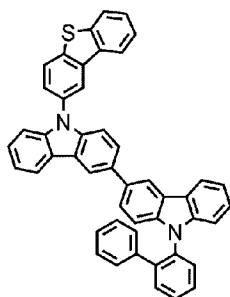
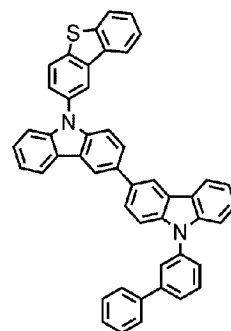
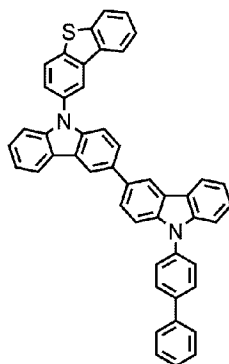
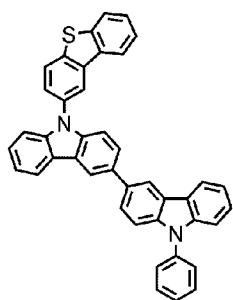
유기 발광 소자:

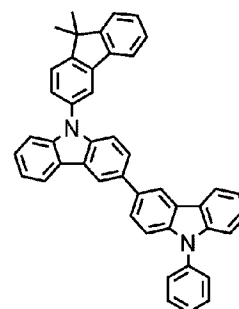
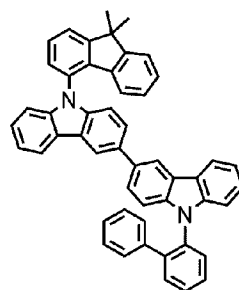
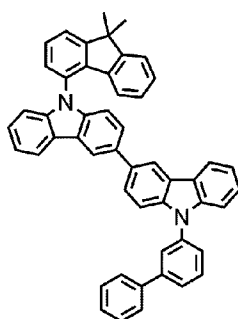
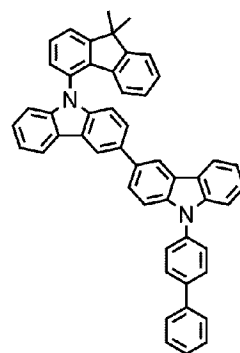
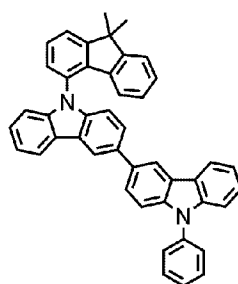
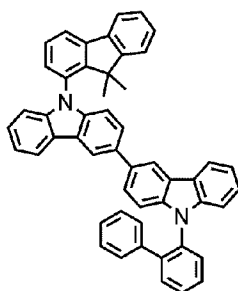
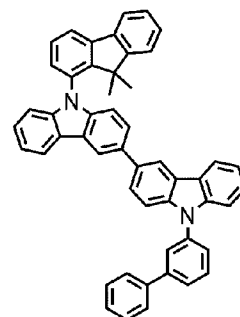
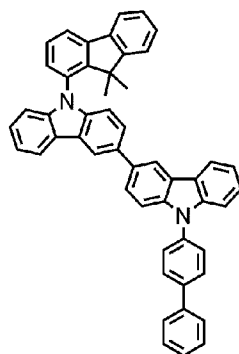
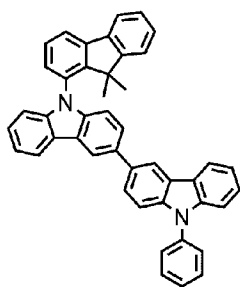


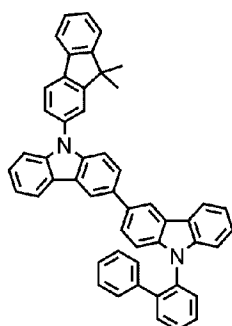
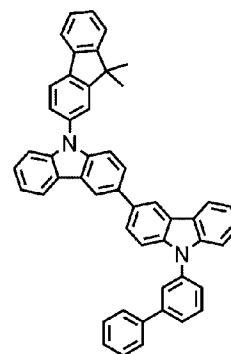
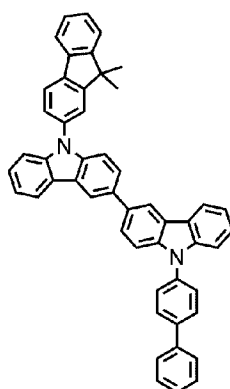
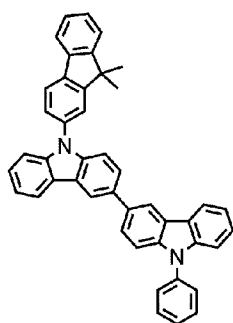
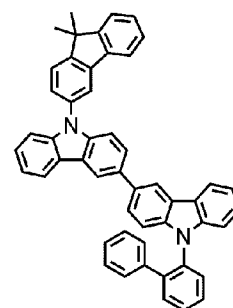
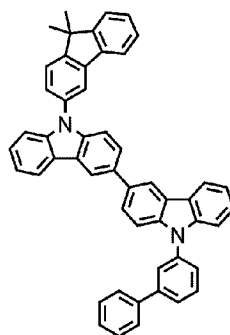
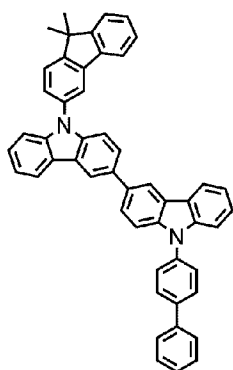


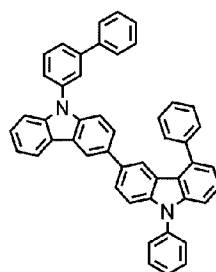
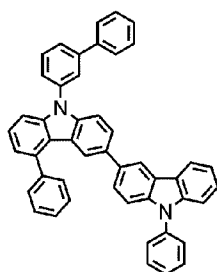
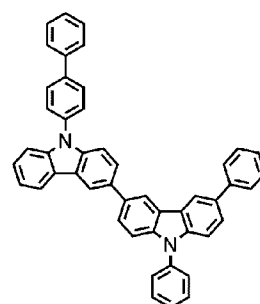
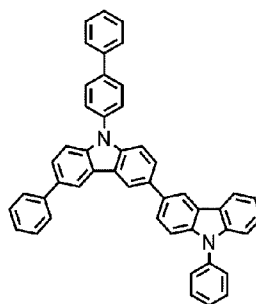
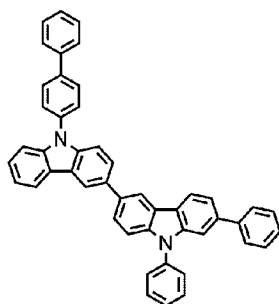
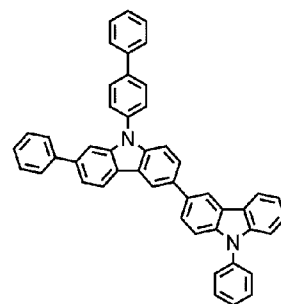
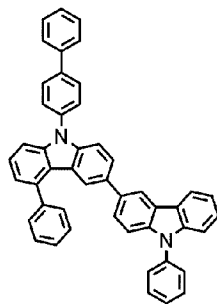
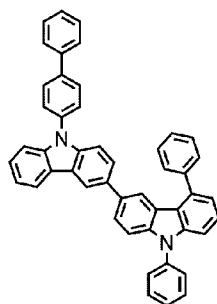












[도1]

4
3
2
1

[도2]

4
9
8
3
7
6
5
2
1

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2022/002578

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 403/10(2006.01)i; **C07D 405/14**(2006.01)i; **C07D 409/14**(2006.01)i; **C07D 403/14**(2006.01)i; **H01L 51/00**(2006.01)i;
H01L 51/50(2006.01)i

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D 403/10(2006.01); C07C 15/28(2006.01); C07D 209/82(2006.01); C07D 233/58(2006.01); C07D 403/14(2006.01);
 C07D 405/14(2006.01); C09K 11/06(2006.01)

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Korean utility models and applications for utility models: IPC as above
 Japanese utility models and applications for utility models: IPC as above

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

eKOMPASS (KIPO internal), STN (Registry, Marpat, Caplus), PubChem, Google & keywords: 트리아진(triazine), 중수소
 (deuterium), 카바졸(carbazole), 유기 발광 소자(organic light-emitting diode)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	KR 10-2017-0127101 A (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 21 November 2017 (2017-11-21) See claims 1, 3 and 5; and paragraphs [0167]-[0171], [0269], [0273], [0275] and [0349].	1-18
Y	KR 10-2014-0058292 A (SFC CO., LTD.) 14 May 2014 (2014-05-14) See paragraphs [0009]-[0011].	1-18
Y	KR 10-2019-0064510 A (SOULBRAIN CO., LTD.) 10 June 2019 (2019-06-10) See claims 1, 2, 4, 6, 7 and 9.	1-16
A	WO 2020-209309 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 15 October 2020 (2020-10-15) See entire document.	1-18
A	WO 2020-262861 A1 (LG CHEM, LTD.) 30 December 2020 (2020-12-30) See entire document.	1-18



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
 “D” document cited by the applicant in the international application
 “E” earlier application or patent but published on or after the international filing date
 “L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
 “O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
 “P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

“&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

30 May 2022

Date of mailing of the international search report

31 May 2022

Name and mailing address of the ISA/KR

**Korean Intellectual Property Office
 Government Complex-Daejeon Building 4, 189 Cheongsaro, Seo-gu, Daejeon 35208**

Facsimile No. +82-42-481-8578

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2022/002578

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)			Publication date (day/month/year)
KR	10-2017-0127101	A	21 November 2017	CN	107359257	A	17 November 2017
				CN	107359257	B	05 March 2021
				EP	3244466	A1	15 November 2017
				EP	3244466	B1	04 August 2021
				US	2017-0331048	A1	16 November 2017
				US	2020-0266362	A1	20 August 2020
KR	10-2014-0058292	A	14 May 2014	KR	10-1503771	B1	18 March 2015
KR	10-2019-0064510	A	10 June 2019	US	2019-0288215	A1	19 September 2019
WO	2020-209309	A1	15 October 2020	CN	113631543	A	09 November 2021
				KR	10-2021-0149735	A	09 December 2021
WO	2020-262861	A1	30 December 2020	CN	113039183	A	25 June 2021
				KR	10-2021-0001936	A	06 January 2021

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC)) C07D 403/10(2006.01)i; C07D 405/14(2006.01)i; C07D 409/14(2006.01)i; C07D 403/14(2006.01)i; H01L 51/00(2006.01)i; H01L 51/50(2006.01)i		
B. 조사된 분야 조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재) C07D 403/10(2006.01); C07C 15/28(2006.01); C07D 209/82(2006.01); C07D 233/58(2006.01); C07D 403/14(2006.01); C07D 405/14(2006.01); C09K 11/06(2006.01) 조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌 한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC 일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC 국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우)) eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템), STN (Registry, Marpat, Caplus), PubChem, 구글 & 키워드: 트리아진(triazine), 중수소(deuterium), 카바졸(carbazole), 유기 발광 소자 (organic light-emitting diode)		
C. 관련 문헌		
카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
Y	KR 10-2017-0127101 A (삼성디스플레이 주식회사) 2017.11.21 청구항 1, 3, 5; 단락 [0167]-[0171], [0269], [0273], [0275], [0349]	1-18
Y	KR 10-2014-0058292 A (에스에프씨 주식회사) 2014.05.14 단락 [0009]-[0011]	1-18
Y	KR 10-2019-0064510 A (솔브레인 주식회사) 2019.06.10 청구항 1, 2, 4, 6, 7, 9	1-16
A	WO 2020-209309 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 2020.10.15 전체 문헌	1-18
A	WO 2020-262861 A1 (LG CHEM, LTD.) 2020.12.30 전체 문헌	1-18
☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. ☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.		
* 인용된 문헌의 특별 카테고리: “A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌 “D” 본 국제출원에서 출원인이 인용한 문헌 “E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌 “L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌 “O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌 “P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌 “T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌 “X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다. “Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다. “&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌		
국제조사의 실제 완료일 2022년05월30일(30.05.2022)		국제조사보고서 발송일 2022년05월31일(31.05.2022)
ISA/KR의 명칭 및 우편주소 대한민국 특허청 (35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-481-8578		심사관 허주형 전화번호 +82-42-481-5373

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2017-0127101 A	2017/11/21	CN 107359257 A	2017/11/17
		CN 107359257 B	2021/03/05
		EP 3244466 A1	2017/11/15
		EP 3244466 B1	2021/08/04
		US 2017-0331048 A1	2017/11/16
		US 2020-0266362 A1	2020/08/20
KR 10-2014-0058292 A	2014/05/14	KR 10-1503771 B1	2015/03/18
KR 10-2019-0064510 A	2019/06/10	US 2019-0288215 A1	2019/09/19
WO 2020-209309 A1	2020/10/15	CN 113631543 A	2021/11/09
		KR 10-2021-0149735 A	2021/12/09
WO 2020-262861 A1	2020/12/30	CN 113039183 A	2021/06/25
		KR 10-2021-0001936 A	2021/01/06