

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2012년 7월 5일 (05.07.2012)



(10) 국제공개번호
WO 2012/091471 A2

- (51) 국제특허분류:
C07C 211/54 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
C07D 311/80 (2006.01) H01L 31/042 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2011/010267
- (22) 국제출원일: 2011년 12월 28일 (28.12.2011)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2010-0136323 2010년 12월 28일 (28.12.2010) KR
- (71) 출원인 (US 을(를) 제외한 모든 지정국에 대하여): **덕산하이메탈(주) (DUKSAN HIGH METAL CO., LTD.)** [KR/KR]; 울산광역시 북구 연암동 597-3, 683-804 Ulsan (KR).
- (72) 발명자; 겸
- (75) 발명자/출원인 (US 에 한하여): **최연희 (CHOI, Yeon Hee)** [KR/KR]; 경기도 하남시 덕풍 3 동 꽃피마을 2 단지 203 동 303 호, 465-728 Gyeonggi-do (KR). **문성윤 (MUN, Soungyun)** [KR/KR]; 경기도 용인시 수지구 풍덕천동 664 번지 초입마을 동아아파트 111 동 810 호,

448-552 Gyeonggi-do (KR). **박정환 (PARK, Junghwan)** [KR/KR]; 서울시 송파구 가락본동 80 성원상떼빌 101 동 703 호, 138-803 Seoul (KR). **박정철 (PARK, Jungcheol)** [KR/KR]; 경기도 성남시 분당구 백현동 366-7 번지 프린스타운 404 호, 463-420 Gyeonggi-do (KR). **김기원 (KIM, Kiwon)** [KR/KR]; 경기도 수원시 영통구 영통 1 동 황골주공아파트 129 동 1801 호, 443-740 Gyeonggi-do (KR). **박용욱 (PARK, Yongwook)** [KR/KR]; 경기도 안양시 동안구 갈산동 샘마을우방아파트 508 동 202 호, 431-703 Gyeonggi-do (KR). **박정근 (PARK, Jeongkeun)** [KR/KR]; 경기도 성남시 분당구 백현동 366-7 번지 프린스타운 405 호, 463-420 Gyeonggi-do (KR). **정화순 (JUNG, Hwasoon)** [KR/KR]; 강원도 춘천시 우두동 315-6 번지, 200-150 Gangwon-do (KR). **지희선 (JI, Heesun)** [KR/KR]; 경기도 성남시 분당구 백현동 366-7 번지 B02 호, 463-420 Gyeonggi-do (KR). **이범성 (LEE, Bumsung)** [KR/KR]; 충청남도 천안시 서북구 백석동 백석마을아이파크 112 동 2101 호, 331-793 Chungcheongnam-do (KR). **최대혁 (CHOI, Daehyuk)** [KR/KR]; 경기도 수원시 영통구 매탄동 신원천주공아파트 1 단지 102 동 1501 호, 443-370 Gyeonggi-do (KR). **김동하 (KIM, Dongha)** [KR/KR]; 경기도 성남시

[다음 쪽 계속]

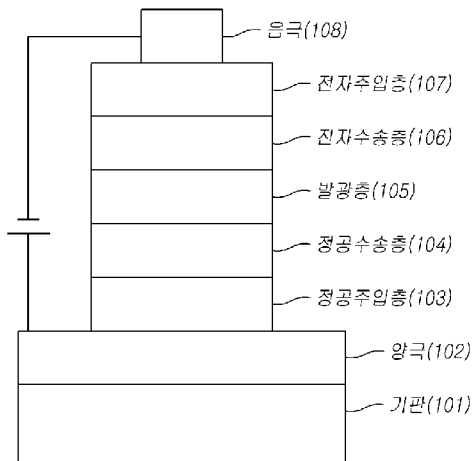
(54) Title: COMPOUND AND ORGANIC ELECTRONIC ELEMENT USING SAME, AND ELECTRONIC DEVICE COMPRISING THE ORGANIC ELECTRONIC ELEMENT

(54) 발명의 명칭 : 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 전자장치

(57) Abstract: The present invention relates to a compound and to an organic electronic element using same, and to a terminal comprising the organic electronic element.

(57) 요약서: 본 발명은 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 단말을 제공한다.

[Fig. 1]



- 101 ... Substrate
- 102 ... Anode
- 103 ... Hole injection layer
- 104 ... Hole transport layer
- 105 ... Light-emitting layer
- 106 ... Electron transport layer
- 107 ... Electron injection layer
- 108 ... Cathode

WO 2012/091471 A2



분당구 분당동 장안 건영아파트 108 동 1102 호, 463-907 Gyeonggi-do (KR).

(74) **대리인: 김은구 (KIM, Eungu)** 등; 서울시 강남구 역삼동 636-15 상원빌딩 2층, 135-908 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, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) **지정국** (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, 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, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

공개:

— 국제조사보고서 없이 공개하며 보고서 접수 후 이를 별도 공개함 (규칙 48.2(g))

명세서

발명의 명칭: 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 전자장치 기술분야

[1] 본 발명은 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 전자장치에 관한 것이다.

배경기술

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

[3] 유기전기소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하 수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다. 그리고, 상기 발광 재료는 분자량에 따라 고분자형과 저분자형으로 분류될 수 있고, 발광 메커니즘에 따라 전자의 일중항 여기상태로부터 유래되는 형광 재료와 전자의 삼중항 여기상태로부터 유래되는 인광 재료로 분류될 수 있다. 또한, 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 수 있다.

[4] 한편, 발광 재료로서 하나의 물질만 사용하는 경우 분자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여 발광 재료로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다. 그 원리는 발광층을 형성하는 호스트 보다 에너지 대역 간극이 작은 도판트를 발광층에 소량 혼합하면, 발광층에서 발생한 엑시톤이 도판트로 수송되어 효율이 높은 빛을 내는 것이다. 이때 호스트의 파장이 도판트의 파장대로 이동하므로, 이용하는 도판트의 종류에 따라 원하는 파장의 빛을 얻을 수 있다.

[5] 전술한 유기전기소자가 갖는 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하나, 아직까지 안정하고 효율적인 유기전기소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이며, 따라서 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

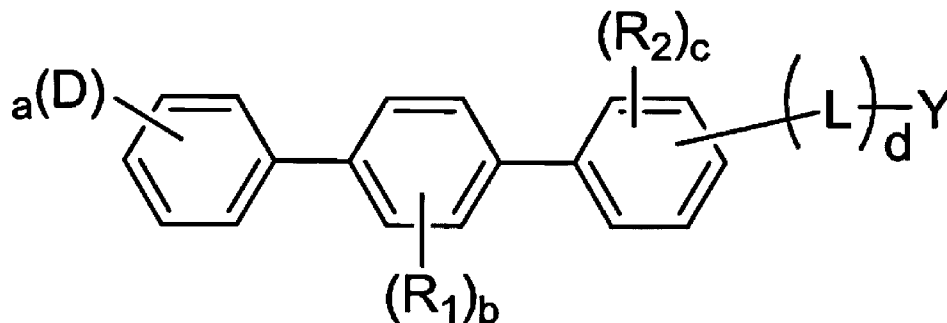
[6] 상술한 배경기술의 문제점을 해결하기 위한 본 발명은 중수소로 치환된 페닐기가 연결되어진 트리페닐유도체에 치환기를 가지고 있는 연결기가 결합되어진 화합물을 제공한다. 따라서 이 화합물은 유기 전자 소자에서 정공 주입, 정공수송, 전자 주입, 전자 수송, 발광 물질 및 패시베이션(케핑) 물질로 사용될 수 있고, 특히 단독으로 발광물질 및 호스트/도판트에서 호스트 또는 도판트로 사용될 수 있으며, 정공 주입, 정공수송층으로 사용될 수 있다.

[7] 따라서, 본 발명은 중수소로 치환된 페닐기가 연결되어진 트리페닐유도체에 치환기를 가지고 있는 연결기가 결합되어진 형태를 핵심으로 하는 화합물, 이를 이용한 유기 전자 소자 및 이 유기 전자 소자를 포함하는 전자 장치를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

[8] 일 측면에서, 본 발명은 하기 화학식의 화합물을 제공한다.

[9]



[10] 따라서, 본 발명은 중수소로 치환된 페닐기가 연결되어진 트리페닐유도체에 치환기를 가지고 있는 연결기가 결합되어진 화합물, 이를 이용한 유기 전자 소자 및 이 유기 전자 소자를 포함하는 전자 장치를 제공할 수 있다.

발명의 효과

[11] 본 발명은 중수소로 치환된 페닐기가 연결되어진 트리페닐유도체에 치환기를 가지고 있는 연결기가 결합되어진 화합물, 이를 이용한 유기 제공하며, 유기 전자 소자의 효율 상승, 구동전압 하강, 수명 상승 및 안정성 상승 효과가 나타내었다.

도면의 간단한 설명

[12] 도 1 내지 도 6은 본 발명의 화합물을 적용할 수 있는 유기전계발광소자의 예를 도시한 것이다.

[13] [부호의 설명]

[14] 101: 기관 102: 양극

[15] 103: 정공주입층 104: 정공수송층

[16] 105: 발광층 106: 전자주입층

[17] 107: 전자수송층 108: 음극

발명의 실시를 위한 형태

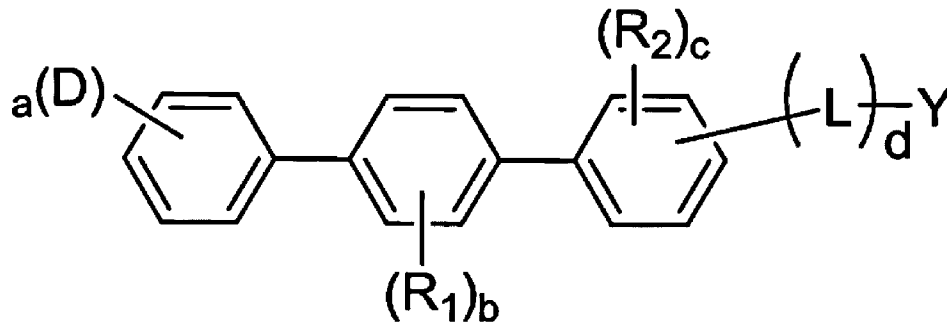
[18] 이하, 본 발명의 일부 실시예들을 예시적인 도면을 통해 상세하게 설명한다. 각 도면의 구성요소들에 참조부호를 부가함에 있어서, 동일한 구성요소들에 대해서는 비록 다른 도면상에 표시되더라도 가능한 한 동일한 부호를 가지도록 하고 있음에 유의해야 한다. 또한, 본 발명을 설명함에 있어, 관련된 공지 구성 또는 기능에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명은 생략한다.

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

[20] 본 발명은 하기 화학식 1로 표현되는 화합물을 제공할 수 있다.

[21] [화학식 1]

[22]



[23] 이때 D는 중수소를 나타내며 a는 1~5의 정수일 수 있다.

[24] 또한 페닐기에 치환될 수 있는 $R_1 \sim R_2$ 은 서로 같거나 상이하고 각각 서로 독립적으로 수소원자; 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 5~60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 5~60의 헤테로 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~60의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 5~60의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 5~60의 아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 5~60의 알콕시카보닐기, 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 5~60의 아릴기로 치환된 아미노기, 할로젠 원자, 사이아노기, 나이트로기, 하이드록실기 또는 카복실기로 이루어진 그룹에서 선택된 하나 또는 하나 이상일 수 있다. 한편, $R_1 \sim R_2$ 은 서로 인접한 기와 결합하여 치환 또는 비치환된 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다. 예를 들어 $R_1 \sim R_2$ 은 서로 인접한 기와 결합하여 지방족 또는 헤테로 환을 형성할 수 있다. 이때 b~c는 1~4의 정수일 수 있다.

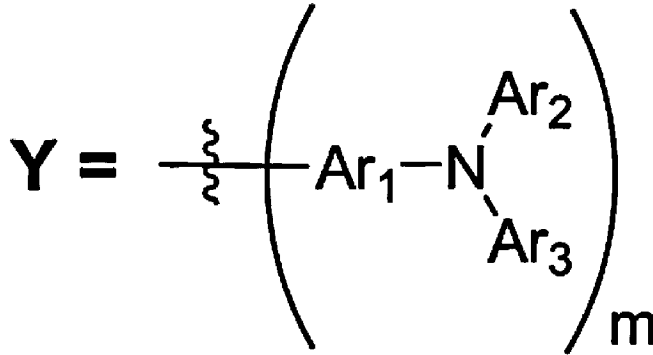
[25] 한편 L은 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 5~40의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5~60의 헤테로 아릴렌기, 및 2가 또는 3가의 치환 또는 비치환된

지방족 탄화 수소로부터 선택되는 기일 수 있으나 이에 제한되지 않는다. 한편, d는 0~3의 정수일 수 있다. 예를 들어 L은 페닐기, 비페닐기, 1-나프탈기, 2-나프틸기, 피리딜기, 스틸벤, 안트라세닐기, 페나트렌기, 파이레닐기로 이뤄진 군에서 선택된 하나 또는 하나 이상일 수 있다.

[26] 한편, 화학식 1에서 Y는 화학식 2와 같이 표시되는 유도체일 수 있다.

[27] [화학식 2]

[28]



[29] 이때 Ar₁~Ar₃은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 핵 원자수 1~60의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5~60의 헤테로아릴기일 수 있으나 이에 제한되지 않는다. 예를 들어 Ar₂~Ar₃은 치환 또는 비치환된 알킬기일 수 있다. 한편 m은 0~2의 정수일 수 있다.

[30] 한편, Ar₁은 구체적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 비페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 티오펜기, 피롤기, 푸란기, 피리딜기로 이뤄진 군에서 선택되는 하나 또는 하나 이상일 수 있다.

[31] Ar₂ 및 Ar₃는 아래 표 1의 작용기들로 이루어진 군에서 선택되는 하나 또는 하나 이상일 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

[32] [표 1]

[33]

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
1			9		
2			10		
3			11		
4			12		
5			13		
6			14		
7			15		
8			16		
9			17		

[34]

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
18			27		
19			28		
20			29		
21			30		
22			31		
23			32		
24			33		
25			34		
26			35		

[35]

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
36			45		
37			46		
38			47		
39			48		
40			49		
41			50		
42			51		
43			52		
44			53		

[36]

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
54			63		
55			64		
56			65		
57			66		
58			67		
59			68		
60			69		
61			70		
62			71		

[37]

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
72			81		
73			82		
74			83		
75			84		
76			85		
77			86		
78			87		
79			88		
80			89		

[38]

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
90			99		
91			100		
92			101		
93			102		
94			103		
95			104		
96			105		
97			106		
98			107		

[39]

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
108			117		
109			118		
110			119		
111			120		
112			121		
113			122		
114			123		
115			124		
116			125		

[40]

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
126			135		
127			136		
128			137		
129			138		
130			139		
131			140		
132			141		
133			142		
134			143		

[41]

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
144			153		
145			154		
146			155		
147			156		
148			157		
149			158		
150			159		
151			160		
152			161		

[42]

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
162			172		
163			173		
164			174		
165			175		
166			176		
167			177		
168			178		
170			179		
171			180		

[43]

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
181			190		
182			191		
183			192		
184			193		
185			194		
186			195		
187			196		
188			197		
189			198		

[44]

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
199			208		
200			209		
201			210		
202			211		
203			212		
204			213		
205			214		
206			215		
207			216		

[45]

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
217			227		
218			228		
219			229		
220			230		
221			231		
223			232		
224			233		
225			234		
226			235		

[46]

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
236			245		
237			246		
238			247		
239			248		
240			249		
241			250		
242			251		
243			252		
244			253		

[47]

	Ar ₂	Ar ₃
254		

[48]

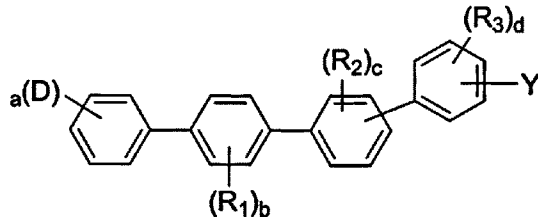
한편 상기 구조식을 가지는 화합물은 용액 공정(soluble process)에 사용될 수

있다. 다시말해 상기 화합물을 용액 공정(soluble process)에 의해 후술할 유기전기소자의 유기물층을 형성할 수 있다. 즉 상기 화합물을 유기물층으로 사용할 때 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 용액 공정 또는 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀 코팅, 딥 코팅, 닥터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조될 수 있다.

[49] 본 발명은 하기 화학식 3 내지 13 중 하나로 표현되는 화합물을 제공할 수 있다.

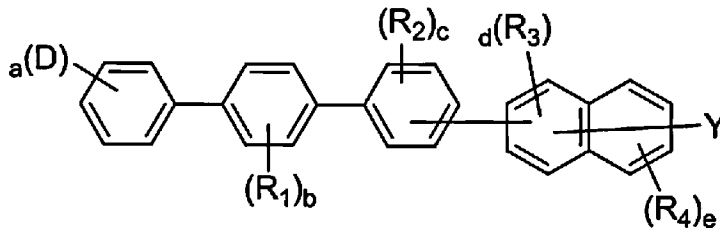
[50] [화학식 3]

[51]



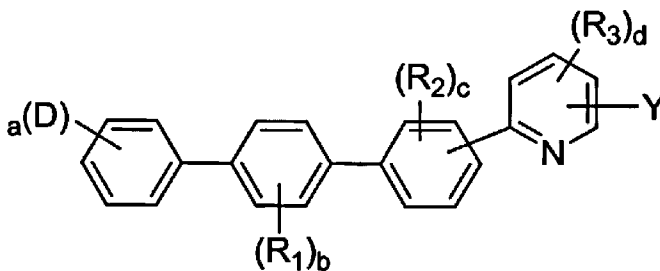
[52] [화학식 4]

[53]



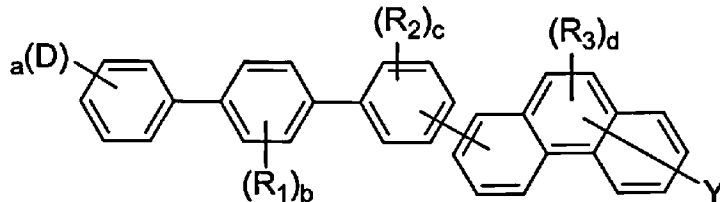
[54] [화학식 5]

[55]



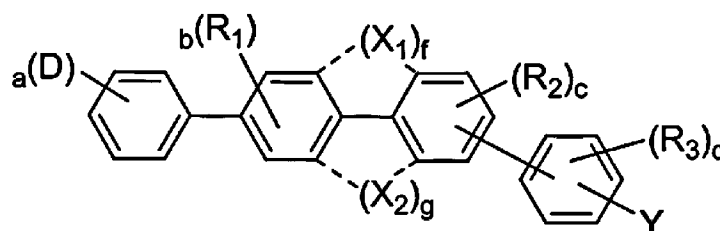
[56] [화학식 6]

[57]



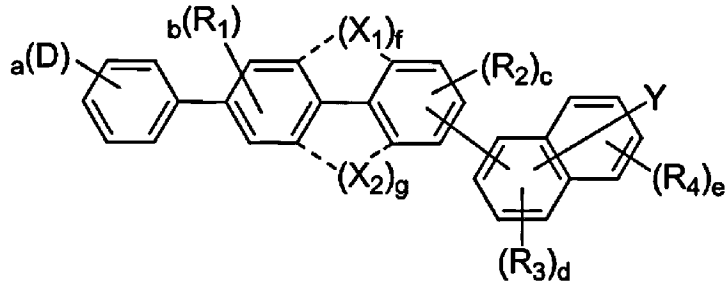
[58] [화학식 7]

[59]



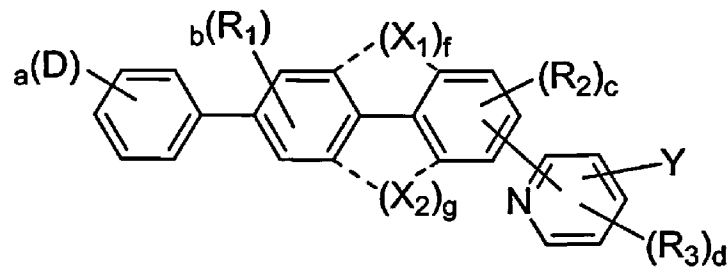
[60] [화학식 8]

[61]



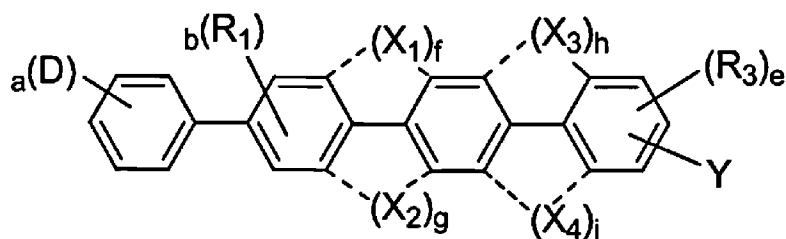
[62] [화학식 9]

[63]



[64] [화학식 10]

[65]



[66] 이때 화학식 3 내지 10에서 D는 중수소를 나타내며 여기서 a는 1~5의 정수이고,

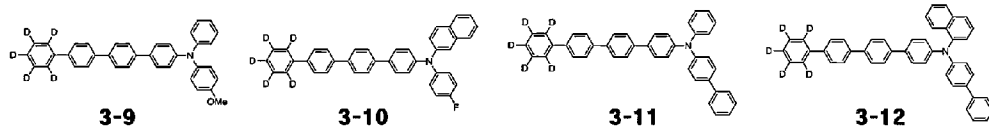
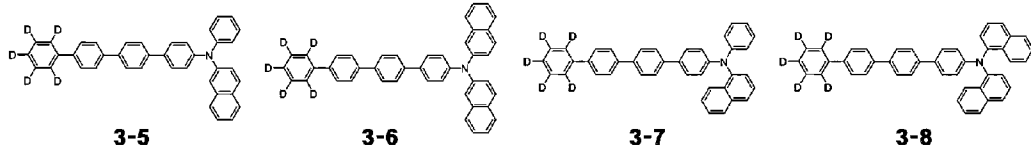
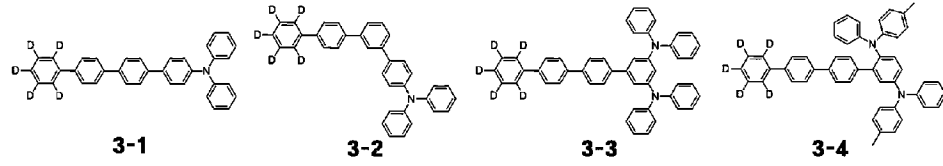
[67] 페닐기에 치환될 수 있는 R₁~R₄는 화학식 2 및 3에서 설명한 R₁~R₂는 동일할 수 있으나 이에 제한되지 않는다. 예를 들어 R₁~R₄는 서로 같거나 상이하고 각각 서로 독립적으로 수소원자, 중수소, 삼중수소; 치환 또는 비치환된 핵탄소수 5~60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵탄소수 5~60의 헤테로 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~60의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 핵탄소수 5~60의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 핵탄소수 5~60의 아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 핵탄소수 5~60의 알콕시카보닐기, 치환 또는 비치환된 핵탄소수 5~60의 아릴기로 치환된 아미노기, 할로젠 원자, 사이아노기, 나이트로기, 하이드록실기 또는 카복실기일 수 있으나 이에 제한되지 않는다. 한편, b~e는 0~4의 정수일 수 있다. 이때 R₁ 내지 R₄도 각각 인접한 기와 결합하여 치환 또는 비치환된 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다. 예를 들어 R₁과 R₂, R₂와 R₃, R₃와 R₄, R₄와 R₁은 각각 인접한 기와 결합하여 치환 또는 비치환된 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

[68] 한편, 화학식 7 내지 화학식 10의 X는 C(R₁)(R₂), N(R₃)(R₄), S, O, Si일 수 있으나 이에 제한되지 않는다. 한편, f~i는 0~1의 정수이다.

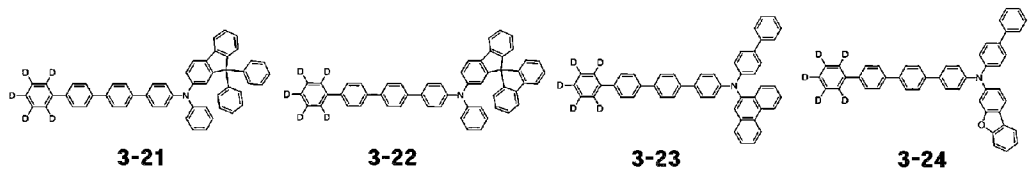
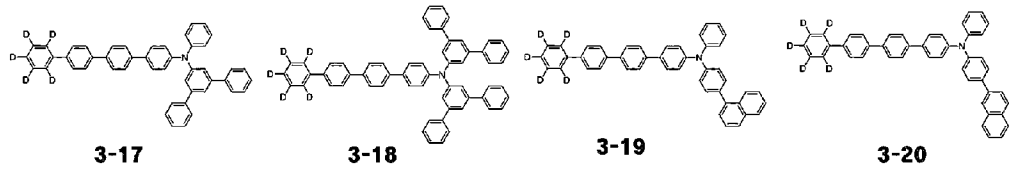
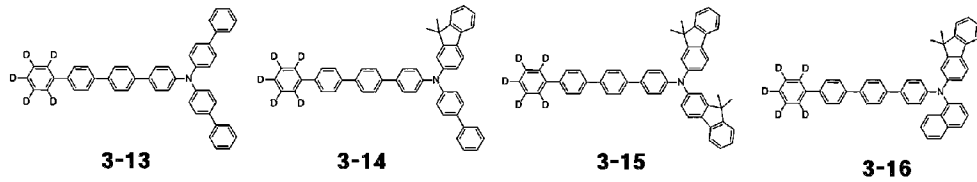
[69] 화학식 1 내지 10으로 표시되는 화합물은 구체적으로 아래 화학식 11과 같이 화합물로 표시되며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[70] [화학식 11]

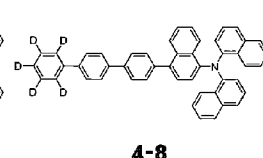
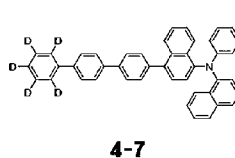
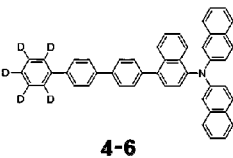
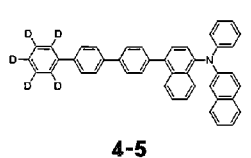
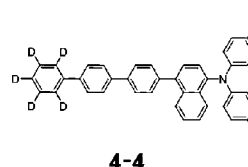
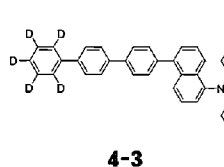
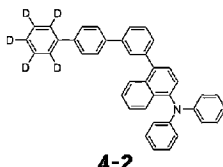
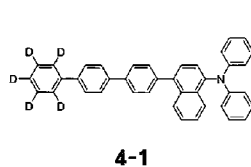
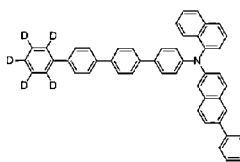
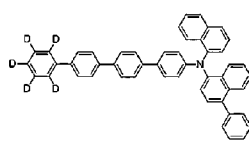
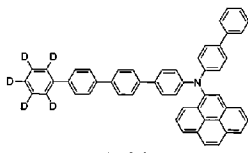
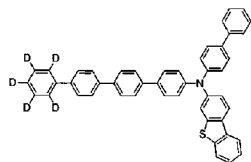
[71]



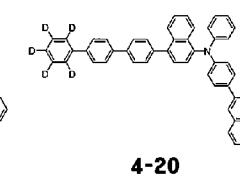
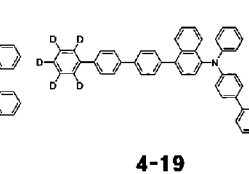
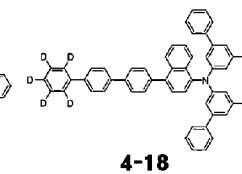
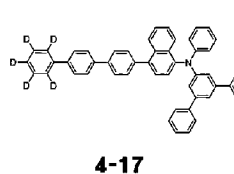
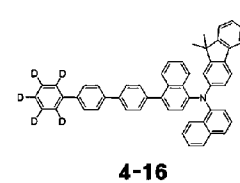
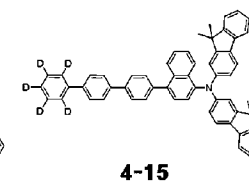
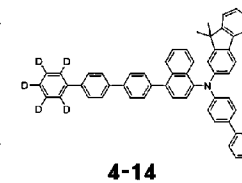
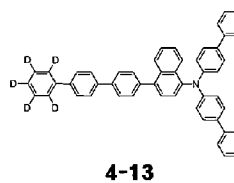
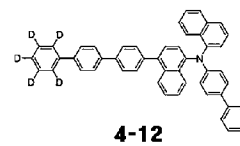
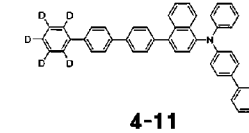
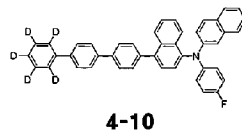
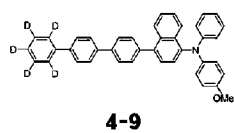
[72]



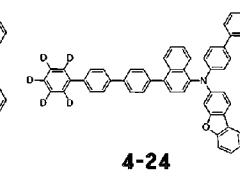
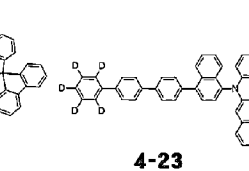
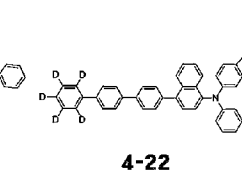
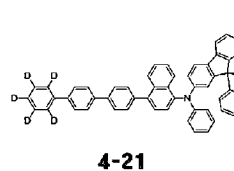
[73]



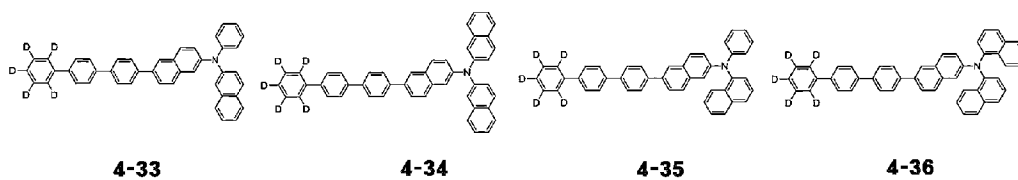
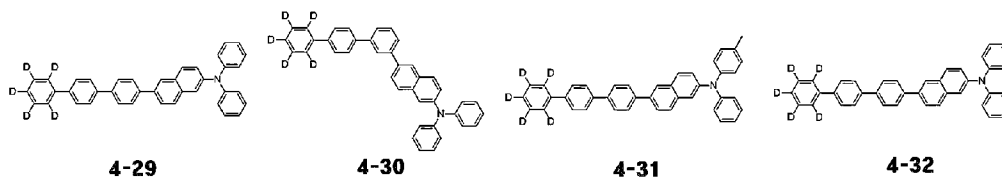
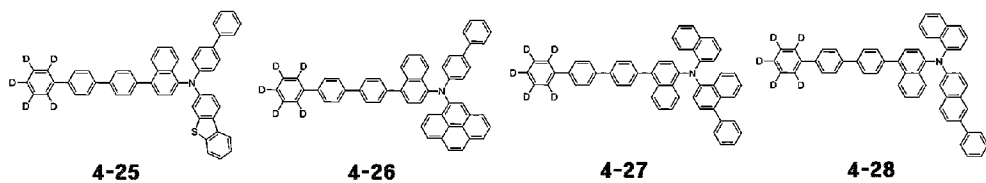
[74]



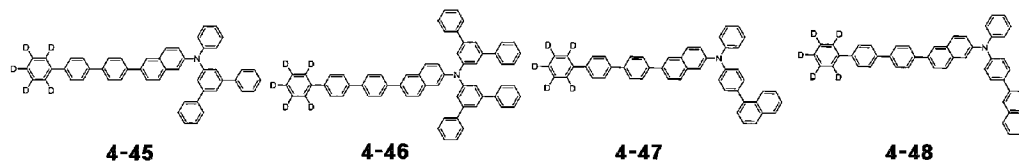
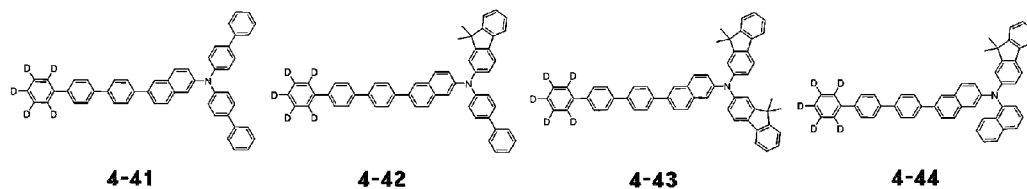
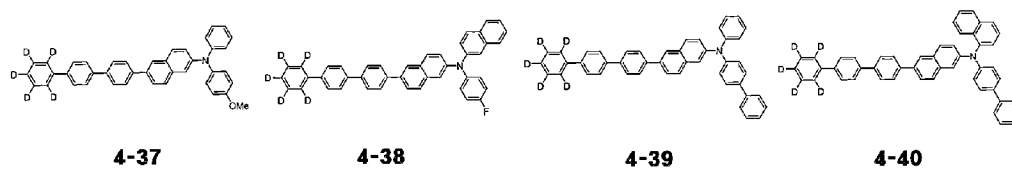
[75]



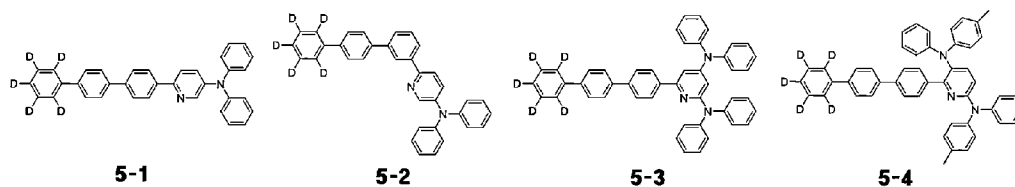
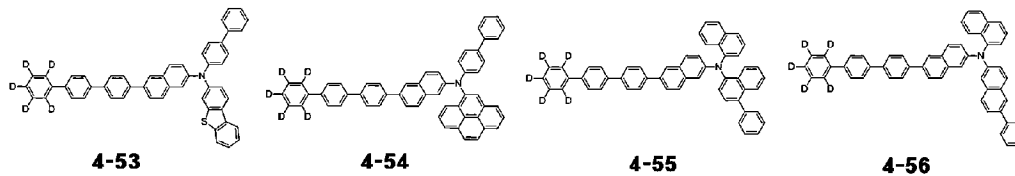
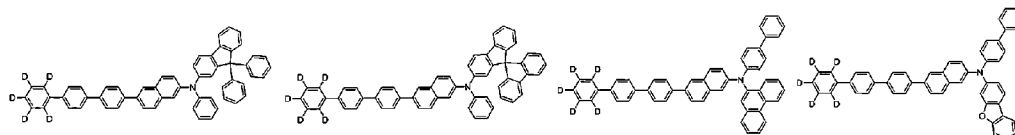
[76]



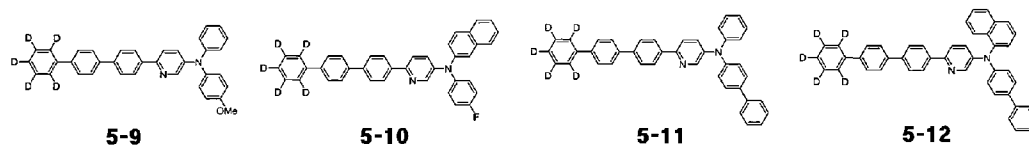
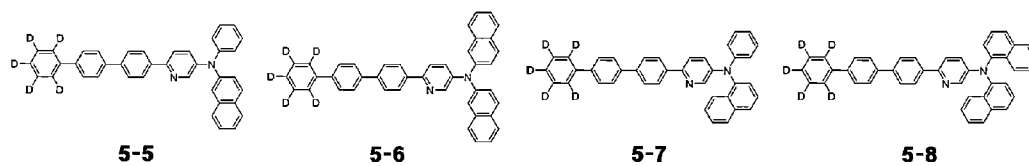
[77]



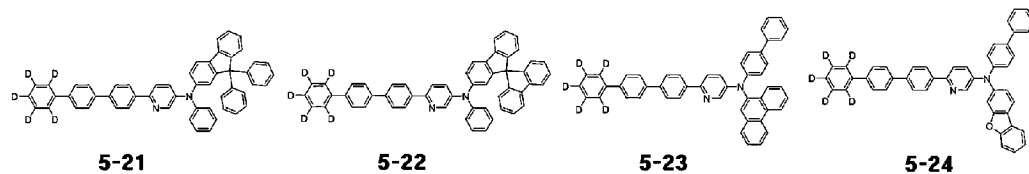
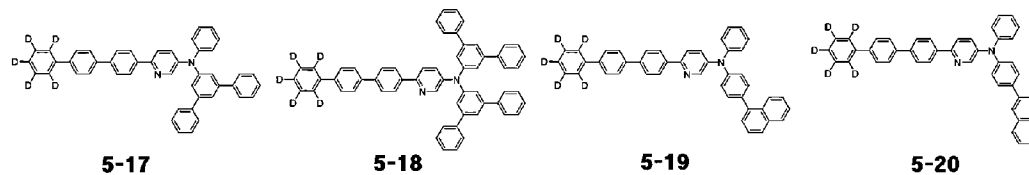
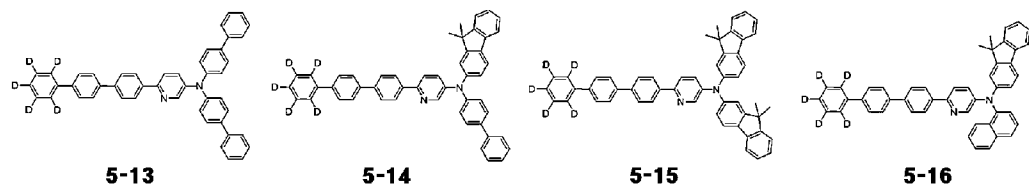
[78]



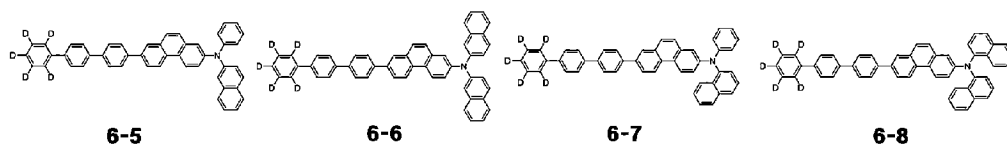
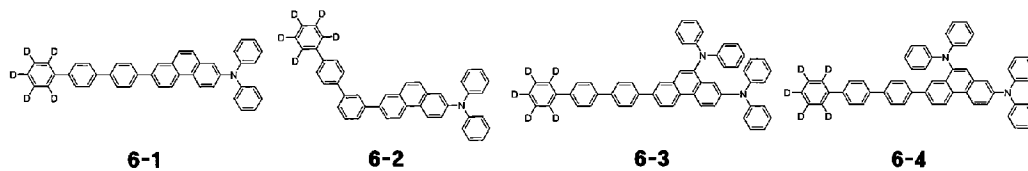
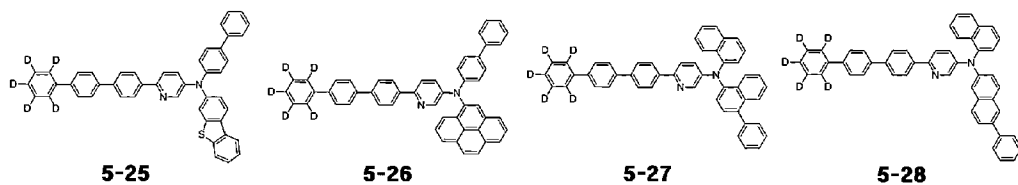
[79]



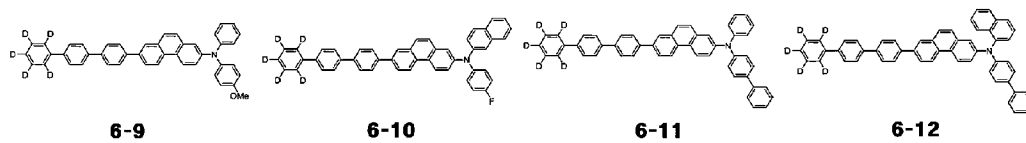
[80]



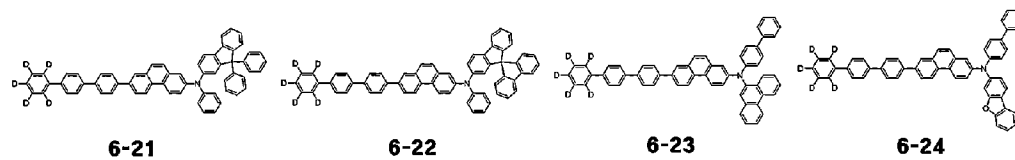
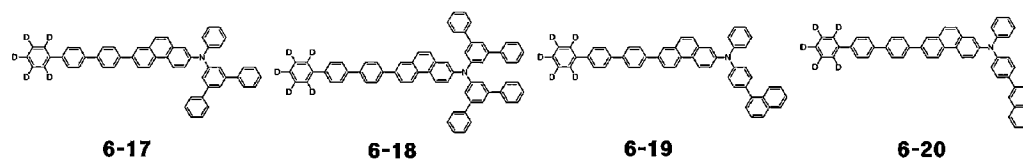
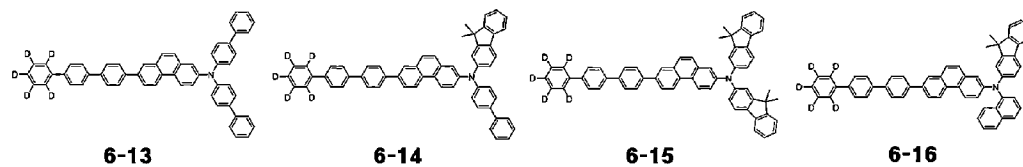
[81]



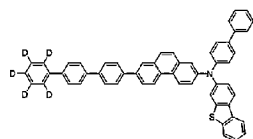
[82]



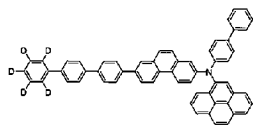
[83]



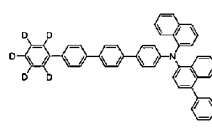
[84]



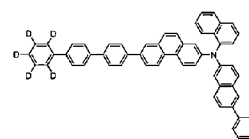
6-25



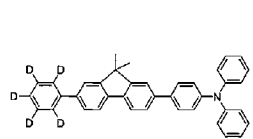
6-26



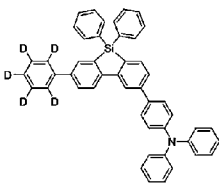
6-27



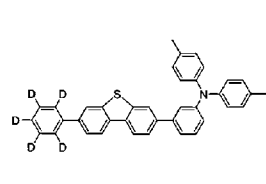
6-28



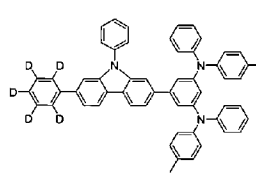
7-1



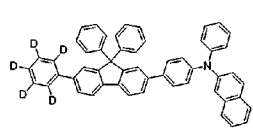
7-2



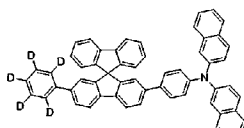
7-3



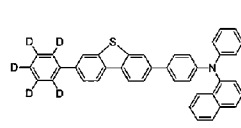
7-4



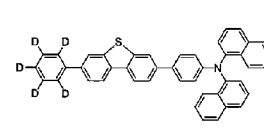
7-5



7-6

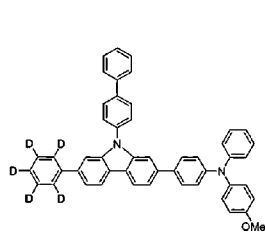


7-7

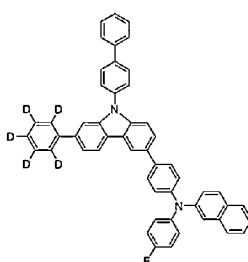


7-8

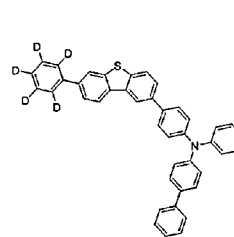
[85]



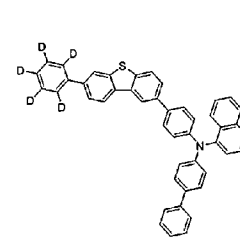
7-9



7-10

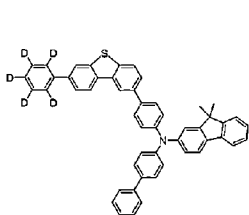


7-11

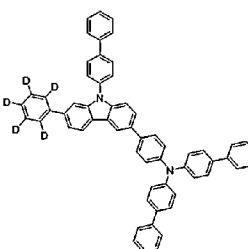


7-12

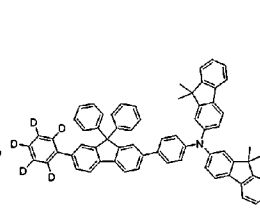
[86]



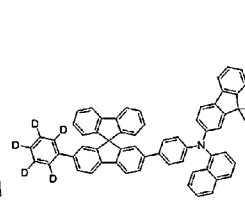
7-13



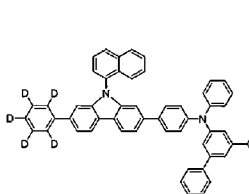
7-14



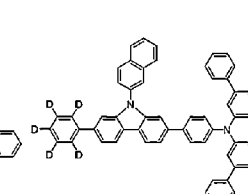
7-15



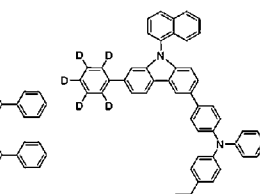
7-16



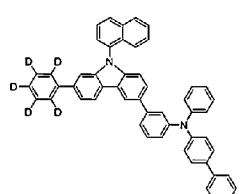
7-17



7-18

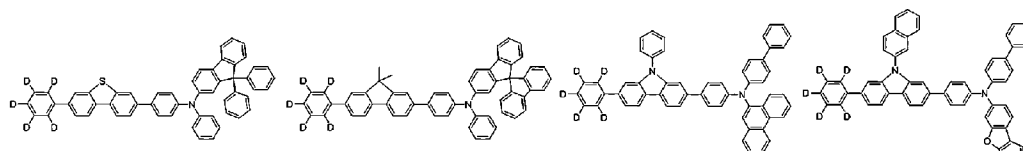


7-19



7-20

[87]

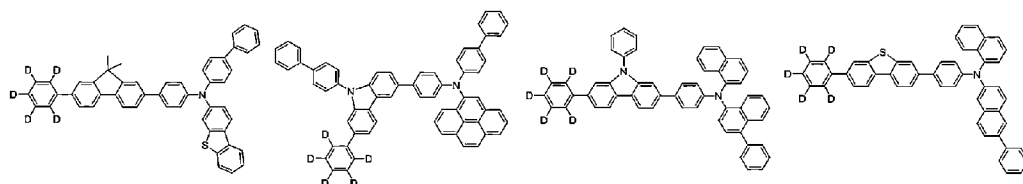


7-21

7-22

7-23

7-24



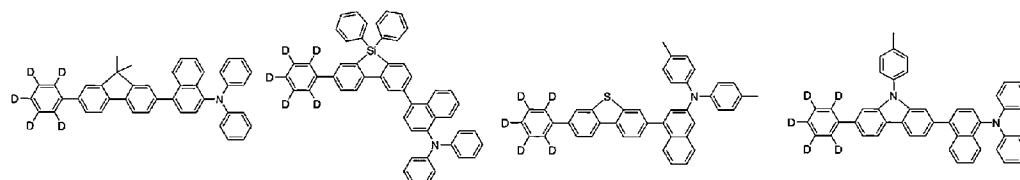
7-25

7-26

7-27

7-28

[88]

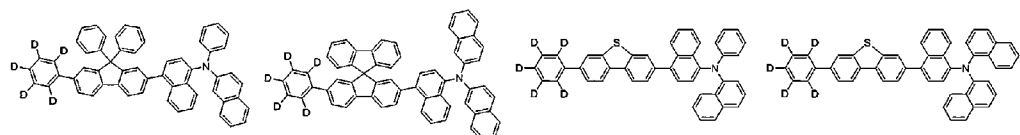


8-1

8-2

8-3

8-4



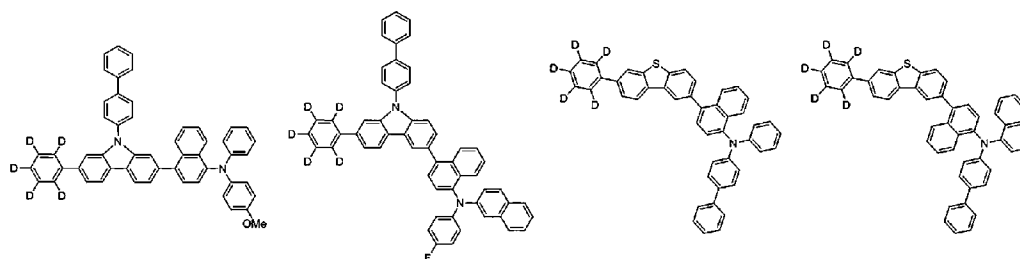
8-5

8-6

8-7

8-8

[89]

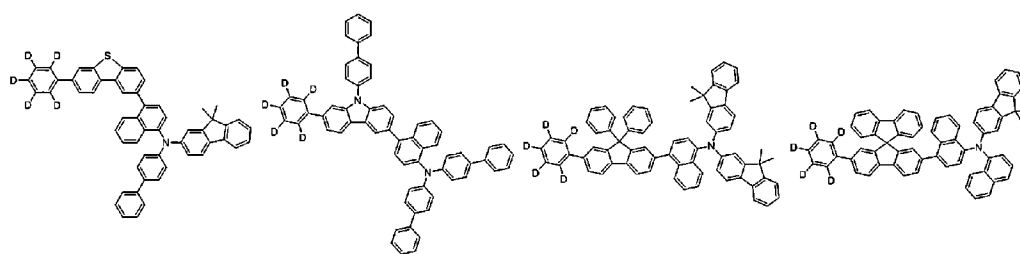


8-9

8-10

8-11

8-12



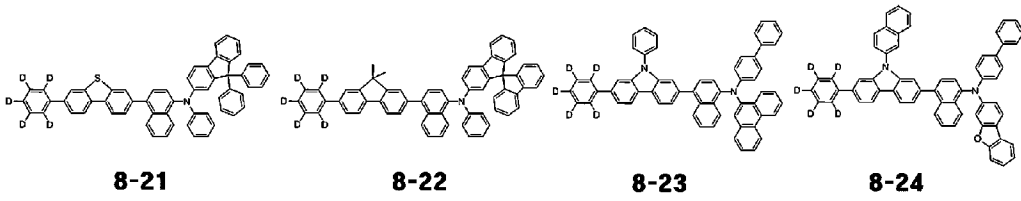
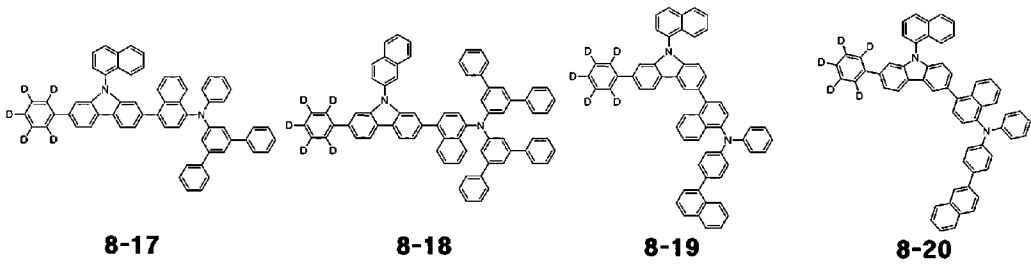
8-13

8-14

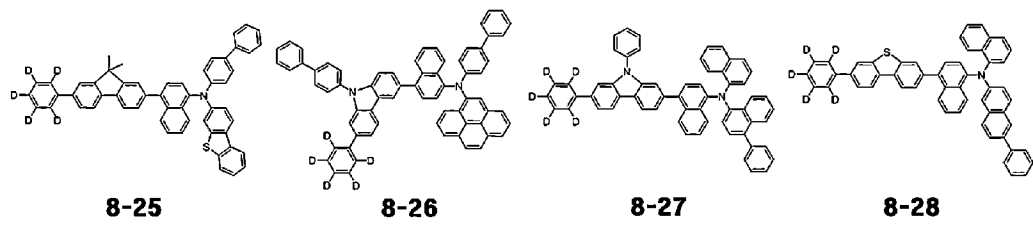
8-15

8-16

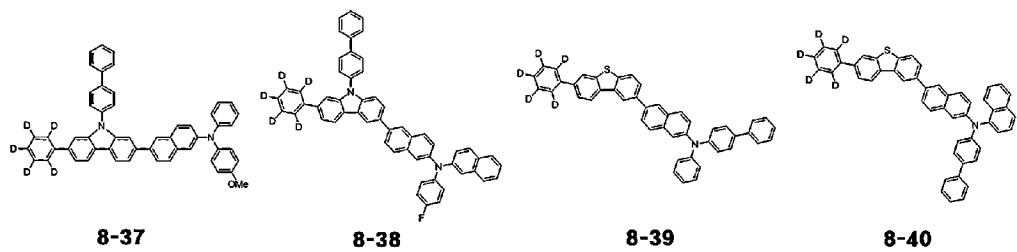
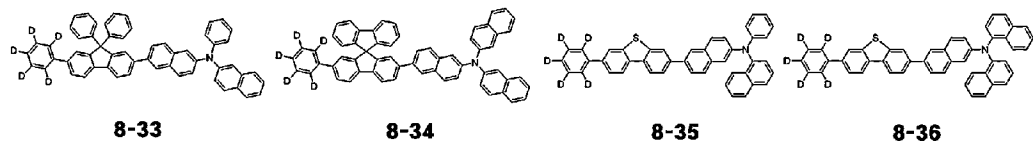
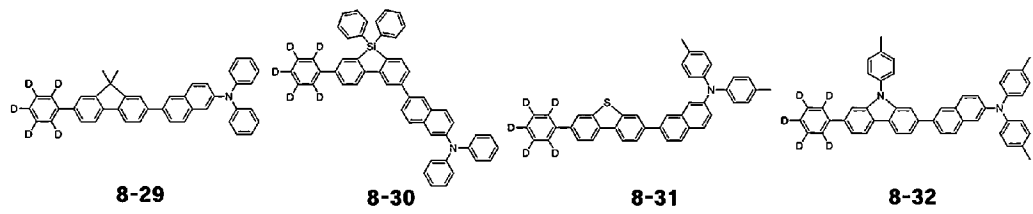
[90]



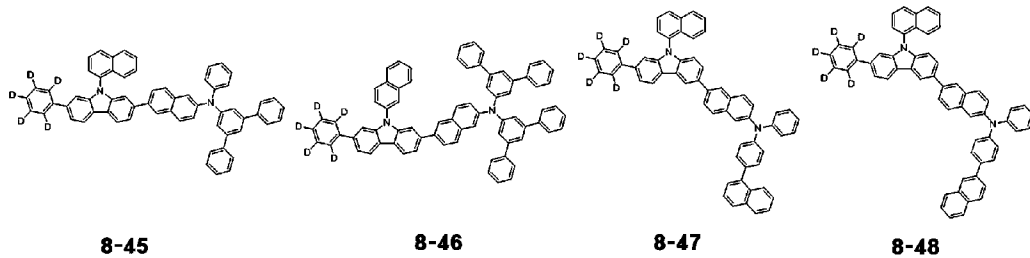
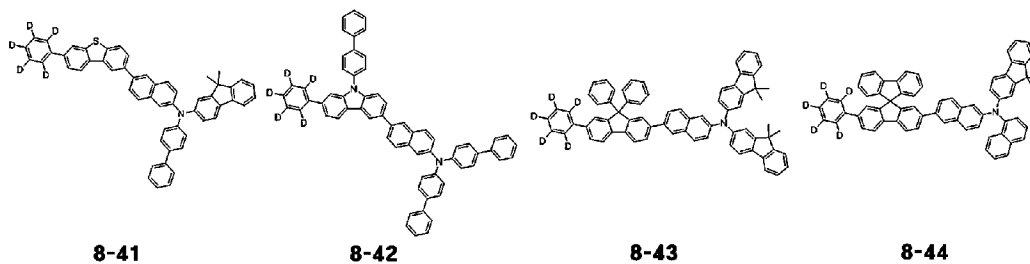
[91]



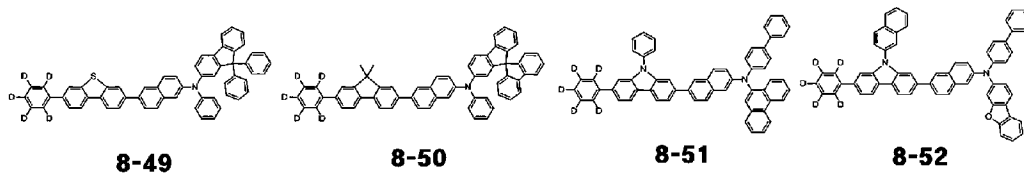
[92]



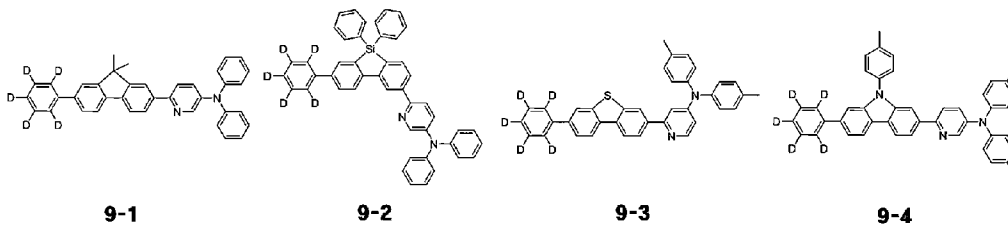
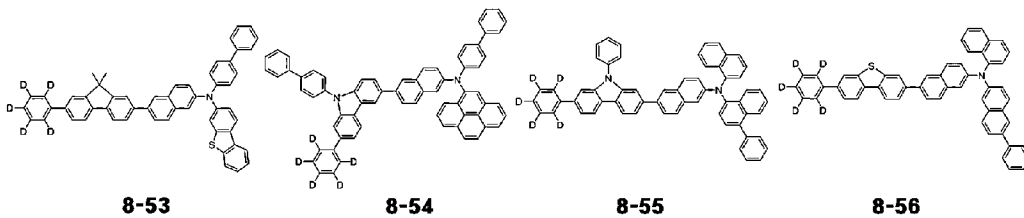
[93]



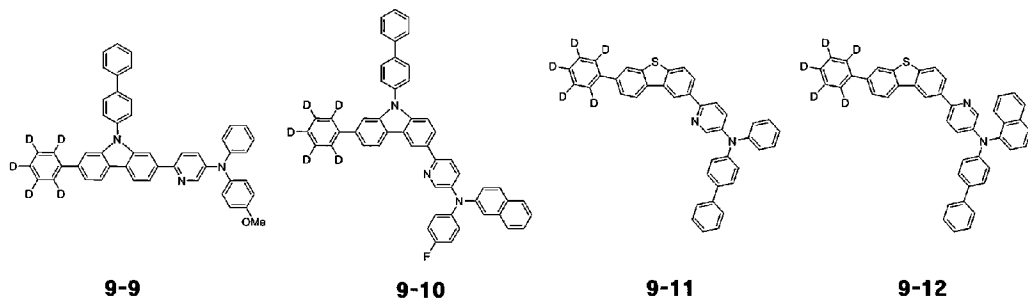
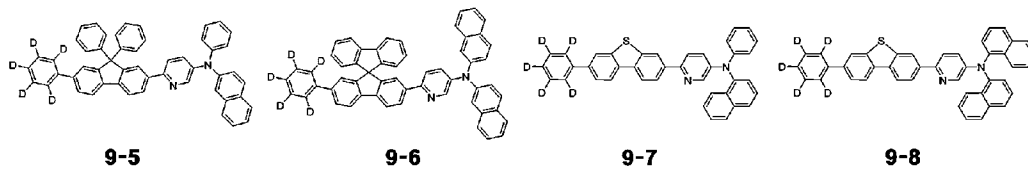
[94]



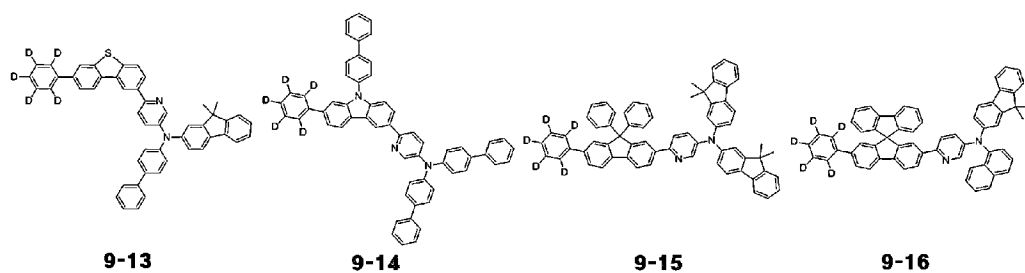
[95]



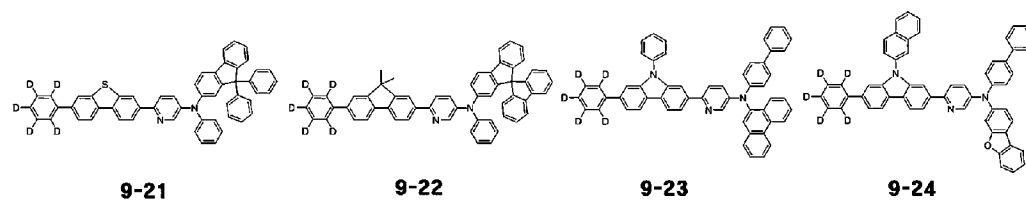
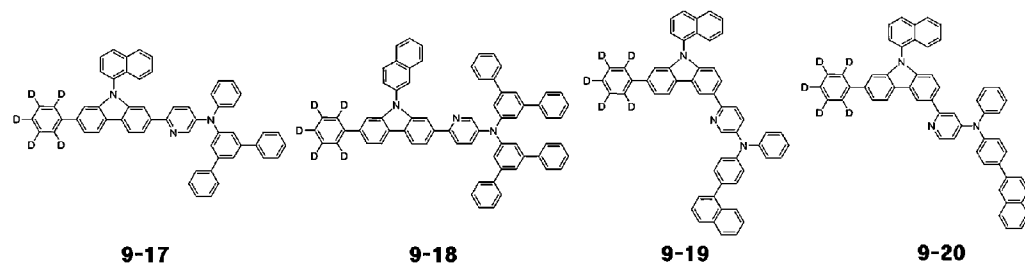
[96]



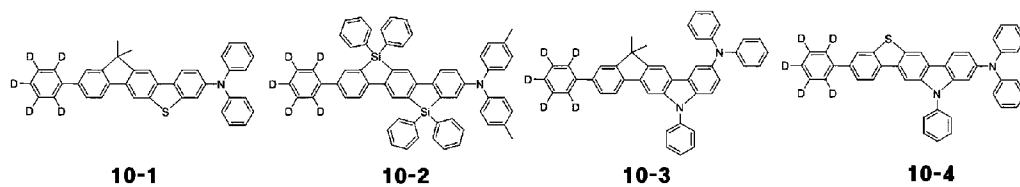
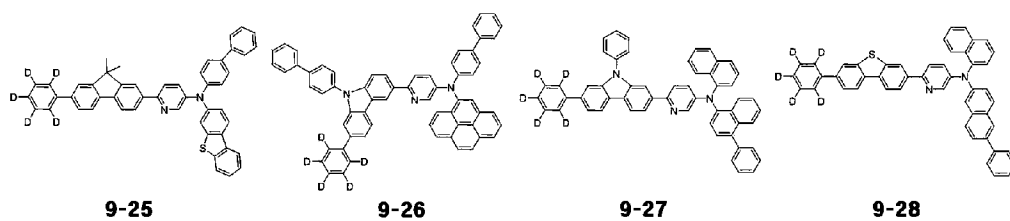
[97]



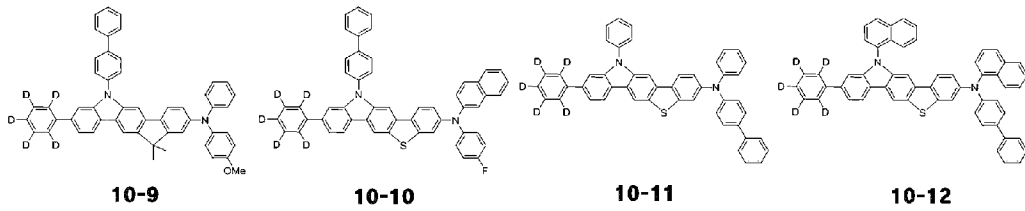
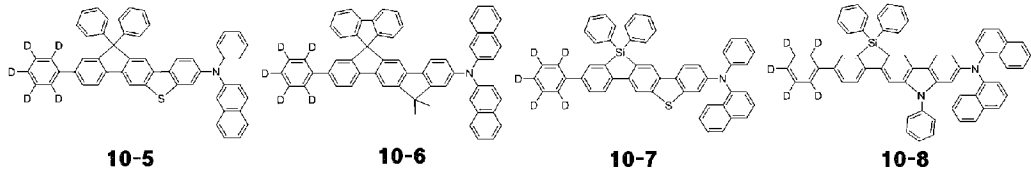
[98]



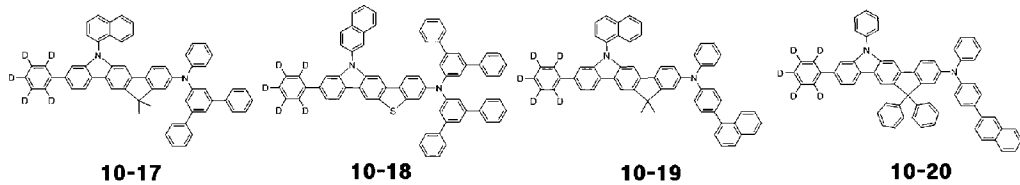
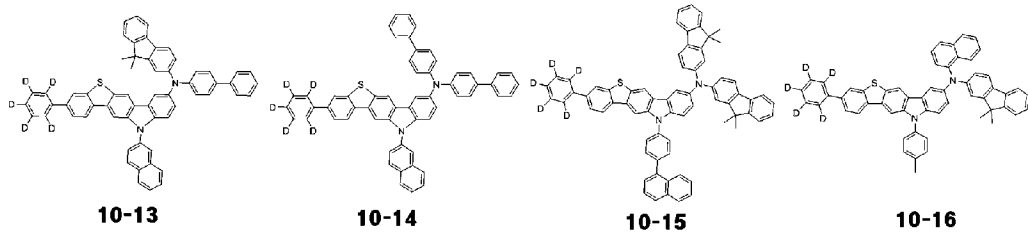
[99]



[100]



[101]



[102] 아울러 화학식 1 내지 11에서 치환체들은 위에서 언급하지 않은 경우라도 다시 치환되거나 비치환될 수도 있어, 치환체가 다시 다른 치환기 또는 치환체로 치환될 수도 있다.

[103] 화학식 1 내지 11를 참조하여 설명한 중수소로 치환된 페닐기가 연결되어진 트리페닐유도체에 치환기를 가지고 있는 연결기가 결합되어진 화합물들이 유기물층으로 사용되는 다양한 유기전기소자들이 존재한다. 화학식 1 내지 11을 참조하여 설명한 화합물들이 사용될 수 있는 유기전기소자는 예를 들어, 유기전계발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC) 드럼, 유기트랜지스트(유기 TFT) 등이 있다.

[104] 화학식 1 내지 11을 참조하여 설명한 화합물들이 적용될 수 있는 유기전기소자 중 일례로 유기전계발광소자(OLED)에 대하여 설명하나, 본 발명은 이에 제한되지 않고 다양한 유기전기소자에 위에서 설명한 화합물들이 적용될 수 있다.

[105] 본 발명의 다른 실시예는 제1 전극, 제2 전극 및 이들 전극 사이에 배치된 유기물층을 포함하는 유기전기소자에 있어서, 상기 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1 내지 11의 화합물들을 포함하는 유기전계발광소자를 제공한다.

[106] 도 1 내지 도 6은 본 발명의 화합물을 적용할 수 있는 유기전계발광소자의 예를 도시한 것이다.

[107] 본 발명의 다른 실시예에 따른 유기전계발광소자는, 정공주입층, 정공수송층,

발광층, 전자수송층 및 전자주입층을 포함하는 유기물층 중 1층 이상을 상기 화학식 1 내지 11의 화합물들을 포함하도록 형성하는 것을 제외하고는, 당 기술 분야에 통상의 제조 방법 및 재료를 이용하여 당 기술 분야에 알려져 있는 구조로 제조될 수 있다.

- [108] 본 발명에 다른 실시예에 따른 유기전계발광소자의 구조는 도 1 내지 6에 예시되어 있으나, 이들 구조에만 한정된 것은 아니다. 이때, 도면번호 101은 기판, 102는 양극, 103는 정공주입층(HIL), 104는 정공수송층(HTL), 105는 발광층(EML), 106은 전자주입층(EIL), 107은 전자수송층(ETL), 108은 음극을 나타낸다. 미도시하였지만, 이러한 유기전계발광소자는 정공의 이동을 저지하는 정공저지층(HBL), 전자의 이동을 저지하는 전자저지층(EBL), 발광을 돕거나 보조하는 발광보조층 및 보호층이 더 위치할 수도 있다. 보호층의 경우 최상위층에서 유기물층을 보호하거나 음극을 보호하도록 형성될 수 있다.
- [109] 이때, 화학식 1 내지 11을 참조하여 설명한 화합물은 정공주입층, 정공수송층, 발광층 및 전자수송층을 포함하는 유기물층 중 하나 이상에 포함될 수 있다. 구체적으로, 화학식 1 내지 11을 참조하여 설명한 화합물은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층, 정공저지층, 전자저지층, 발광보조층 및 보호층 중 하나 이상을 대신하여 사용되거나 이들과 함께 층을 형성하여 사용될 수도 있다. 물론 유기물층 중 한층에만 사용되는 것이 아니라 두층 이상에 사용될 수 있다.
- [110] 특히, 화학식 1 내지 11을 참조하여 설명한 화합물에 따라서 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자주입 재료, 전자수송 재료, 발광 재료 및 페시베이션(캐핑) 재료로 사용될 수 있고, 특히 단독으로 발광물질 및 호스트/도판트에서 호스트 또는 도판트로 사용될 수 있으며, 정공 주입, 정공수송층으로 사용될 수 있다.
- [111] 예컨대, 본 발명의 다른 실시예에 따른 유기전계발광소자는 스퍼터링(sputtering)이나 전자빔 증발(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 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다.
- [112] 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기전기소자를 만들 수도 있다. 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 등을 포함하는 다층 구조일 수도 있으나, 이에 한정되지 않고 단층 구조일 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 용액 공정 또는 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀 코팅, 딥 코팅, 닥터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다.
- [113] 본 발명의 다른 실시예에 따른 유기전계발광소자는 위에서 설명한 화합물을 스핀 코팅(spin coating)이나 잉크젯(ink jet) 공정과 같은 용액 공정(soluble

process)에 사용될 수도 있다.

- [114] 기판은 유기전계발광소자의 지지체이며, 실리콘 웨이퍼, 석영 또는 유리판, 금속판, 플라스틱 필름이나 시트 등이 사용될 수 있다.
- [115] 기판 위에는 양극이 위치된다. 이러한 양극은 그 위에 위치되는 정공주입층으로 정공을 주입한다. 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연산화물(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](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [116] 양극 위에는 정공주입층이 위치된다. 이러한 정공주입층의 물질로 요구되는 조건은 양극으로부터의 정공주입 효율이 높으며, 주입된 정공을 효율적으로 수송할 수 있어야 한다. 이를 위해서는 이온화 포텐셜이 작고 가시광선에 대한 투명성이 높으며, 정공에 대한 안정성이 우수해야 한다.
- [117] 정공주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입받을 수 있는 물질로서, 정공주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrine), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [118] 상기 정공주입층 위에는 정공수송층이 위치된다. 이러한 정공수송층은 정공주입층으로부터 정공을 전달받아 그 위에 위치되는 유기발광층으로 수송하는 역할을 하며, 높은 정공 이동도와 정공에 대한 안정성 및 전자를 막아주는 역할을 한다. 이러한 일반적 요구 이외에 차체 표시용으로 응용할 경우 소자에 대한 내열성이 요구되며, 유리 전이 온도(Tg)가 70 °C 이상의 값을 갖는 재료가 바람직하다. 이와 같은 조건을 만족하는 물질들로는 NPD(혹은 NPB라 함), 스피로-아릴아민계화합물, 페릴렌-아릴아민계화합물, 아자시클로헵타트리엔화합물, 비스(디페닐비닐페닐)안트라센, 실리콘게르마늄옥사이드화합물, 실리콘계아릴아민화합물 등이 될 수 있다.
- [119] 정공수송층 위에는 유기발광층이 위치된다. 이러한 유기발광층은 양극과 음극으로부터 각각 주입된 정공과 전자가 재결합하여 발광을 하는 층이며, 양자효율이 높은 물질로 이루어져 있다. 발광 물질로는 정공수송층과 전자수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자효율이 좋은 물질이 바람직하다.

- [120] 이와 같은 조건을 만족하는 물질 또는 화합물로는 녹색의 경우 Alq₃가, 청색의 경우 Balq(8-hydroxyquinoline beryllium salt), DPVBi(4,4'-bis(2,2-diphenylethenyl)-1,1'-biphenyl) 계열, 스피로(Spiro) 물질, 스피로-DPVBi(Spiro-4,4'-bis(2,2-diphenylethenyl)-1,1'-biphenyl), LiPBO(2-(2-benzoxazolyl)-phenol lithium salt), 비스(디페닐비닐페닐비닐)벤젠, 알루미늄-퀴놀린 금속착체, 이미다졸, 티아졸 및 옥사졸의 금속착체 등이 있으며, 청색 발광 효율을 높이기 위해 페릴렌, 및 BczVBi(3,3'[(1,1'-biphenyl)-4,4'-diyldi-2,1-ethenediyl]bis(9-ethyl)-9H-carbazole; DSA(distrylamine)류)를 소량 도핑하여 사용할 수 있다. 적색의 경우는 녹색 발광 물질에 DCJTB([2-(1,1-dimethylethyl)-6-[2-(2,3,6,7-tetrahydro-1,1,7,7-tetramethyl-1H,5H-benzo(ij)quinolizin-9-yl)ethenyl]-4H-pyran-4-ylidene]-propanedinitrile)와 같은 물질을 소량 도핑하여 사용할 수 있다. 잉크젯프린팅, 롤코팅, 스펀코팅 등의 공정을 사용하여 발광층을 형성할 경우에, 폴리페닐렌비닐렌(PPV) 계열의 고분자나 폴리플로렌(poly 플루오렌(fluorene)) 등의 고분자를 유기발광층에 사용할 수 있다.
- [121] 유기발광층 위에는 전자수송층이 위치된다. 이러한 전자수송층은 그 위에 위치되는 음극으로부터 전자주입 효율이 높고 주입된 전자를 효율적으로 수송할 수 있는 물질이 필요하다. 이를 위해서는 전자 친화력과 전자 이동속도가 크고 전자에 대한 안정성이 우수한 물질로 이루어져야 한다. 이와 같은 조건을 충족시키는 전자수송 물질로는 구체적인 예로 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq₃를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [122] 전자수송층 위에는 전자주입층이 적층된다. 전자주입층은 Balq, Alq₃, Be(bq)₂, Zn(BTZ)₂, Zn(phq)₂, PBD, spiro-PBD, TPBI, Tf-6P 등과 같은 금속착제 화합물, imidazole ring 을 갖는 aromatic 화합물이나 boron 화합물 등을 포함하는 저분자 물질을 이용하여 제작할 수 있다. 이때, 전자주입층은 100Å ~ 300Å의 두께 범위에서 형성될 수 있다.
- [123] 전자주입층 위에는 음극이 위치된다. 이러한 음극은 전자를 주입하는 역할을 한다. 음극으로 사용하는 재료는 양극에 사용된 재료를 이용하는 것이 가능하며, 효율적인 전자주입을 위해서는 일 함수가 낮은 금속이 보다 바람직하다. 특히 주석, 마그네슘, 인듐, 칼슘, 나트륨, 리튬, 알루미늄, 은 등의 적당한 금속, 또는 그들의 적절한 합금이 사용될 수 있다. 또한 100 μm 이하 두께의 리튬플루오라이드와 알루미늄, 산화리튬과 알루미늄, 스트론튬산화물과 알루미늄 등의 2 층 구조의 전극도 사용될 수 있다.
- [124] 전술하였듯이, 화학식 1 내지 11을 참조하여 설명한 화합물에 따라서 적색, 녹색, 청색, 흰색 등의 모든 칼라의 형광과 인광소자에 적합한 정공주입 재료, 정공수송 재료, 발광 재료, 전자수송 재료 및 전자주입 재료로 사용할 수 있으며,

다양한 색의 호스트 또는 도판트 물질로 사용될 수 있다.

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

[126] 한편 본 발명은, 위에서 설명한 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치와, 이 디스플레이장치를 구동하는 제어부를 포함하는 단말을 포함한다. 이 단말은 현재 또는 장래의 유무선 통신단말을 의미한다. 이상에서 기술한 본 발명에 따른 단말은 휴대폰 등의 이동 통신 단말기일 수 있으며, PDA, 전자사전, PMP, 리모콘, 네비게이션, 게임기, 각종 TV, 각종 컴퓨터 등 모든 단말을 포함한다.

[127] 실시에

[128] 이하, 제조에 및 실험예를 통하여 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다. 그러나, 이하의 제조에 및 실험예는 본 발명을 예시하기 위한 것이며, 본 발명의 범위가 이들에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[129] 제조예

[130] 이하, 화학식 1 내지 11에 속하는 화합물들에 대한 제조예 또는 합성예를 설명한다.

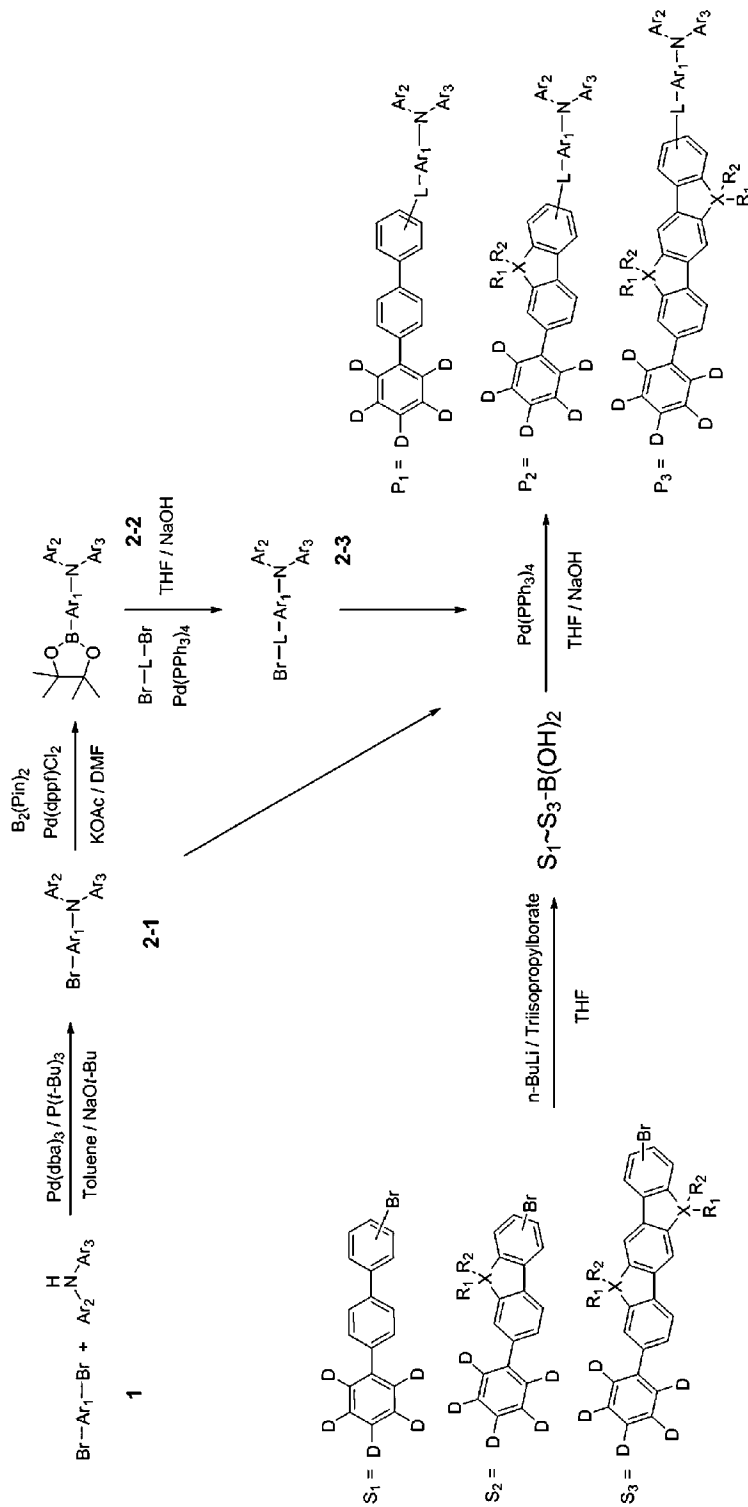
[131] 다만, 화학식 1 내지 11에 속하는 화합물들의 수가 많기 때문에 화학식 1 내지 11에 속하는 화합물들 중 일부를 예시적으로 설명한다. 본 발명이 속하는 기술분야의 통상의 지식을 가진 자, 즉 당업자라면 하기에서 설명한 제조예들을 통해, 예시하지 않은 본 발명에 속하는 화합물을 제조할 수 있다.

[132] 이하 위에서 설명한 합성법에 따라 화합물들을 합성하고 그 화합물들을 유기전기소자, 예를 들어 유기전계발광소자의 유기물층에 적용한 예를 일반적으로 사용하는 화합물들과 비교하였다.

[133] 1) 화학식 3, 4, 5의 일반적인 합성 방법

[134] [반응식 1]

[135]

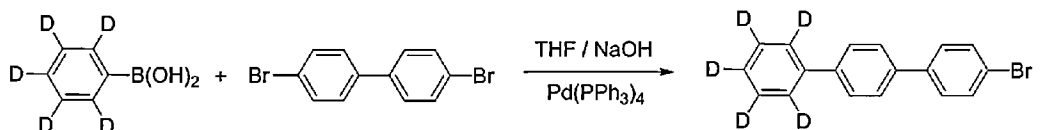


[136] 출발물질 합성 예시

[137] 출발물질 S₁-1 (4-Bromo-P-terphenyl-d₅)의 합성

[138] [반응식 2]

[139]



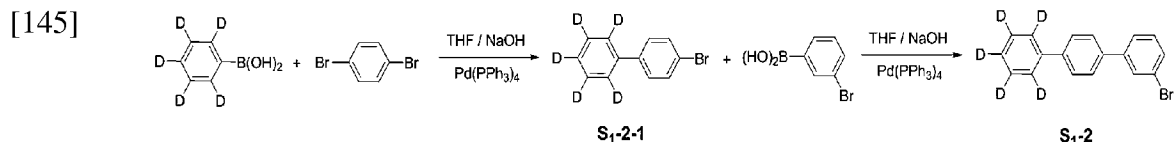
[140] 2L 둥근바닥플라스크에 Phenyl-d5-boronic acid(43.8 g, 345 mmol), THF (700 mL), H₂O (350 mL)을 넣고 녹인 후에 4,4' Dibromo-biphenyl (161g, 518 mmol), NaOH (42 g, 1035 mmol), Pd(PPh₃)₄ (20 g, 17.3 mmol)을 순서대로 넣고 80°C에서 반응을 24시간 동안 진행한다.

[141] 반응이 완료되면 메틸렌클로라이드와 물, brine 을 이용하여 추출하고 MgSO₄ 로 유기층을 건조한다.

[142] 얻어진 유기층을 silicagel column 하여 65.05g (60 %)의 생성물을 얻었다.

[143] 출발물질 S₁-2 (3-Bromo-P-terphenyl-d5)의 합성

[144] [반응식 3]



[146] 2L 둥근바닥플라스크에 Phenyl-d5-boronic acid(43.8 g, 345 mmol), THF (700 mL), H₂O (350 mL)을 넣고 녹인 후에 1,4-Dibromobenzene (122.2g, 518 mmol), NaOH (42 g, 1035 mmol), Pd(PPh₃)₄ (20 g, 17.3 mmol)을 순서대로 넣고 80°C에서 반응을 24시간 동안 진행한다.

[147] 반응이 완료되면 메틸렌클로라이드와 물, brine 을 이용하여 추출하고 MgSO₄ 로 유기층을 건조한다.

[148] 얻어진 유기층을 silica gel short column 한 후 농축하여 메틸렌클로라이드와 헥산으로 재결정하여 68.3g (63 %)의 S₁-2-1을 얻었다 얻어진 S₁-2-1 (68.3 g, 293 mmol), THF (600 mL), H₂O (300 mL)을 넣고 녹인 후에 3-bromophenylboronic acid (39.2g, 195 mmol), NaOH (35.7 g, 879mmol), Pd(PPh₃)₄ (17 g, 14.7mmol)을 순서대로 넣고 80°C에서 반응을 24시간 동안 진행한다.

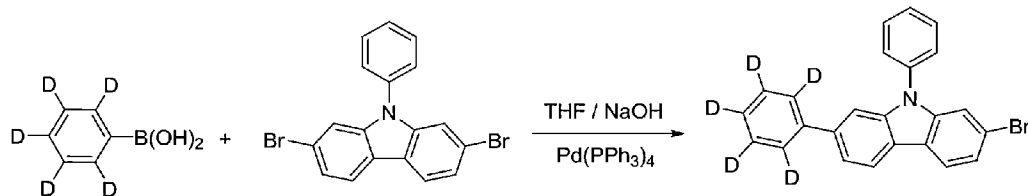
[149] 반응이 완료되면 메틸렌클로라이드와 물, brine 을 이용하여 추출하고 MgSO₄ 로 유기층을 건조한다.

[150] 얻어진 유기층을 silica gel short column 한 후 농축하여 메틸렌클로라이드와 헥산으로 재결정하여 40g (65 %)의 S₁-2-1을 얻었다

[151] 출발물질 S₂-1 (2-Bromo-7-phenyl-9-d5-phenyl-carbazole)의 합성

[152] [반응식 4]

[153]



[154] 2L 둥근바닥플라스크에 Phenyl-d5-boronic acid(43.8 g, 345 mmol), THF (700 mL), H₂O (350 mL)을 넣고 녹인 후에 2,7-Dibromo-9-phenyl-carbazole (207g, 518 mmol), NaOH (42 g, 1035 mmol), Pd(PPh₃)₄ (20 g, 17.3 mmol)을 순서대로 넣고 80°C에서 반응을 24시간 동안 진행한다.

[155] 반응이 완료되면 메틸렌클로라이드와 물, brine 을 이용하여 추출하고 MgSO₄ 로 유기층을 건조한다.

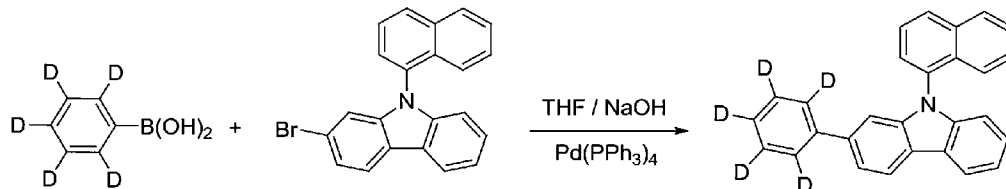
[156] 얻어진 유기층을 silicagel column 하여 92.1g (67 %)의 생성물을 얻었다

[157] 출발물질 S₂-2 [3-Bromo-9-(naphthalene-1-yl)-7-phenyl-d₅-carbazole]의 합성

[158] **Step 1) 9-(Biphenyl-4-yl)-2-phenyl-d₅-carbazole**

[159] [반응식 5]

[160]

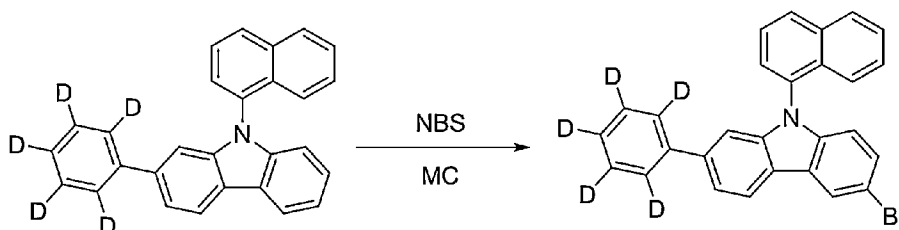


[161] 2L 둥근바닥플라스크에 Phenyl-d₅-boronic acid(43.8 g, 345 mmol), THF (700 mL), H₂O (350 mL)을 넣고 녹인 후에 2-bromo-9-(naphthalene-1-yl)-carbazole (193g, 518 mmol), NaOH (42 g, 1035 mmol), Pd(PPh₃)₄ (20 g, 17.3 mmol)을 순서대로 넣고 80°C에서 반응을 24시간 동안 진행한다. 반응이 완료되면 메틸렌클로라이드와 물, brine 을 이용하여 추출하고 MgSO₄로 유기층을 건조한다. 얻어진 유기층을 silicagel column 하여 87.9g (68 %)의 생성물을 얻었다

[162] Step 2) [3-Bromo-9-(naphthalene-1-yl)-7-phenyl-d₅-carbazole]

[163] [반응식 6]

[164]



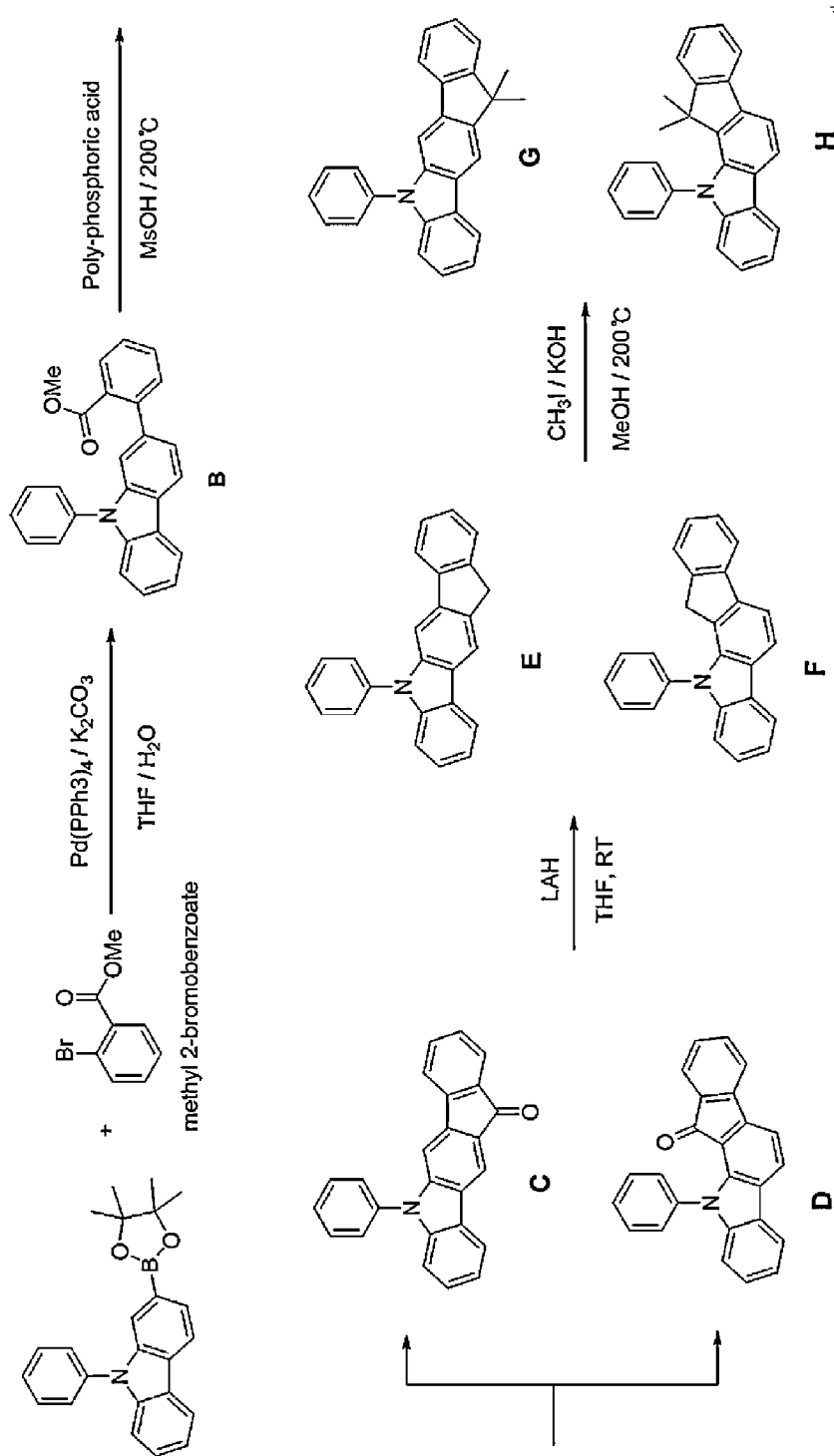
[165] 500 mL 반응 플라스크에 9-(naphthalene-1-yl)-2-phenyl-d₅-carbazole (30.4g, 82.2 mmol), NBS (15.36g, 86.31 mmol), 메틸렌클로라이드 (200 mL) 을 넣고 상온에서 5시간 동안 반응을 진행시킨다.

[166] 반응이 완료되면 메틸렌클로라이드와 Na₂CO₃ 수용액으로 추출하고 MgSO₄로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 short phase Column 한 후에 메틸렌클로라이드와 헥산으로 재결정하여 31.3 g (85 %) 을 얻었다

[167] 출발물질 S₃-1 [3-Bromo-9-(naphthalene-1-yl)-7-phenyl-d₅-carbazole]의 합성

[168] [반응식 7]

[169]



[170] **B (methyl 2-(9-phenyl-9H-carbazol-2-yl)benzoate)의 합성**

[171] 1L 2-neck 둥근바닥 플라스크에 출발물질 (36.9 g, 100 mmol), 2-bromomethylbenzoate (21.5 g, 100 mmol), Pd(PPh₃)₄ (3.47 g, 3 mmol), K₂CO₃ (41.5 g, 300 mmol)를 넣고 여기에 용매로서 THF(400 mL), 물 (100 mL)을 넣은 다음 80°C에서 6시간 동안 교반한다. 반응용액의 온도를 상온으로 내리고 methylene chloride 와 물을 가지고 추출하였다. 얻어진 추출액을 MgSO₄로 건조시킨 후 감압 건조하여 crude product를 얻고 silica gel column 으로 분리정제하여 중간체

B를 노란색 고체로 26.0 g (수율 : 69%)을 얻었다.

[172] **C (5-phenylindeno[1,2-b]carbazol-11(5H)-one)의 합성**

[173] 250 mL 2-neck 둥근바닥 플라스크에 B(18.9 g, 50 mmol), methanesulfonic acid (4.8 g, 50 mmol), poly-phosphoric acid (100 mL, 0.5M)을 넣은 다음 200°C에서 48시간동안 환류한다. 반응용액의 온도를 상온으로 내리고 diethylether 로 추출하였다. 얻어진 추출액을 MgSO₄로 건조시킨 후 감압 건조하여 crude product을 얻고 silica gel column으로 분리정제하여 중간체 C을 노란색 고체로 5.87 g (수율 : 34%)을 얻었다. (C와 D가 비슷한 수율로 얻어진다.)

[174] **E (5-phenyl-5,11-dihydroindeno[1,2-b]carbazole)의 합성**

[175] 500mL 2-neck 둥근바닥 플라스크에 중간체 C (17.3 g, 50 mmol), LiAlH₄ (5.69 g, 150 mmol)을 넣고 여기에 용매로서 150 mL 의THF 를 넣은 다음 실온에서 6시간 동안 교반한다. 반응이 종결된 후 적당량의 염산을 가한 다음 반응 용액을 diethylether로 추출하였다. 얻어진 추출액을 MgSO₄로 감압 건조하여 crude product 을 얻고 silica gel column 로 분리 정제하여 중간체 E를 노란색 고체로 11.4 g (수율 : 69%)을 얻었다.

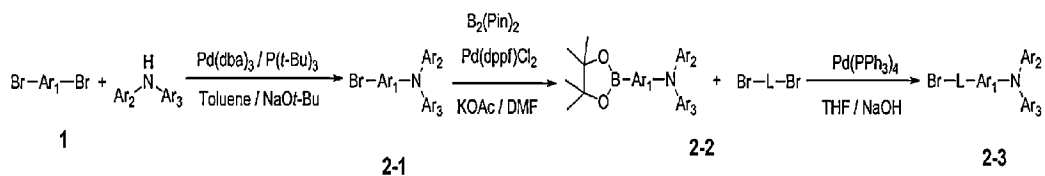
[176] **G (3-Bromo-9-(naphthalene1-yl)-7-phnely-d5-carbazole) 의 합성**

[177] 500mL 2-neck 둥근바닥 플라스크에 중간체 E(16.6 g, 50 mmol), iodomethane (15.6 g, 110 mmol), potassium hydroxide (8.42 g, 150 mmol)을 넣고 여기에 용매로 150 mL methanol 을 넣은 다음 실온에서 3시간 동안 교반한다. 반응이 종결되면 용매인 메탄올을 농축기로 제거한 후 다시 물과 diethylether 을 가한 후 추출하였다. 얻어진 추출액을 MgSO₄로 건조시킨 후 감압 건조하여 Crude product 을 얻고 silica gel column 으로 분리 정제하여 중간체 G를 노란색 고체로 12.9 g(수율 : 72%)을 얻었다.

[178] **중간체 2-1, 2-2의 합성**

[179] [반응식 8]

[180]



[181] **2-1의 합성법**

[182] 둥근바닥플라스크에 1번의 화합물 (1당량), 아민화합물 (1당량), Pd₂(dba)₃ (0.05 mmol), PPh₃ (0.1 당량), NaOt-Bu (3당량), toluene (10.5 mL / 1 mmol)을 넣은 후에 100 °C에서 반응을 진행한다. 반응이 완료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축 한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물을 얻었다.

[183] **2-2의 합성법**

[184] 둥근바닥플라스크에 2-1의 화합물(1당량), Bis(pinacolato)diboron (1당량), Pd(dppf)Cl₂ (0.03당량), KOAc (3당량), DMF (6.3 mL / 1 mmol),을 넣은후에

130°C에서 가열, 환류반응을 진행한다.

[185] 반응이 완료되면 ether 와 물로 추출하고 얻어진 유기층을 $MgSO_4$ 로 건조, 농축한 후에 silicagel column 및 재결정하여 생성물을 얻었다.

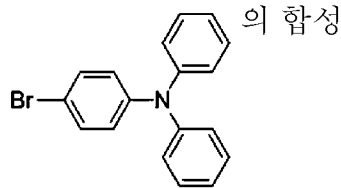
[186] 2-3의 합성법

[187] 둥근바닥플라스크에 2-2의 화합물 (1당량), Br-L-Br (1.1당량), $Pd(PPh_3)_4$ (0.03~0.05당량), NaOH (3당량), THF (3 mL / 1 mmol), 물 (1.5 mL / 1 mmol)을 넣는다.

[188] 그런 후에 80°C~90°C 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시킨다. 그런후에 메틸렌클로라이드와 물로 추출하고 유기층을 $MgSO_4$ 로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물을 얻었다.

[189] 중간체 합성 예시

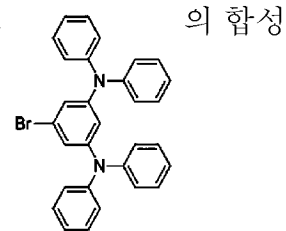
[190] 4-Bromo-N,N-diphenylaniline



[191] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), diphenylamine (8.5 g, 50 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (2.3g, 2.5 mmol), PPh_3 (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 11.3 g (수율 : 70%)의 생성물을 얻었다.

[192]

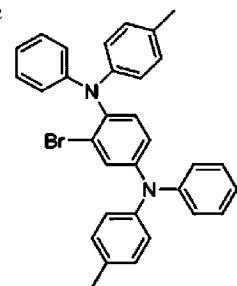
[193] 5-Bromo-N¹,N¹,N³,N³-tetraphenylbenzene-1,3-diamine



[194] 1,3,5-tribromobenzene (15.74 g, 50 mmol), diphenylamine (17 g, 100 mmol), $Pd_2(dba)_3$ (4.6 g, 5 mmol), PPh_3 (2.62 g, 10 mmol), NaOt-Bu (28.83 g, 300 mmol), toluene (525 mL) 을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 16.2 g (수율 : 66%)의 생성물을 얻었다.

[195]

[196] 2-Bromo-N¹,N⁴-diphenyl-N¹,N⁴-dip-tolylbenzene-1,4-diamine

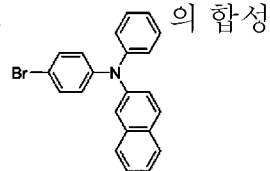


합성

[197] 1,2,5-tribromobenzene (15.74 g, 50 mmol), 4-methyl-N-phenylaniline (18.33 g, 100 mmol), Pd₂(dba)₃ (4.6 g, 5 mmol), PPh₃ (2.62 g, 10 mmol), NaOt-Bu (28.83 g, 300 mmol), toluene (525 mL) 을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 16.4g (수율 : 63%)의 생성물을 얻었다.

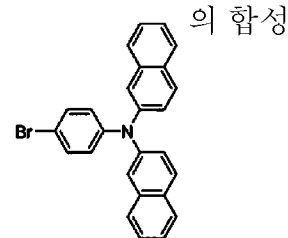
[198]

[199] N-(4-bromophenyl)-N-phenylnaphthalen-2-amine



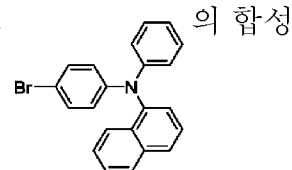
[200] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), N-phenylnaphthalen-2-amine (11g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 13 g (수율 : 69%)의 생성물을 얻었다.

[201] N-(4-bromophenyl)-N-(naphthalen-2-yl)naphthalen-2-amine



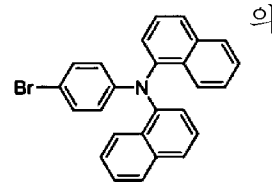
[202] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), dinaphthalen-2-ylamine (13.5 g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 15.3 g (수율 : 72%)의 생성물을 얻었다.

[203] N-(4-bromophenyl)-N-phenylnaphthalen-1-amine



[204] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), N-phenylnaphthalen-1-amine (11 g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 13.3 g (수율 : 71%)의 생성물을 얻었다.

[205] N-(4-bromophenyl)-N-(naphthalen-1-yl)naphthalen-1-amine

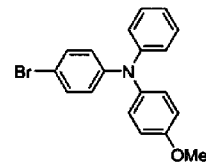


합성

[206] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), dinaphthalen-1-ylamine (13.5 g, 50 mmol),

$\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.3g, 2.5 mmol), PPh_3 (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 15.5 g (수율 : 73%)의 생성물을 얻었다.

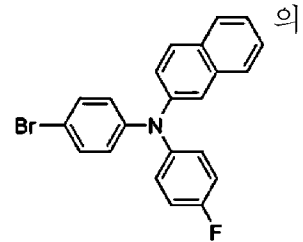
[207] 4-Bromo-N-(4-methoxyphenyl)-N-phenylaniline



의 합성

[208] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), 4-methoxy-N-phenylaniline (10 g, 50 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.3g, 2.5 mmol), PPh_3 (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 13.3 g (수율 : 75%)의 생성물을 얻었다.

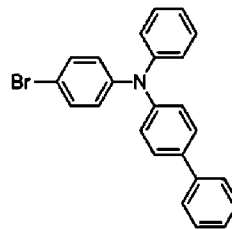
[209] N-(4-bromophenyl)-N-(4-fluorophenyl)naphthalen-2-amine



합성

[210] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), N-(4-fluorophenyl)naphthalen-2-amine (11.9g, 50 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.3g, 2.5 mmol), PPh_3 (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 12.7 g (수율 : 65%)의 생성물을 얻었다.

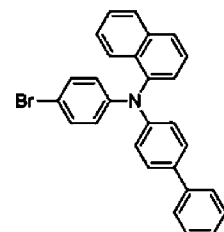
[211] N-(4-bromophenyl)-N-phenylbiphenyl-4-amine



의 합성

[212] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), N-phenylbiphenyl-4-amine (12.3g, 50 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.3g, 2.5 mmol), PPh_3 (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 14.8 g (수율 : 74%)의 생성물을 얻었다.

[213] N-(biphenyl-4-yl)-N-(4-bromophenyl)naphthalen-1-amine



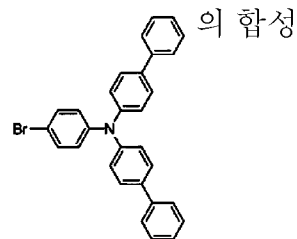
의

합성

[214] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), N-(biphenyl-4-yl)naphthalen-1-amine

(14.8g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 16.2 g (수율 : 72%)의 생성물을 얻었다.

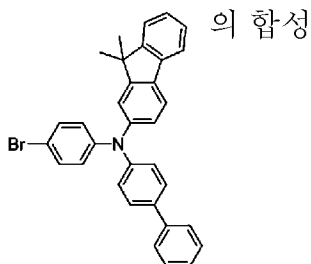
[215] N-(biphenyl-4-yl)-N-(4-bromophenyl)biphenyl-4-amine



[216] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), dibiphenyl-4-ylamine (16.1 g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 17.4 g (수율 : 73%)의 생성물을 얻었다.

[217]

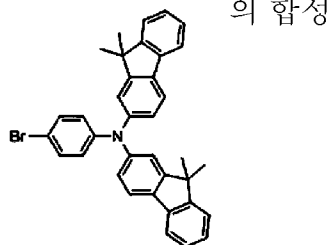
[218] N-(biphenyl-4-yl)-N-(4-bromophenyl)-9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine



[219] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), N-(biphenyl-4-yl)-9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine (18.1g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 19.1 g (수율 : 74%)의 생성물을 얻었다

[220]

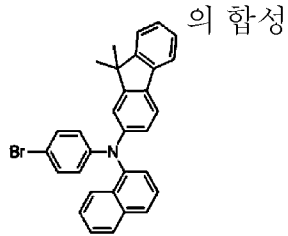
[221] N-(4-bromophenyl)-N-(9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-yl)-9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine



[222] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), bis(9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-yl)amine (20.1g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 19.1 g (수율 : 74%)의 생성물을 얻었다

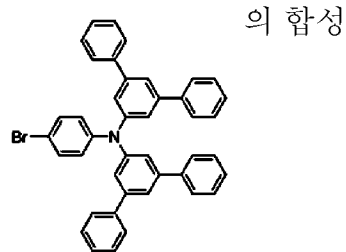
[223]

[224]



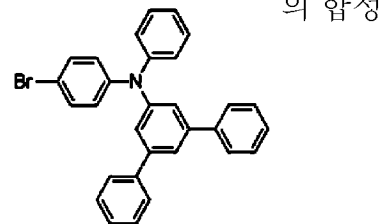
[225] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), 9,9-dimethyl-N-(naphthalen-1-yl)-9H-fluoren-2-amine (16.8g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 16.7 g (수율 : 68%)의 생성물을 얻었다

[226] N-(4-bromophenyl)-N,N-di-m-terphenyl-amine



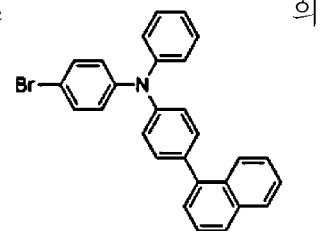
[227] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), N,N-di-m-terphenyl amine(23.7g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 21.1g (수율 : 67%)의 생성물을 얻었다

[228] N-(4-bromophenyl)-N-phenyl-N-m-terphenyl-amine



[229] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), N-phenyl-N-m-terphenyl amine(16.1g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 16.4g (수율 : 69%)의 생성물을 얻었다

[230] 4-bromo-N-(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)-N-phenylaniline

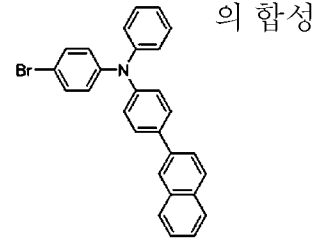


합성

[231] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), 4-(naphthalen-1-yl)-N-phenylaniline (14.8g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 15.1g (수율 : 67%)의

생성물을 얻었다

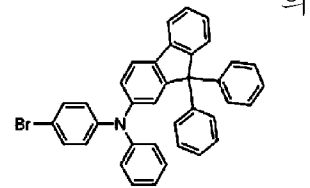
[232] 4-Bromo-N-(4-(naphthalen-2-yl)phenyl)-N-phenylaniline



[233] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), 4-(naphthalen-2-yl)-N-phenylaniline (14.8g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 14.9g (수율 : 66%)의 생성물을 얻었다

[234]

[235] N-(4-bromophenyl)-N,9,9-triphenyl-9H-fluoren-2-amine

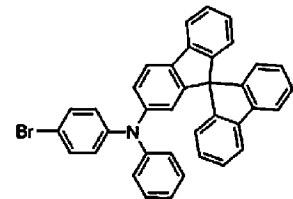


합성

[236] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), N,9,9-triphenyl-9H-fluoren-2-amine (20.5g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 20g (수율 : 71%)의 생성물을 얻었다

[237]

[238] N-(4-bromophenyl)-N-phenyl-9,9'-spirobi[fluoren]-2-amine

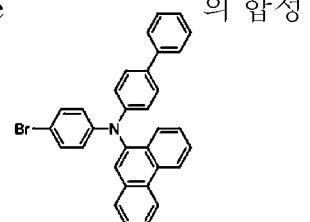


의 합성

[239] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), N-phenyl-9,9'-spirobi[fluoren]-2-amine (20.4g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 19.7g (수율 : 70%)의 생성물을 얻었다

[240]

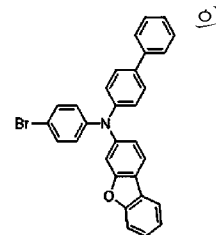
[241] N-(biphenyl-4-yl)-N-(4-bromophenyl)phenanthren-9-amine



[242] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), N-(biphenyl-4-yl)phenanthren-9-amine (17.3g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 17.8g (수율 : 71%)의 생성물을 얻었다

[243]

[244] N-(biphenyl-4-yl)-N-(4-bromophenyl)dibenzo[b,d]furan-3-amine

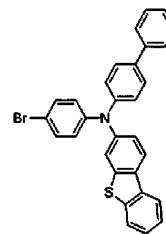


합성

[245] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), N-(biphenyl-4-yl)dibenzo[b,d]furan-3-amine (16.8g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 17.9g (수율 : 73%)의 생성물을 얻었다

[246]

[247] N-(biphenyl-4-yl)-N-(4-bromophenyl)dibenzo[b,d]thiophen-3-amine

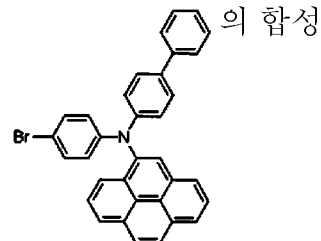


의 합성

[248] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), N-(biphenyl-4-yl)dibenzo[b,d]thiophen-3-amine (17.6g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 17.5g (수율 : 69%)의 생성물을 얻었다

[249]

[250] N-(biphenyl-4-yl)-N-(4-bromophenyl)pyren-4-amine

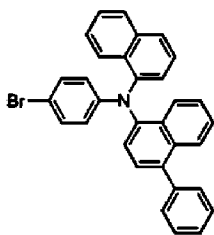


[251] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol), N-(biphenyl-4-yl)pyren-4-amine (18.5g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을 상기 2-1의 합성법을 사용하여 19.1g (수율 : 73%)의 생성물을 얻었다

[252]

[253] N-(4-bromophenyl)-N-(naphthalen-1-yl)-4-phenylnaphthalen-1-amine

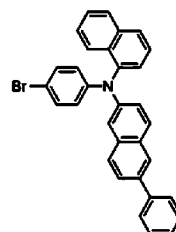
의 합성



[254] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol),
N-(naphthalen-1-yl)-4-phenylnaphthalen-1-amine (17.3g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을
상기 2-1의 합성법을 사용하여 18.5g (수율 : 74%)의 생성물을 얻었다

[255]

[256] N-(4-bromophenyl)-N-(6-phenylnaphthalen-2-yl)naphthalen-1-amine



의 합성

[257] 1,4-dibromobenzene (11.8 g, 50 mmol),
N-(6-phenylnaphthalen-2-yl)naphthalen-1-amine (17.3g, 50 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.3g, 2.5 mmol), PPh₃ (1.31 g, 5 mmol), NaOt-Bu (14.42 g, 150 mmol), toluene (525 mL)을
상기 2-1의 합성법을 사용하여 17.8g (수율 : 71%)의

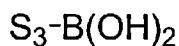
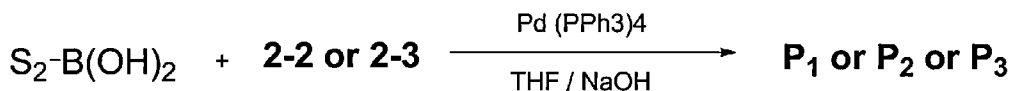
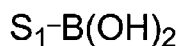
[258] 생성물을 얻었다

[259]

[260] 최종화합물 합성

[261] [반응식 9]

[262]



[263] 둥근바닥플라스크에 3a-B(OH)₂, 또는 4a-B(OH)₂ 또는 5a-B(OH)₂ 의 화합물 (1당량), 2-1화합물 또는 2-3의 화합물 (1.1당량), Pd(PPh₃)₄ (0.03~0.05당량), NaOH (3당량), THF (3 mL / 1 mmol), 물 (1.5 mL / 1mmol)을 넣는다.

[264] 그런 후에 80°C~90°C 상태에서 가열 환류 시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시킨다. 그런 후에 메틸렌클로라이드와 물로 추출하고 유기층을 MgSO₄로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및

재결정하여 생성물을 얻었으며 아래표와 같이 FD-MS로 생성물을 확인하였다.

[265] [표 2]

[266]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
3-1	m/z=478.25 (C ₃₆ H ₂₂ D ₅ N=478.64)	3-2	m/z=478.25(C ₃₆ H ₂₂ D ₅ N=478.64)
3-3	m/z=645.32 (C ₄₆ H ₃₁ D ₅ N ₂ =645.84)	3-4	m/z=673.35(C ₅₀ H ₃₅ D ₅ N ₂ =673.90)
3-5	m/z=528.26 (C ₄₀ H ₂₄ D ₅ N=528.70)	3-6	m/z=578.28 (C ₄₄ H ₂₆ D ₅ N=578.75)
3-7	m/z=528.26 (C ₄₀ H ₂₄ D ₅ N=528.70)	3-8	m/z=578.28 (C ₄₄ H ₂₆ D ₅ N=578.75)
3-9	m/z=508.26 (C ₃₇ H ₂₄ D ₅ NO=508.66)	3-10	m/z=546.25 (C ₄₀ H ₂₅ D ₅ NF=546.69)
3-11	m/z=554.28 (C ₄₂ H ₂₆ D ₅ N=554.73)	3-12	m/z=604.29 (C ₄₆ H ₂₈ D ₅ N=604.79)
3-13	m/z=630.31 (C ₄₈ H ₃₀ D ₅ N=630.83)	3-14	m/z=670.34 (C ₅₁ H ₃₄ D ₅ N=670.89)
3-15	m/z=710.37 (C ₅₄ H ₃₈ D ₅ N=710.96)	3-16	m/z=644.32 (C ₄₉ H ₃₂ D ₅ N=644.86)
3-17	m/z=630.31 (C ₄₈ H ₃₀ D ₅ N=630.83)	3-18	m/z=782.37 (C ₆₀ H ₃₈ D ₅ N=783.02)
3-19	m/z=604.29 (C ₄₆ H ₂₈ D ₅ N=604.79)	3-20	m/z=604.29 (C ₄₆ H ₂₈ D ₅ N=604.79)
3-21	m/z=718.34 (C ₅₅ H ₃₄ D ₅ N=718.94)	3-22	m/z=716.32 (C ₅₅ H ₃₂ D ₅ N=716.92)
3-23	m/z=654.31 (C ₅₀ H ₃₀ D ₅ N=654.85)	3-24	m/z=644.29 (C ₄₈ H ₂₈ D ₅ NO=644.81)
3-25	m/z=660.26 (C ₄₈ H ₂₈ D ₅ NS=660.88)	3-26	m/z=678.31 (C ₅₂ H ₃₀ D ₅ N=678.87)
3-27	m/z=654.31 (C ₅₀ H ₃₀ D ₅ N=654.85)	3-28	m/z=654.31 (C ₅₂ H ₃₀ D ₅ N=654.85)
4-1	m/z=528.26 (C ₄₀ H ₂₄ D ₅ N=528.70)	4-2	m/z=528.26 (C ₄₀ H ₂₄ D ₅ N=528.70)
4-3	m/z=528.26 (C ₄₀ H ₂₄ D ₅ N=528.70)	4-4	m/z=556.29 (C ₄₂ H ₂₈ D ₅ N=556.75)
4-5	m/z=578.28 (C ₄₄ H ₂₆ D ₅ N=578.75)	4-6	m/z=628.29 (C ₄₈ H ₂₈ D ₅ N=628.81)
4-7	m/z=578.28 (C ₄₄ H ₂₆ D ₅ N=578.75)	4-8	m/z=628.29 (C ₄₈ H ₂₈ D ₅ N=628.81)
4-9	m/z=558.27 (C ₄₁ H ₂₆ D ₅ NO=558.72)	4-10	m/z=596.27 (C ₄₄ H ₂₅ D ₅ NF=596.74)
4-11	m/z=604.29 (C ₄₆ H ₂₈ D ₅ N=604.79)	4-12	m/z=654.31 (C ₅₀ H ₃₀ D ₅ N=654.85)
4-13	m/z=680.32 (C ₅₂ H ₃₂ D ₅ N=680.89)	4-14	m/z=720.36 (C ₅₅ H ₃₆ D ₅ N=720.95)
4-15	m/z=760.39 (C ₅₈ H ₄₀ D ₅ N=761.02)	4-16	m/z=694.34 (C ₅₃ H ₃₄ D ₅ N=694.91)
4-17	m/z=680.32 (C ₅₂ H ₃₂ D ₅ N=680.89)	4-18	m/z=832.39 (C ₆₄ H ₄₀ D ₅ N=833.08)
4-19	m/z=654.31 (C ₅₀ H ₃₀ D ₅ N=654.85)	4-20	m/z=654.31 (C ₅₀ H ₃₀ D ₅ N=654.85)
4-21	m/z=768.36 (C ₅₉ H ₃₆ D ₅ N=768.99)	4-22	m/z=766.34 (C ₅₉ H ₃₄ D ₅ N=766.98)
4-23	m/z=704.32 (C ₅₄ H ₃₂ D ₅ N=704.91)	4-24	m/z=694.30 (C ₅₂ H ₃₀ D ₅ NO=694.87)
4-25	m/z=710.28 (C ₅₂ H ₃₀ D ₅ NS=710.94)	4-26	m/z=728.32 (C ₅₆ H ₃₂ D ₅ N=728.93)
4-27	m/z=704.32 (C ₅₄ H ₃₂ D ₅ NS=704.91)	4-28	m/z=704.32 (C ₅₄ H ₃₂ D ₅ N=704.91)
4-29	m/z=528.26 (C ₄₀ H ₂₄ D ₅ N=528.70)	4-30	m/z=528.26 (C ₄₀ H ₂₄ D ₅ N=528.70)
4-31	m/z=542.28 (C ₄₁ H ₂₆ D ₅ N=542.72)	4-32	m/z=556.29 (C ₄₂ H ₂₈ D ₅ N=556.75)
4-33	m/z=578.28 (C ₄₄ H ₂₆ D ₅ N=578.75)	4-34	m/z=628.29 (C ₄₈ H ₂₈ D ₅ N=628.81)
4-35	m/z=578.28 (C ₄₄ H ₂₆ D ₅ N=578.75)	4-36	m/z=628.29 (C ₄₈ H ₂₈ D ₅ N=628.81)
4-37	m/z=558.27 (C ₄₁ H ₂₆ D ₅ NO=558.72)	4-38	m/z=596.27 (C ₄₄ H ₂₅ D ₅ NF=596.74)
4-39	m/z=604.29 (C ₄₆ H ₂₈ D ₅ N=604.79)	4-40	m/z=654.31 (C ₅₀ H ₃₀ D ₅ N=654.85)
4-41	m/z=680.32 (C ₅₂ H ₃₂ D ₅ N=680.89)	4-42	m/z=720.36 (C ₅₅ H ₃₆ D ₅ N=720.95)
4-43	m/z=760.39 (C ₅₈ H ₄₀ D ₅ N=761.02)	4-44	m/z=694.34 (C ₅₃ H ₃₄ D ₅ N=694.91)

[267]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
4-45	m/z=680.32 (C ₅₂ H ₃₂ D ₅ N=680.89)	4-46	m/z=832.39 (C ₆₄ H ₄₀ D ₅ N=833.08)
4-47	m/z=654.31 (C ₅₀ H ₃₀ D ₅ N=654.85)	4-48	m/z=654.31 (C ₅₀ H ₃₀ D ₅ N=654.85)
4-49	m/z=768.36 (C ₅₉ H ₃₆ D ₅ N=768.99)	4-50	m/z=766.34 (C ₅₉ H ₃₄ D ₅ N=766.98)
4-51	m/z=704.32 (C ₅₄ H ₃₂ D ₅ N=704.91)	4-52	m/z=694.30 (C ₅₂ H ₃₀ D ₅ NO=694.87)
4-53	m/z=710.28 (C ₅₂ H ₃₀ D ₅ NS=710.94)	4-54	m/z=728.32 (C ₅₆ H ₃₂ D ₅ N=728.93)
4-55	m/z=704.32 (C ₅₄ H ₃₂ D ₅ NS=704.91)	4-56	m/z=704.32 (C ₅₄ H ₃₂ D ₅ N=704.91)
5-1	m/z=479.24 (C ₃₅ H ₂₁ D ₅ N ₂ =479.63)	5-2	m/z=479.24 (C ₃₅ H ₂₁ D ₅ N ₂ =479.63)
5-3	m/z=646.31 (C ₄₇ H ₃₀ D ₅ N ₃ =646.83)	5-4	m/z=674.35 (C ₄₉ H ₃₄ D ₅ N ₃ =674.88)
5-5	m/z=529.26 (C ₃₉ H ₂₃ D ₅ N ₂ =529.68)	5-6	m/z=579.27 (C ₄₃ H ₂₅ D ₅ N ₂ =579.74)
5-7	m/z=529.26 (C ₃₉ H ₂₃ D ₅ N ₂ =529.68)	5-8	m/z=579.27 (C ₄₃ H ₂₅ D ₅ N ₂ =579.74)
5-9	m/z=478.23 (C ₃₅ H ₂₀ D ₅ N ₂ =478.62)	5-10	m/z=547.25 (C ₃₉ H ₂₂ D ₅ N ₂ F=547.67)
5-11	m/z=555.27 (C ₄₁ H ₂₅ D ₅ N ₂ =555.72)	5-12	m/z=605.29 (C ₄₅ H ₂₇ D ₅ N ₂ =605.78)
5-13	m/z=631.30 (C ₄₇ H ₂₉ D ₅ N ₂ =631.82)	5-14	m/z=671.33 (C ₅₀ H ₃₃ D ₅ N ₂ =671.88)
5-15	m/z=711.37 (C ₅₃ H ₃₇ D ₅ N ₂ =711.94)	5-16	m/z=645.32 (C ₄₈ H ₃₁ D ₅ N ₂ =645.84)
5-17	m/z=631.30 (C ₄₇ H ₂₉ D ₅ N ₂ =631.82)	5-18	m/z=783.37 (C ₅₉ H ₃₇ D ₅ N ₂ =784.01)
5-19	m/z=605.29 (C ₄₅ H ₂₇ D ₅ N ₂ =605.78)	5-20	m/z=605.29 (C ₄₅ H ₂₇ D ₅ N ₂ =605.78)
5-21	m/z=719.33 (C ₅₄ H ₃₃ D ₅ N ₂ =719.92)	5-22	m/z=717.32 (C ₅₄ H ₃₁ D ₅ N ₂ =717.91)
5-23	m/z=655.30 (C ₄₉ H ₂₉ D ₅ N ₂ =655.84)	5-24	m/z=645.28 (C ₄₇ H ₂₇ D ₅ N ₂ O=645.80)
5-25	m/z=661.26 (C ₄₇ H ₂₇ D ₅ N ₂ S=661.87)	5-26	m/z=679.30 (C ₅₁ H ₂₉ D ₅ N ₂ =679.86)
5-27	m/z=655.30 (C ₄₉ H ₂₉ D ₅ N ₂ =655.84)	5-28	m/z=655.30 (C ₄₉ H ₂₉ D ₅ N ₂ =655.84)
6-1	m/z=578.28 (C ₄₄ H ₂₆ D ₅ N=578.75)	6-2	m/z=578.28 (C ₄₄ H ₂₆ D ₅ N=578.75)
6-3	m/z=745.35 (C ₅₆ H ₃₅ D ₅ N ₂ =745.96)	6-4	m/z=745.35 (C ₅₆ H ₃₅ D ₅ N ₂ =745.96)
6-5	m/z=628.29 (C ₄₈ H ₂₈ D ₅ N=628.81)	6-6	m/z=678.31 (C ₅₂ H ₃₀ D ₅ N=678.87)
6-7	m/z=628.29 (C ₄₈ H ₂₈ D ₅ N=628.81)	6-8	m/z=678.31 (C ₅₂ H ₃₀ D ₅ N=678.87)
6-9	m/z=608.29 (C ₄₅ H ₂₈ D ₅ NO=608.78)	6-10	m/z=646.28 (C ₄₈ H ₂₇ D ₅ NF=646.80)
6-11	m/z=654.31 (C ₅₀ H ₃₀ D ₅ N=654.85)	6-12	m/z=704.32 (C ₅₄ H ₃₂ D ₅ N=704.91)
6-13	m/z=730.34 (C ₅₆ H ₃₄ D ₅ N=730.95)	6-14	m/z=770.37 (C ₅₉ H ₃₈ D ₅ N=771.01)
6-15	m/z=810.40 (C ₆₂ H ₄₂ D ₅ N=811.07)	6-16	m/z=744.36 (C ₅₇ H ₃₆ D ₅ N=744.97)
6-17	m/z=730.34 (C ₅₆ H ₃₄ D ₅ N=730.95)	6-18	m/z=882.40 (C ₆₈ H ₄₂ D ₅ N=883.14)
6-19	m/z=704.32 (C ₅₄ H ₃₂ D ₅ N=704.91)	6-20	m/z=704.32 (C ₅₄ H ₃₂ D ₅ N=704.91)
6-21	m/z=818.37 (C ₆₃ H ₃₈ D ₅ N=819.05)	6-22	m/z=816.36 (C ₆₃ H ₃₆ D ₅ N=817.04)
6-23	m/z=754.34 (C ₅₈ H ₃₄ D ₅ N=754.97)	6-24	m/z=744.32 (C ₅₆ H ₃₂ D ₅ NO=744.93)
6-25	m/z=760.30 (C ₅₆ H ₃₂ D ₅ NS=761.00)	6-26	m/z=778.34 (C ₆₀ H ₃₄ D ₅ N=778.99)
6-27	m/z=654.31 (C ₅₀ H ₃₀ D ₅ N=654.85)	6-28	m/z=754.34 (C ₅₈ H ₃₄ D ₅ N=754.97)

[268]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
7-1	m/z=518.28 (C ₃₉ H ₂₅ D ₅ N=518.70)	7-2	m/z=658.29 (C ₄₈ H ₃₀ D ₅ NSi=658.91)
7-3	m/z=536.23 (C ₃₈ H ₂₄ D ₅ NS=536.74)	7-4	m/z=609.32 (C ₄₅ H ₃₁ D ₅ N ₂ =609.81)
7-5	m/z=692.32 (C ₅₃ H ₃₂ D ₅ N=692.90)	7-6	m/z=740.32 (C ₅₇ H ₃₂ D ₅ N=740.94)
7-7	m/z=558.22 (C ₄₀ H ₂₂ D ₅ NS=558.74)	7-8	m/z=608.23 (C ₄₄ H ₂₄ D ₅ NS=608.80)
7-9	m/z=673.31 (C ₄₉ H ₃₁ D ₅ N ₂ O=673.85)	7-10	m/z=711.31 (C ₅₂ H ₃₀ D ₅ N ₂ F=711.88)
7-11	m/z=584.23 (C ₄₂ H ₂₄ D ₅ NS=584.78)	7-12	m/z=634.25 (C ₄₆ H ₂₆ D ₅ NS=634.84)
7-13	m/z=700.30 (C ₅₁ H ₃₂ D ₅ NS=700.94)	7-14	m/z=795.37 (C ₆₀ H ₃₇ D ₅ N ₂ =796.02)
7-15	m/z=874.43 (C ₆₇ H ₄₅ D ₅ N=875.16)	7-16	m/z=806.37 (C ₆₂ H ₃₈ D ₅ N=807.04)
7-17	m/z=769.35 (C ₅₈ H ₃₅ D ₅ N ₂ =769.98)	7-18	m/z=921.41 (C ₇₀ H ₄₃ D ₅ N ₂ =922.17)
7-19	m/z=743.33 (C ₅₆ H ₃₃ D ₅ N ₂ =743.95)	7-20	m/z=743.33 (C ₅₆ H ₃₃ D ₅ N ₂ =743.95)
7-21	m/z=748.30 (C ₅₅ H ₃₂ D ₅ NS=748.98)	7-22	m/z=756.36 (C ₅₈ H ₃₆ D ₅ N=756.98)
7-23	m/z=743.33 (C ₅₆ H ₃₃ D ₅ N ₂ =743.95)	7-24	m/z=783.33 (C ₅₈ H ₃₃ D ₅ N ₂ O=783.97)
7-25	m/z=700.30 (C ₅₁ H ₃₂ D ₅ NS=700.94)	7-26	m/z=843.37 (C ₆₄ H ₃₇ D ₅ N ₂ =844.06)
7-27	m/z=743.33 (C ₅₆ H ₃₃ D ₅ N ₂ =743.95)	7-28	m/z=684.26 (C ₅₀ H ₂₈ D ₅ NS=684.90)
8-1	m/z=568.29 (C ₄₃ H ₂₈ D ₅ N=568.76)	8-2	m/z=708.30 (C ₅₂ H ₃₂ D ₅ NSi=708.97)
8-3	m/z=586.25 (C ₄₂ H ₂₅ D ₅ NS=586.80)	8-4	m/z=659.33 (C ₄₉ H ₃₃ D ₅ N ₂ =659.87)
8-5	m/z=742.34 (C ₅₇ H ₃₄ D ₅ N=742.96)	8-6	m/z=790.34 (C ₆₁ H ₃₄ D ₅ N=791.00)
8-7	m/z=608.23 (C ₄₄ H ₂₄ D ₅ NS=608.80)	8-8	m/z=658.25 (C ₄₈ H ₂₆ D ₅ NS=658.86)
8-9	m/z=723.33 (C ₅₃ H ₃₂ D ₅ N ₂ O=723.91)	8-10	m/z=761.33 (C ₅₆ H ₃₂ D ₅ N ₂ F=761.94)
8-11	m/z=634.25 (C ₄₆ H ₂₆ D ₅ NS=634.84)	8-12	m/z=684.26 (C ₅₀ H ₂₈ D ₅ NS=684.90)
8-13	m/z=750.31 (C ₅₅ H ₃₄ D ₅ NS=751.00)	8-14	m/z=845.38 (C ₆₄ H ₃₉ D ₅ N ₂ =846.08)
8-15	m/z=924.45 (C ₇₁ H ₄₈ D ₅ N=925.22)	8-16	m/z=856.39 (C ₆₆ H ₄₀ D ₅ N=857.10)
8-17	m/z=819.37 (C ₆₂ H ₃₇ D ₅ N ₂ =820.04)	8-18	m/z=971.43 (C ₇₄ H ₄₅ D ₅ N ₂ =972.23)
8-19	m/z=793.35 (C ₆₀ H ₃₅ D ₅ N ₂ =794.00)	8-20	m/z=793.35 (C ₆₀ H ₃₅ D ₅ N ₂ =794.00)
8-21	m/z=798.31 (C ₅₉ H ₃₄ D ₅ NS=799.04)	8-22	m/z=806.37 (C ₆₂ H ₃₈ D ₅ N=807.04)
8-23	m/z=793.35 (C ₆₀ H ₃₅ D ₅ N ₂ =794.00)	8-24	m/z=833.35 (C ₆₂ H ₃₅ D ₅ N ₂ O=834.02)
8-25	m/z=750.31 (C ₅₅ H ₃₄ D ₅ NS=751.00)	8-26	m/z=893.38 (C ₆₈ H ₃₉ D ₅ N ₂ =894.12)
8-27	m/z=793.35 (C ₆₀ H ₃₅ D ₅ N ₂ =794.00)	8-28	m/z=734.28 (C ₅₄ H ₃₀ D ₅ NS=734.96)
8-29	m/z=568.29 (C ₄₃ H ₂₈ D ₅ N=568.76)	8-30	m/z=708.30 (C ₅₂ H ₃₂ D ₅ NSi=708.97)
8-31	m/z=586.25 (C ₄₂ H ₂₅ D ₅ NS=586.80)	8-32	m/z=659.33 (C ₄₉ H ₃₃ D ₅ N ₂ =659.87)
8-33	m/z=742.34 (C ₅₇ H ₃₄ D ₅ N=742.96)	8-34	m/z=790.34 (C ₆₁ H ₃₄ D ₅ N=791.00)
8-35	m/z=608.23 (C ₄₄ H ₂₄ D ₅ NS=608.80)	8-36	m/z=658.25 (C ₄₈ H ₂₆ D ₅ NS=658.86)
8-37	m/z=723.33 (C ₅₃ H ₃₃ D ₅ N ₂ O=723.91)	8-38	m/z=761.33 (C ₅₆ H ₃₂ D ₅ N ₂ F=761.94)
8-39	m/z=634.25 (C ₄₆ H ₂₆ D ₅ NS=634.84)	8-40	m/z=684.26 (C ₅₀ H ₂₈ D ₅ NS=684.90)
8-41	m/z=750.31 (C ₅₅ H ₃₄ D ₅ NS=751.00)	8-42	m/z=845.38 (C ₆₄ H ₃₉ D ₅ N ₂ =846.08)
8-43	m/z=924.45 (C ₇₁ H ₄₈ D ₅ N=925.22)	8-44	m/z=856.39 (C ₆₆ H ₄₀ D ₅ N=857.10)

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
8-45	m/z=819.37 (C ₆₂ H ₃₇ D ₅ N ₂ =820.04)	8-46	m/z=971.43 (C ₇₄ H ₄₅ D ₅ N ₂ =972.23)
8-47	m/z=793.35 (C ₆₀ H ₃₅ D ₅ N ₂ =794.00)	8-48	m/z=793.35 (C ₆₀ H ₃₅ D ₅ N ₂ =794.00)
8-49	m/z=798.31 (C ₅₉ H ₃₄ D ₅ NS=799.04)	8-50	m/z=806.37 (C ₆₂ H ₃₈ D ₅ N=807.04)
8-51	m/z=793.35 (C ₆₀ H ₃₅ D ₅ N ₂ =794.00)	8-52	m/z=833.35 (C ₆₂ H ₃₅ D ₅ N ₂ O=834.02)
8-53	m/z=750.31 (C ₅₅ H ₃₄ D ₅ NS=751.00)	8-54	m/z=893.38 (C ₆₈ H ₃₉ D ₅ N ₂ =894.12)
8-55	m/z=793.35 (C ₆₀ H ₃₅ D ₅ N ₂ =794.00)	8-56	m/z=734.28 (C ₅₄ H ₃₀ D ₅ NS=734.96)
9-1	m/z=519.27 (C ₃₈ H ₂₅ D ₅ N ₂ =519.69)	9-2	m/z=659.28 (C ₄₇ H ₂₉ D ₅ N ₂ Si=659.90)
9-3	m/z=537.23 (C ₃₇ H ₂₃ D ₅ N ₂ S=537.73)	9-4	m/z=610.31 (C ₄₄ H ₃₀ D ₅ N ₃ =610.80)
9-5	m/z=693.32 (C ₅₂ H ₃₁ D ₅ N ₂ =693.89)	9-6	m/z=741.32 (C ₅₆ H ₃₁ D ₅ N ₂ =741.93)
9-7	m/z=559.21 (C ₃₉ H ₂₁ D ₅ N ₂ S=559.73)	9-8	m/z=609.23 (C ₄₃ H ₂₃ D ₅ N ₂ S=609.79)
9-9	m/z=674.31 (C ₄₈ H ₃₀ D ₅ N ₃ O=674.84)	9-10	m/z=712.31 (C ₅₁ H ₂₉ D ₅ N ₃ F=712.86)
9-11	m/z=585.23 (C ₄₁ H ₂₃ D ₅ N ₂ S=585.77)	9-12	m/z=635.24 (C ₄₅ H ₂₅ D ₅ N ₂ S=635.83)
9-13	m/z=701.29 (C ₅₀ H ₃₁ D ₅ N ₂ S=701.93)	9-14	m/z=796.36 (C ₅₉ H ₃₆ D ₅ N ₃ =797.01)
9-15	m/z=875.43 (C ₆₆ H ₄₅ D ₅ N ₂ =876.15)	9-16	m/z=807.37 (C ₆₁ H ₃₇ D ₅ N ₂ =808.03)
9-17	m/z=770.35 (C ₅₇ H ₃₄ D ₅ N ₃ =770.97)	9-18	m/z=922.41 (C ₆₉ H ₄₂ D ₅ N ₃ =923.16)
9-19	m/z=744.33 (C ₅₅ H ₃₂ D ₅ N ₃ =744.93)	9-20	m/z=744.33 (C ₅₅ H ₃₂ D ₅ N ₃ =744.93)
9-21	m/z=749.29 (C ₅₄ H ₃₁ D ₅ N ₂ S=749.97)	9-22	m/z=757.35 (C ₅₇ H ₃₅ D ₅ N ₂ =757.97)
9-23	m/z=744.33 (C ₅₅ H ₃₂ D ₅ N ₃ =744.93)	9-24	m/z=784.33 (C ₅₇ H ₃₂ D ₅ N ₃ O=784.95)
9-25	m/z=701.29 (C ₅₀ H ₃₁ D ₅ N ₂ S=701.93)	9-26	m/z=844.36 (C ₆₃ H ₃₆ D ₅ N ₃ =845.05)
9-27	m/z=744.33 (C ₅₅ H ₃₂ D ₅ N ₃ =744.93)	9-28	m/z=685.26 (C ₄₉ H ₂₇ D ₅ N ₂ S=685.89)
10-1	m/z=548.23 (C ₃₉ H ₂₄ D ₅ NS=548.75)	10-2	m/z=866.36 (C ₆₂ H ₄₂ D ₅ NSi ₂ =867.25)
10-3	m/z=607.30 (C ₄₅ H ₂₉ D ₅ N ₂ =607.80)	10-4	m/z=597.23 (C ₄₂ H ₂₃ D ₅ N ₂ S=597.78)
10-5	m/z=722.28 (C ₅₃ H ₃₀ D ₅ NS=722.95)	10-6	m/z=780.36 (C ₆₀ H ₃₆ D ₅ N=781.01)
10-7	m/z=738.26 (C ₅₂ H ₃₀ D ₅ NSSi=739.02)	10-8	m/z=847.34 (C ₆₂ H ₃₇ D ₅ N ₂ Si=848.13)
10-9	m/z=713.35 (C ₅₂ H ₃₅ D ₅ N ₂ O=713.92)	10-10	m/z=741.27 (C ₅₂ H ₂₈ D ₅ N ₂ SF=741.93)
10-11	m/z=673.26 (C ₄₈ H ₂₇ D ₅ N ₂ S=673.88)	10-12	m/z=773.29 (C ₅₆ H ₃₁ D ₅ N ₂ S=773.99)
10-13	m/z=839.34 (C ₆₁ H ₃₇ D ₅ N ₂ S=840.10)	10-14	m/z=799.31 (C ₅₈ H ₃₃ D ₅ N ₂ S=800.03)
10-15	m/z=955.40 (C ₇₀ H ₄₅ D ₅ N ₂ S=956.26)	10-16	m/z=777.32 (C ₅₆ H ₃₅ D ₅ N ₂ S=778.03)
10-17	m/z=809.38 (C ₆₁ H ₃₉ D ₅ N ₂ =810.05)	10-18	m/z=951.37 (C ₇₀ H ₄₁ D ₅ N ₂ S=952.22)
10-19	m/z=783.37 (C ₅₉ H ₃₇ D ₅ N ₂ =784.01)	10-20	m/z=857.38 (C ₆₅ H ₃₉ D ₅ N ₂ =858.09)
10-21	m/z=788.33 (C ₅₈ H ₃₆ D ₅ NS=789.05)	10-22	m/z=786.31 (C ₅₈ H ₃₄ D ₅ NS=787.03)
10-23	m/z=983.43 (C ₇₅ H ₄₅ D ₅ N ₂ =984.24)	10-24	m/z=945.38 (C ₇₁ H ₃₉ D ₅ N ₂ O=946.15)
10-25	m/z=789.32 (C ₅₇ H ₃₅ D ₅ N ₂ S=790.04)	10-26	m/z=873.32 (C ₆₄ H ₃₅ D ₅ N ₂ S=874.11)
10-27	m/z=923.37 (C ₆₈ H ₄₁ D ₅ N ₂ Si=924.22)	10-28	m/z=724.30 (C ₅₃ H ₃₂ D ₅ NS=724.96)

[270] 유기전계발광소자의 제조평가

[271] 합성을 통해 얻은 여러 화합물을 각각 발광층의 발광 호스트 물질이나 정공 수송층으로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전계 발광소자를 제작하였다.

[272] 먼저, 유기 기판에 형성된 ITO층(양극)위에 우선 정공주입층으로서 구리프탈로시아닌 (이하 CuPc로 약기함)막을 진공증착하여 10nm 두께로 형성하였다. 이어서 상기 발명화합물들을 발광층의 호스트로 사용시에는 이 막 상에 정공수송층 화합물로서 4,4-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(이하

α -NPD로 약기함)을 30 nm 의 두께로 진공증착하여 정공 수송층을 형성하였다. 이 정공 수송층 상부에 45nm 두께의 BD-052X (Idemitsu사)가 7% 도핑된 발광층[이때 BD-052X는 청색 형광 도펀트이고, 발광 호스트 물질로는 상기 발명화합물 또는 9, 10-다이-(나프탈렌-2-안트라센)=AND]을 사용하였다.

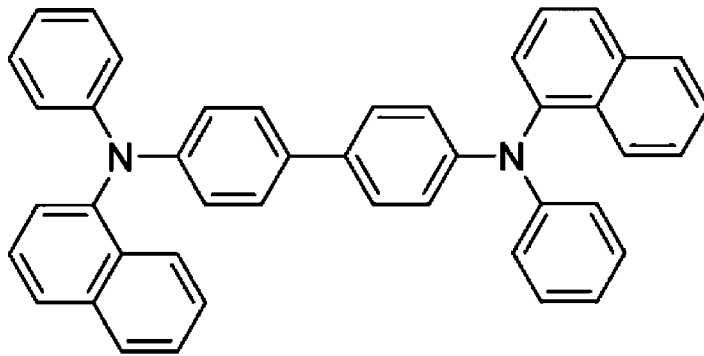
[273] 상기 발명화합물들을 인광 호스트 재료로 사용측정할 시에는 인광재료를 증착하여 발광층을 성막함과 동시에 인광 발광성의 Ir 금속 착체 도펀트로서 트리스(2-페닐피리딘)이리듐 (이하 Ir(ppy)₃로 약기함)을 첨가하였다. 이때 발광층 중에 있어서의 Ir(ppy)₃의 농도는 10중량% 로 하였다. 정공저지층으로 {(1,1'비스페닐)-4-올레이트}비스(2-메틸-8-퀴놀린올레이트)알루미늄 (이하 BALq로 약기함)을 10 nm 의 두께로 진공증착하고, 이어서 전자주입층으로 트리스(8-퀴놀리놀)알루미늄 (이하 Alq3로 약기함)을 40 nm 의 두께로 성막하였다. 이 후, 할로젠화 알킬리 금속인 LiF를 0.2 nm의 두께로 증착하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 이 Al/LiF를 음극으로 사용함으로써 유기전계 발광소자를 제조하였다.

[274] 비교실험에

[275] 본 발명의 화합물들을 형광 호스트, 정공수송층으로 측정했을 경우, 비교를 위해 본 발명의 화합물들 대신에 α -NPD(화학식 12)을 정공수송층으로, AND [9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene, 화학식 13]을 형광 호스트 물질로 사용하여 실험에와 동일한 구조의 유기전계발광 소자를 제작하였다.

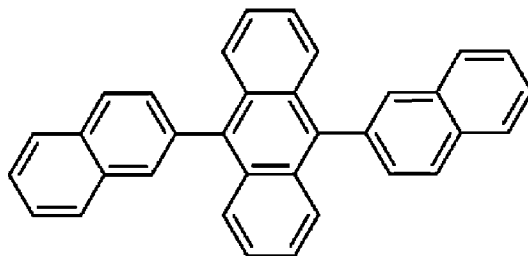
[276] [화학식 12]

[277]



[278] [화학식 13]

[279]



[280] [표 3]

[281]

	발광층 재료	전압 (V)	전류밀도 (mA/cm ²)	발광효율 (cd/A)	색도좌표 (x, y)
실시예 1	4-45	6.53	12.98	7.08	(0.15, 0.14)
실시예 2	3-3	5.84	15.35	8.25	(0.15, 0.14)
실시예 3	4-25	6.42	14.58	6.62	(0.15, 0.15)
실시예 4	3-22	6.37	14.53	7.69	(0.15, 0.14)
실시예 5	7-1	5.71	15.43	8.15	(0.15, 0.14)
실시예 6	7-4	5.66	15.45	8.26	(0.15, 0.15)
실시예 7	7-6	5.52	15.49	8.08	(0.15, 0.15)
실시예 8	5-16	6.25	14.33	6.74	(0.15, 0.14)
실시예 9	3-15	6.32	14.38	7.13	(0.15, 0.14)
비교예 1	ADN	6.69	14.11	6.09	(0.15, 0.15)
	정공수송층 재료	전압 (V)	전류밀도 (mA/cm ²)	발광효율 (cd/A)	색도좌표 (x, y)
실시예 10	8-43	5.0	12.30	8.4	(0.15, 0.15)
실시예 11	7-8	6.2	12.21	9.7	(0.15, 0.14)
실시예 12	7-18	6.1	12.75	9.5	(0.15, 0.12)
실시예 13	7-21	6.0	12.80	9.5	(0.15, 0.14)
실시예 14	10-9	5.8	12.52	9.7	(0.15, 0.12)
실시예 12	9-22	6.0	12.78	9.5	(0.15, 0.14)
실시예 13	7-22	6.1	12.64	9.1	(0.15, 0.14)
실시예 14	10-18	5.8	12.77	8.9	(0.15, 0.14)
실시예 15	8-44	5.9	12.78	8.9	(0.15, 0.14)
실시예 16	8-13	6.1	12.73	9.2	(0.15, 0.13)
비교예 2	NPB	7.2	13.35	7.5	(0.15, 0.15)

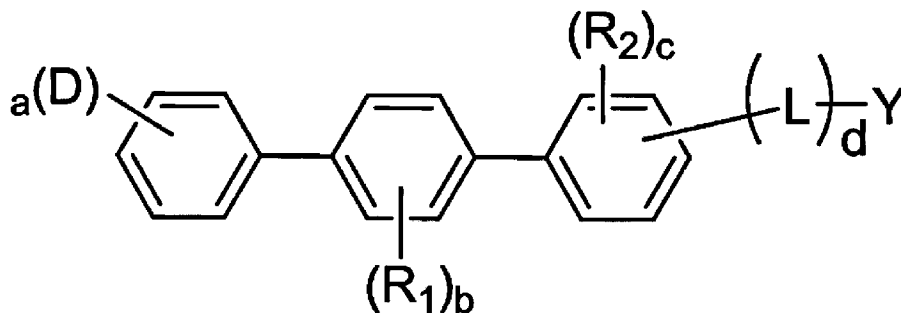
- [282] 상기 표 3의 결과로부터 알 수 있듯이, 전술한 본 발명의 화합물들을 유기전계발광소자용 재료로 이용한 유기전계발광소자는 고효율이면서 색순도가 향상된 청색 발광이 얻어지므로 유기전계발광소자의 발광 호스트, 정공수송재료로 사용되어 낮은 구동전압과 높은 발광효율 및 수명을 현저히 개선시킬 수 있다.
- [283] 본 발명의 화합물들을 유기전계발광소자의 다른 유기물층들, 예를 들어 발광 보조층, 전자주입층, 전자수송층, 및 정공주입층에 사용되더라도 동일한 효과를 얻을 수 있는 것은 자명하다.
- [284] 이상 첨부된 도면을 참조하여 본 발명의 실시예를 설명하였지만, 상술한 본 발명의 기술적 구성은 본 발명이 속하는 기술 분야의 당업자가 본 발명의 그 기술적 사상이나 필수적 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시 예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적인 것이 아닌 것으로서 이해되어야 한다. 아울러, 본 발명의 범위는 상기 상세한 설명보다는 후술하는 특허청구범위에 의하여 나타내어진다. 또한, 특허청구범위의 의미 및 범위 그리고 그 등가 개념으로부터 도출되는 모든 변경 또는 변형된 형태가 본 발명의 범위에 포함되는 것으로 해석되어야 한다.
- [285] **CROSS-REFERENCE TO RELATED APPLICATION**

- [286] 본 특허출원은 2010년 12월 28일 한국에 출원한 특허출원번호 제 10-2010-0136323 호에 대해 미국 특허법 119(a)조 (35 U.S.C § 119(a))에 따라 우선권을 주장하며, 그 모든 내용은 참고문헌으로 본 특허출원에 병합된다. 아울러, 본 특허출원은 미국 이외에 국가에 대해서도 위와 동일한 이유로 우선권을 주장하면 그 모든 내용은 참고문헌으로 본 특허출원에 병합된다.

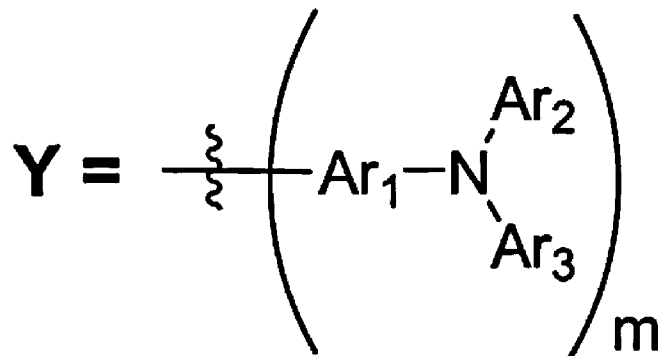
청구범위

[청구항 1]

하기 화학식으로 표시되는 화합물.



이때 상기 D는 중수소를 나타내며 a는 1~5의 정수이며, 상기 R₁~R₂은 서로 같거나 상이하고 각각 서로 독립적으로 수소원자; 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 5~60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 5~60의 헤테로 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~60의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 5~60의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 5~60의 아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 5~60의 알콕시카보닐기, 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 5~60의 아릴기로 치환된 아미노기, 할로젠 원자, 사이아노기, 나이트로기, 하이드록실기 또는 카복실기로 이루어진 그룹에서 선택된 하나 또는 하나 이상이며, 상기 b~c는 1~4의 정수이며, 상기 L은 치환 또는 비치환된 핵 탄소수 5~40의 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5~60의 헤테로 아릴렌기, 및 2가 또는 3가의 치환 또는 비치환된 지방족 탄화 수소로부터 선택되는 기이며, 상기 d는 0~3의 정수이며, 상기 Y는 아래 화학식으로 표시되는 유도체이다.
[화학식 2]



이때 상기 Ar₁~Ar₃은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 핵 원자수 1~60의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 핵 원자수 5~60의 헤테로아릴기이며, 상기 m은 0~2의 정수이다.
제1항에 있어서,

[청구항 2]

상기 Ar₁은 구체적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 비페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 티오펜기, 피롤기, 퓨란기, 피리딜기로 이뤄진 군에서 선택되는 하나 또는 하나 이상이거나

상기 Ar₂ 및 Ar₃는 아래 표의 작용기들로 이루어진 군에서 선택되는 하나 또는 하나 이상인 것을 특징으로 하는 화합물.

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
1			9		
2			10		
3			11		
4			12		
5			13		
6			14		
7			15		
8			16		
9			17		

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
18			27		
19			28		
20			29		
21			30		
22			31		
23			32		
24			33		
25			34		
26			35		

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
36			45		
37			46		
38			47		
39			48		
40			49		
41			50		
42			51		
43			52		
44			53		

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
54			63		
55			64		
56			65		
57			66		
58			67		
59			68		
60			69		
61			70		
62			71		

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
72			81		
73			82		
74			83		
75			84		
76			85		
77			86		
78			87		
79			88		
80			89		

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
90			99		
91			100		
92			101		
93			102		
94			103		
95			104		
96			105		
97			106		
98			107		

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
108			117		
109			118		
110			119		
111			120		
112			121		
113			122		
114			123		
115			124		
116			125		

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
126			135		
127			136		
128			137		
129			138		
130			139		
131			140		
132			141		
133			142		
134			143		

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
144			153		
145			154		
146			155		
147			156		
148			157		
149			158		
150			159		
151			160		
152			161		

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
162			172		
163			173		
164			174		
165			175		
166			176		
167			177		
168			178		
170			179		
171			180		

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
181			190		
182			191		
183			192		
184			193		
185			194		
186			195		
187			196		
188			197		
189			198		

	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
199			208		
200			209		
201			210		
202			211		
203			212		
204			213		
205			214		
206			215		
207			216		

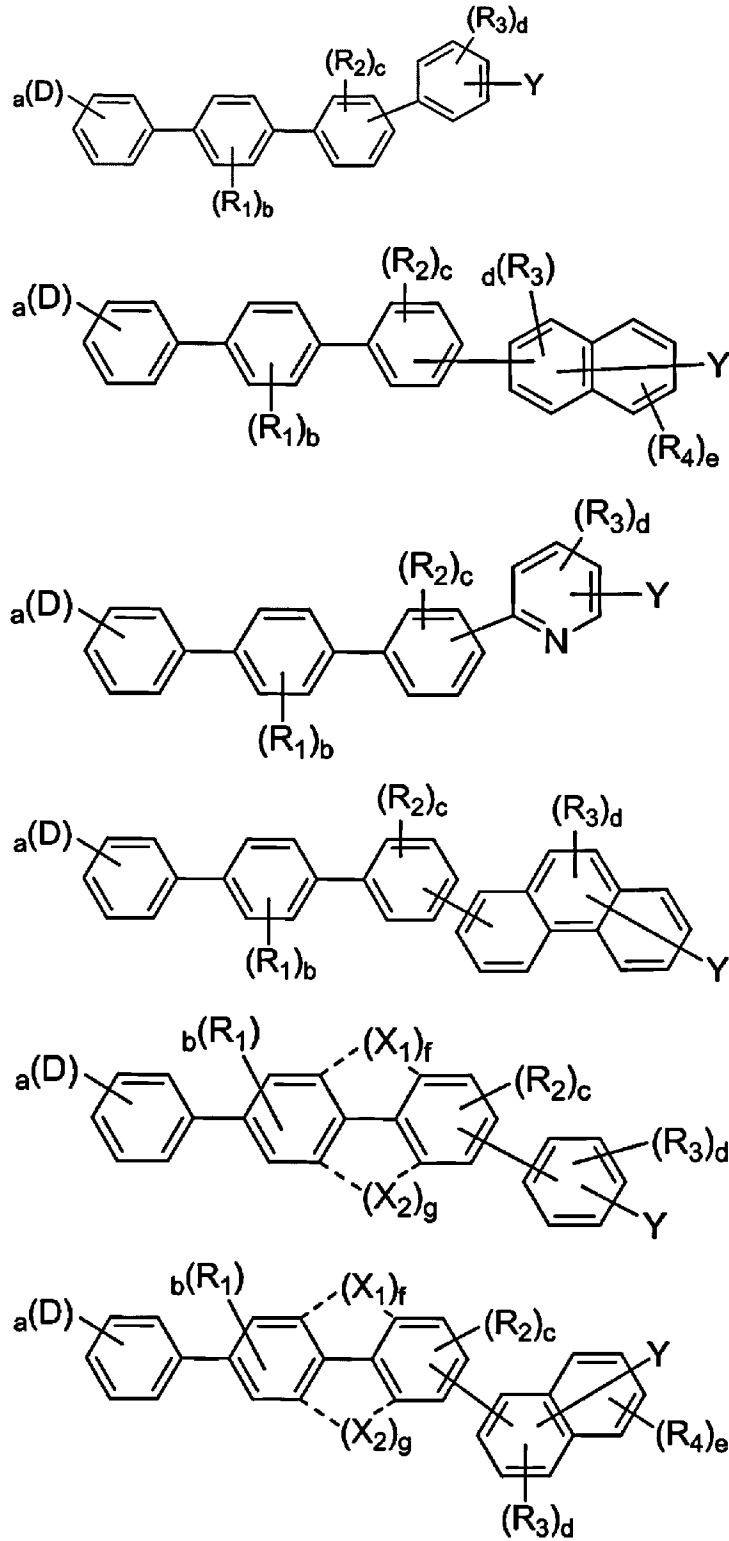
	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
217			227		
218			228		
219			229		
220			230		
221			231		
223			232		
224			233		
225			234		
226			235		

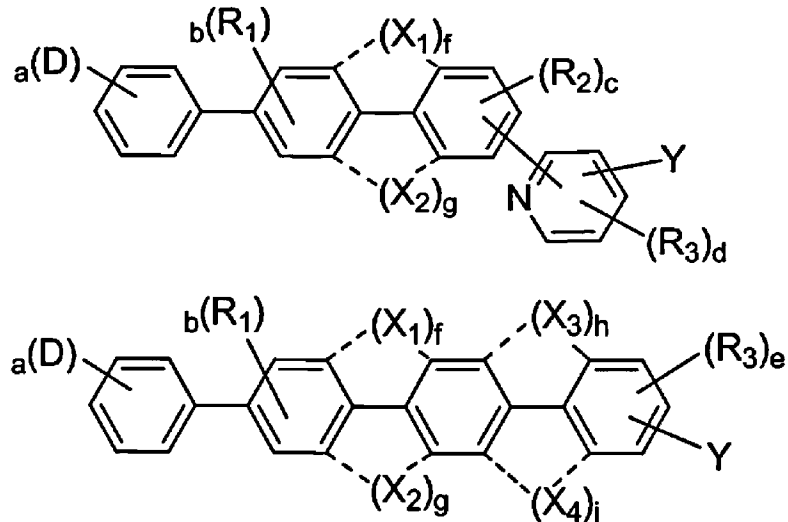
	Ar ₂	Ar ₃		Ar ₂	Ar ₃
236			245		
237			246		
238			247		
239			248		
240			249		
241			250		
242			251		
243			252		
244			253		

	Ar ₂	Ar ₃
254		

[청구항 3]

제1항에 있어서, 상기 화학식으로 표시되는 화합물은 하기 화학식들 중 하나로 표시되는 화합물.





상기 $R_3 \sim R_4$ 는 서로 같거나 상이하고 각각 서로 독립적으로 수소원자, 중수소, 삼중수소; 치환 또는 비치환된 헥탄소수 5~60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 헥탄소수 5~60의 헥테로 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~60의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1~60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 헥탄소수 5~60의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 헥탄소수 5~60의 아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 헥탄소수 5~60의 알콕시카보닐기, 치환 또는 비치환된 헥탄소수 5~60의 아릴기로 치환된 아미노기, 할로겐 원자, 사이아노기, 나이트로기, 하이드록실기 또는 카복실기로 이루어진 군에서 선택된 하나 또는 하나 이상이며, 상기 d-e는 0~4의 정수이며, 상기 X_1 내지 X_4 는 $C(R_1)(R_2)$, $N(R_3)(R_4)$, S, O, Si이며, 상기 f-i는 0~1의 정수이다.

[청구항 4]

제1항에 있어서,

상기 L은 페닐기, 비페닐기, 1-나프탈기, 2-나프틸기, 피리딜기, 스틸벤, 안트라세닐기, 페나트렌기, 파이레닐기로 이뤄진 군에서 선택된 하나 또는 하나 이상인 것을 특징으로 하는 화합물.

[청구항 5]

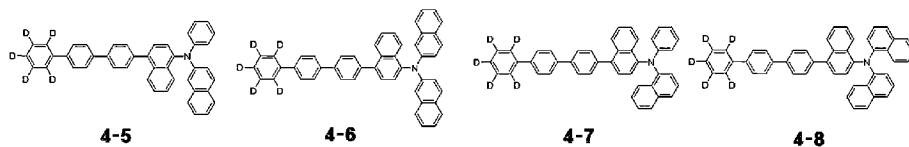
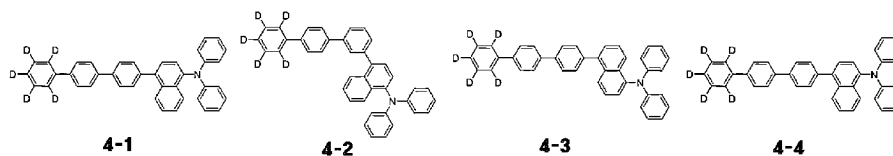
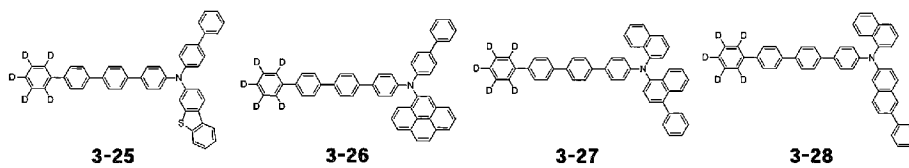
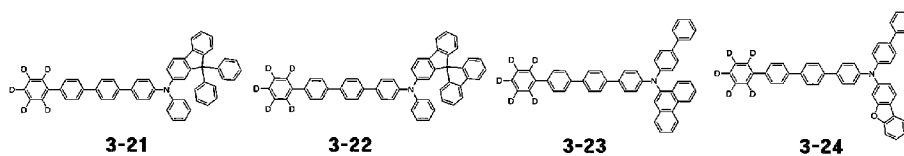
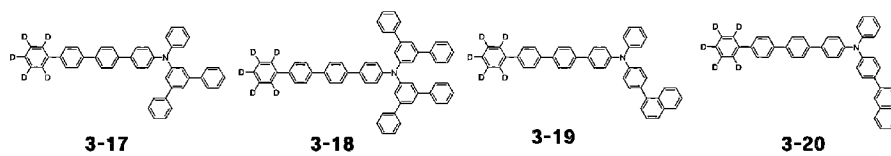
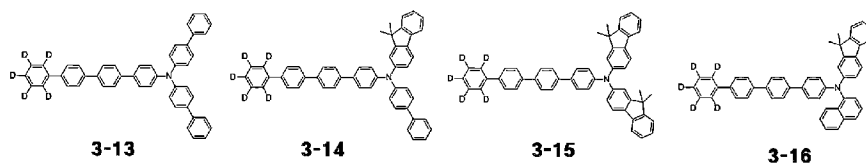
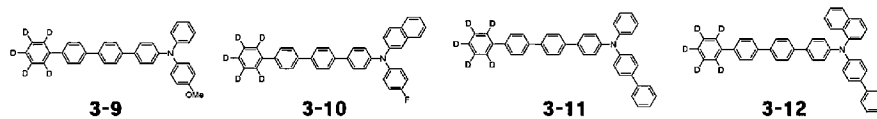
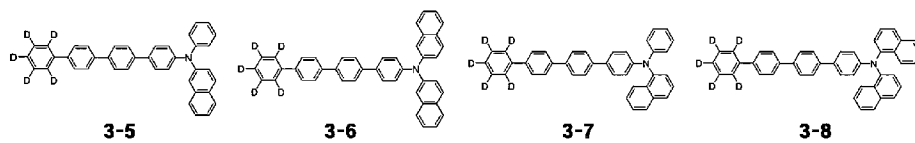
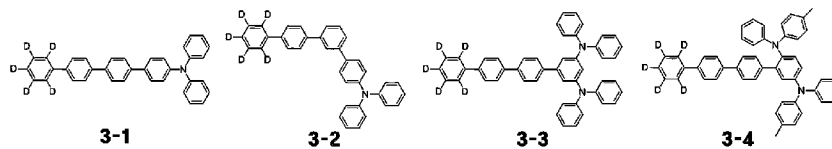
제3항에 있어서,

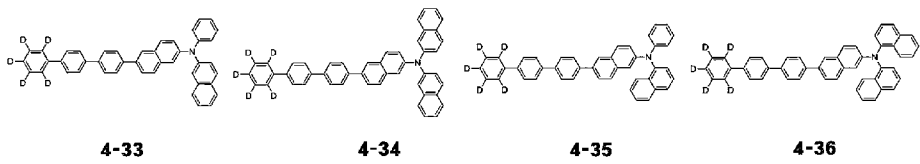
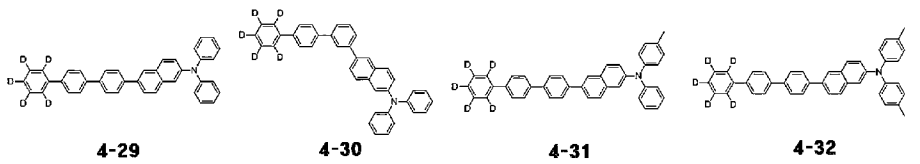
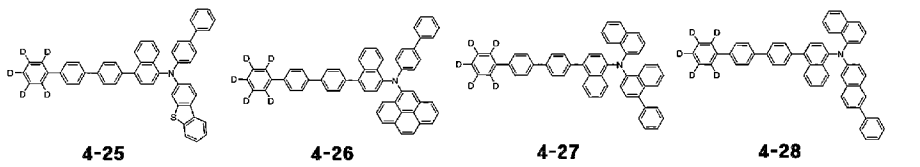
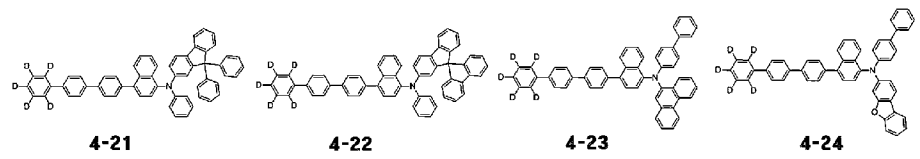
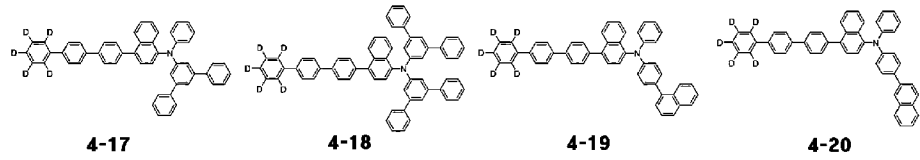
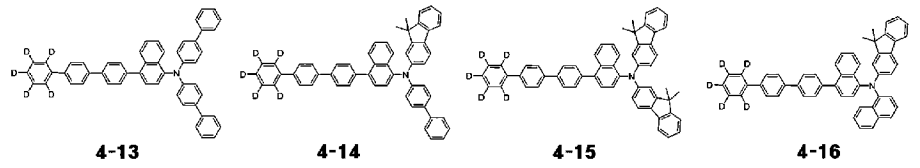
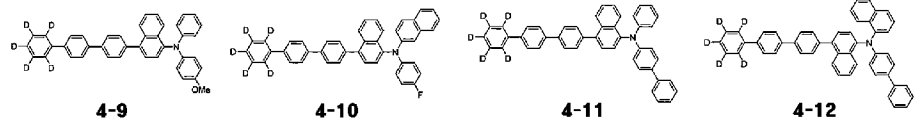
상기 R_1 , R_2 , R_3 및 R_4 는 각각 인접한 기와 결합하여 치환 또는 비치환된 포화 또는 불포화 고리를 형성하는 것을 특징으로 하는 화합물.

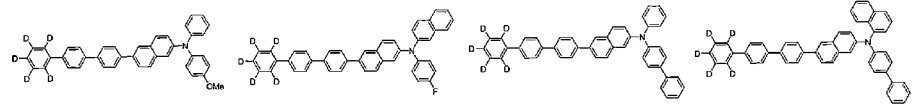
[청구항 6]

제3항에 있어서,

상기 화학식으로 표시되는 화합물은 하기 화학식들 중 하나로 표시되는 화합물.





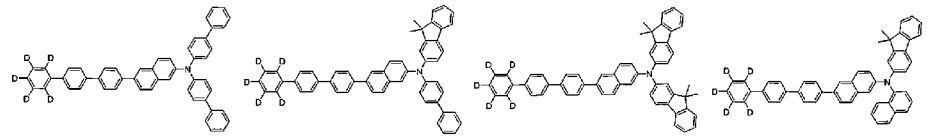


4-37

4-38

4-39

4-40

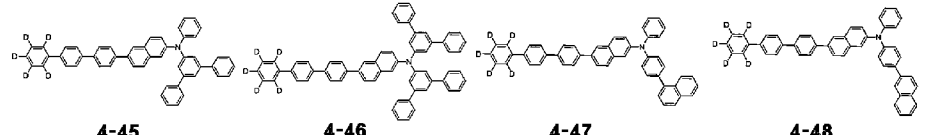


4-41

4-42

4-43

4-44

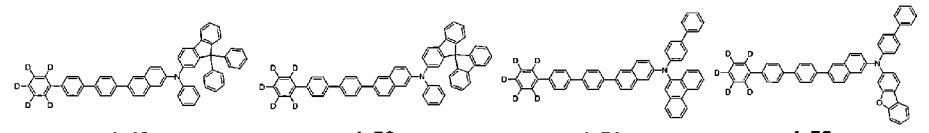


4-45

4-46

4-47

4-48

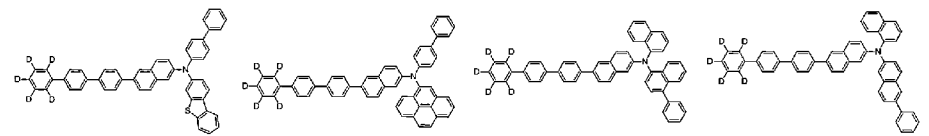


4-49

4-50

4-51

4-52

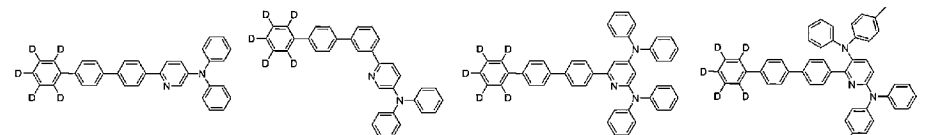


4-53

4-54

4-55

4-56

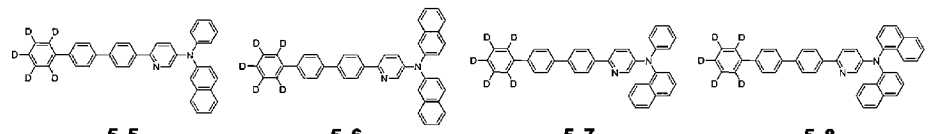


5-1

5-2

5-3

5-4

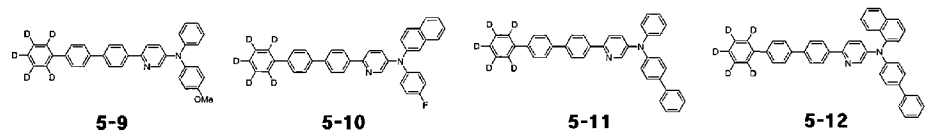


5-5

5-6

5-7

5-8

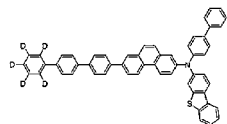


5-9

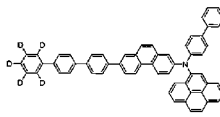
5-10

5-11

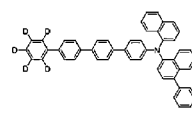
5-12



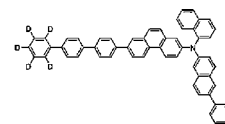
6-25



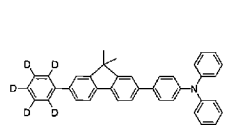
6-26



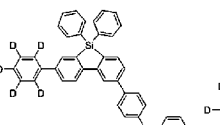
6-27



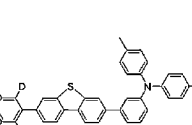
6-28



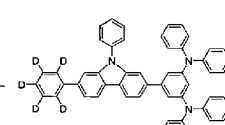
7-1



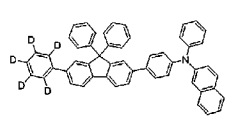
7-2



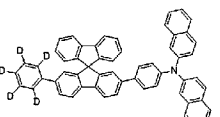
7-3



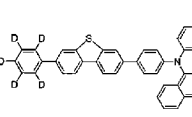
7-4



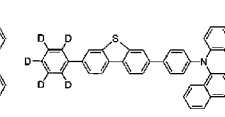
7-5



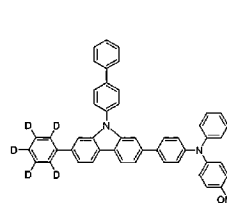
7-6



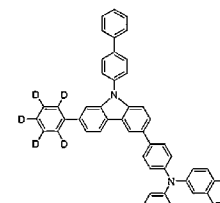
7-7



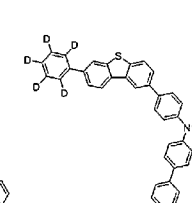
7-8



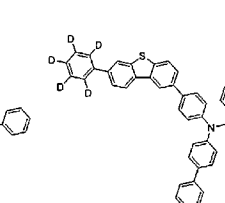
7-9



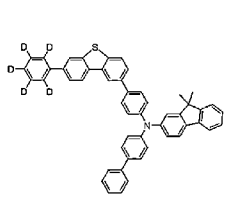
7-10



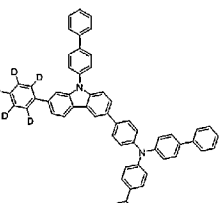
7-11



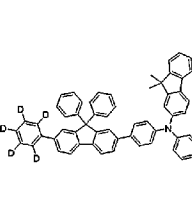
7-12



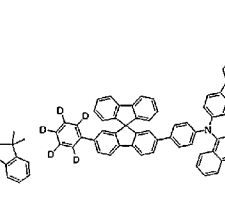
7-13



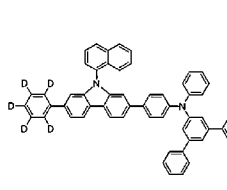
7-14



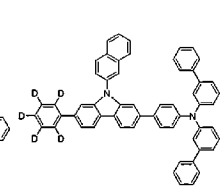
7-15



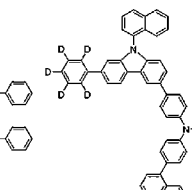
7-16



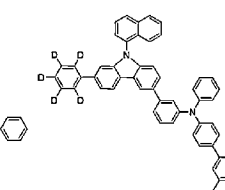
7-17



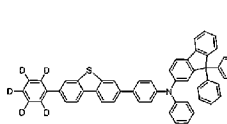
7-18



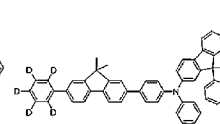
7-19



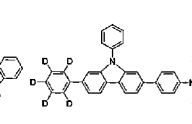
7-20



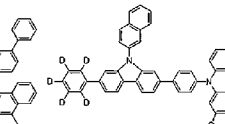
7-21



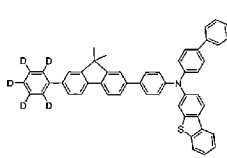
7-22



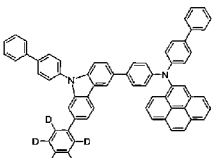
7-23



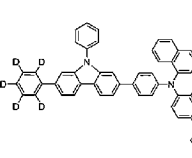
7-24



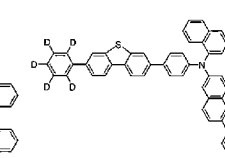
7-25



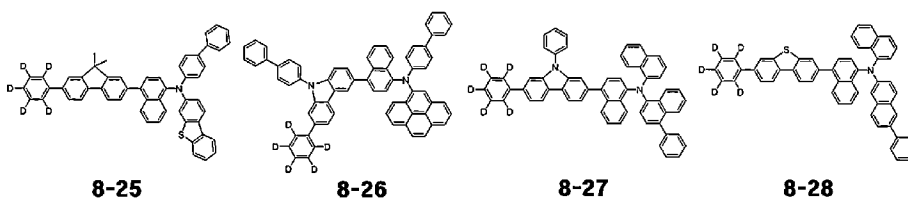
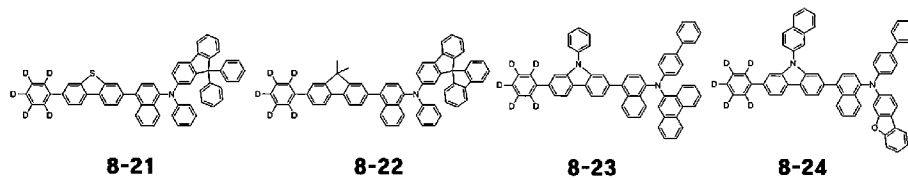
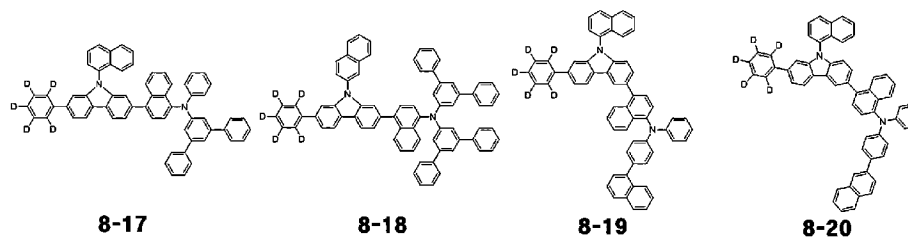
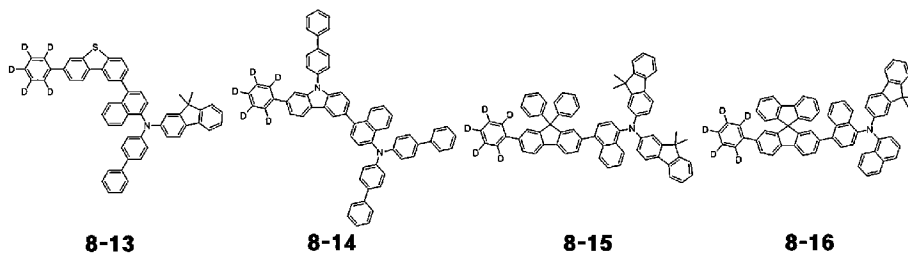
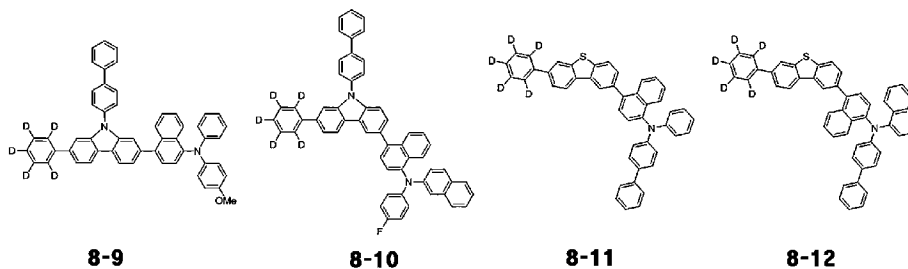
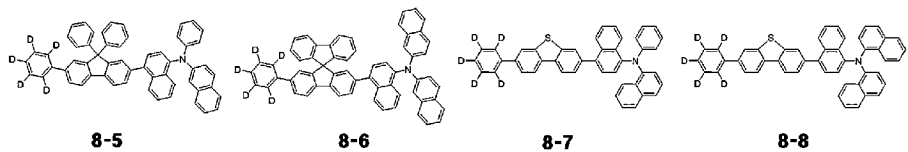
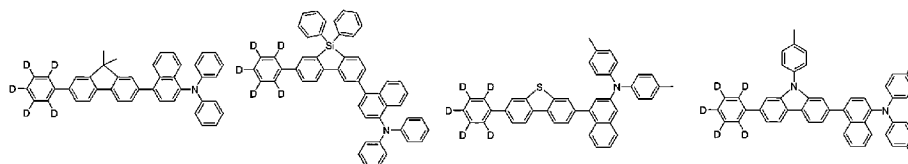
7-26

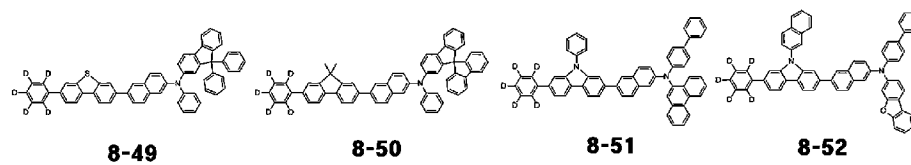
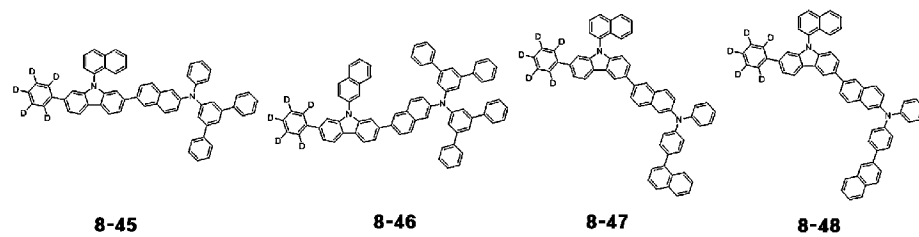
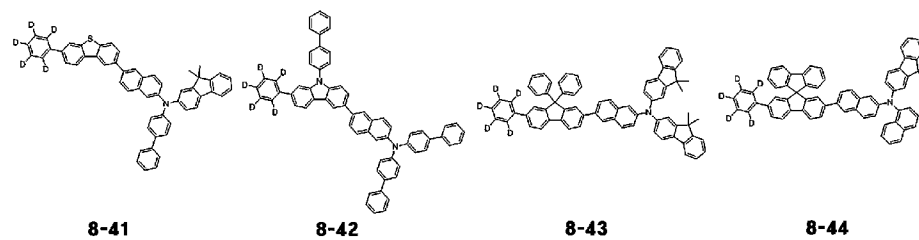
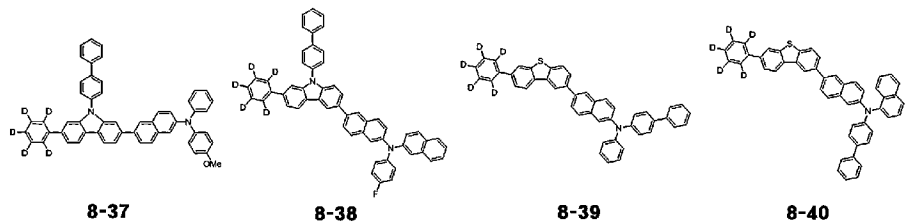
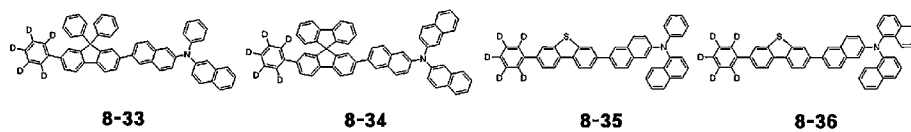
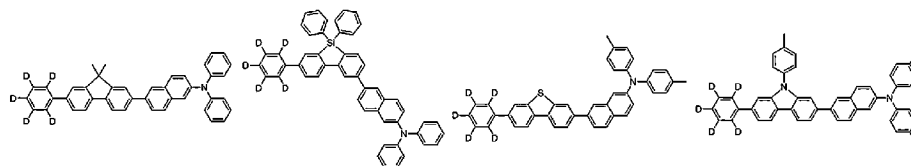


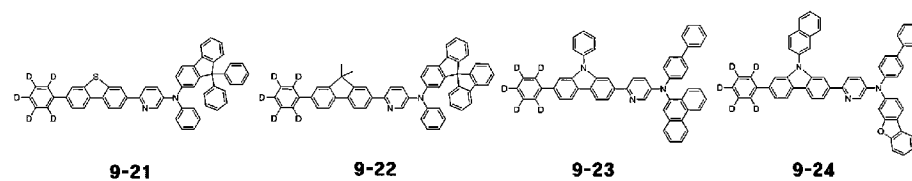
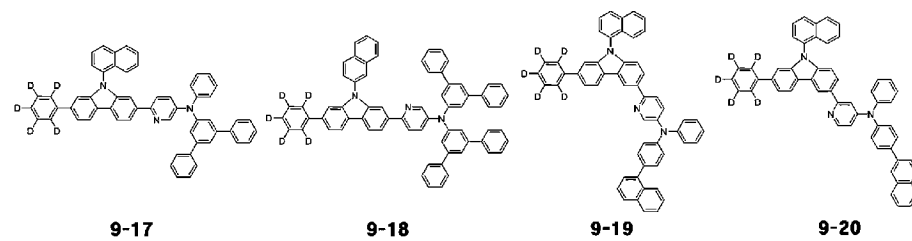
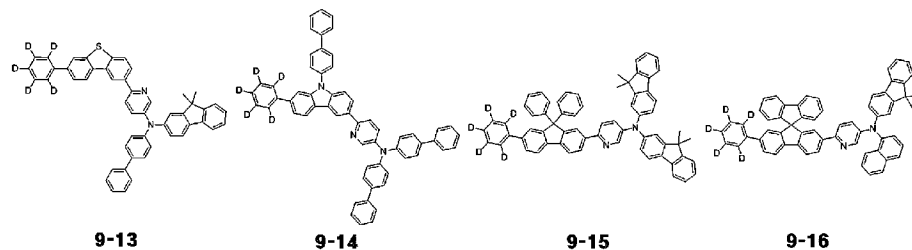
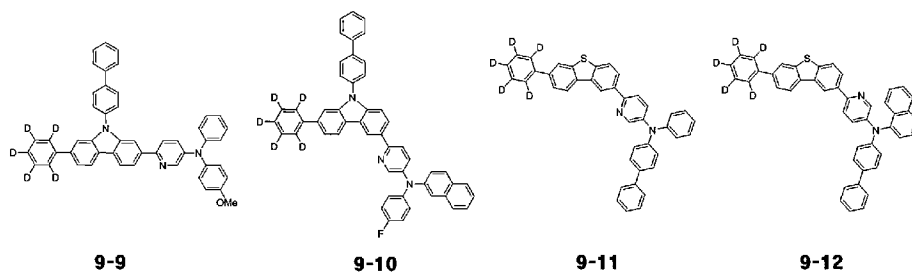
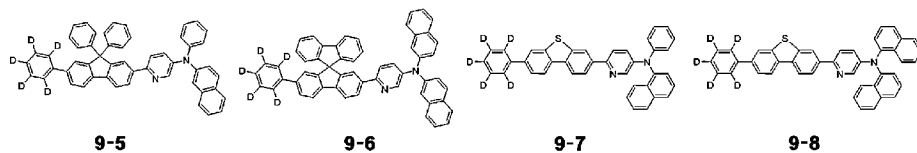
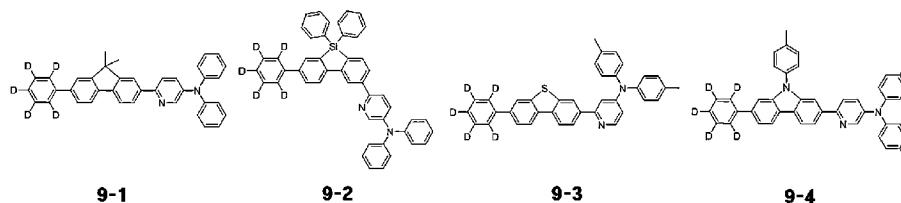
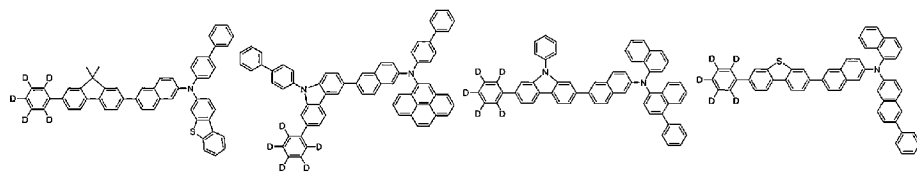
7-27

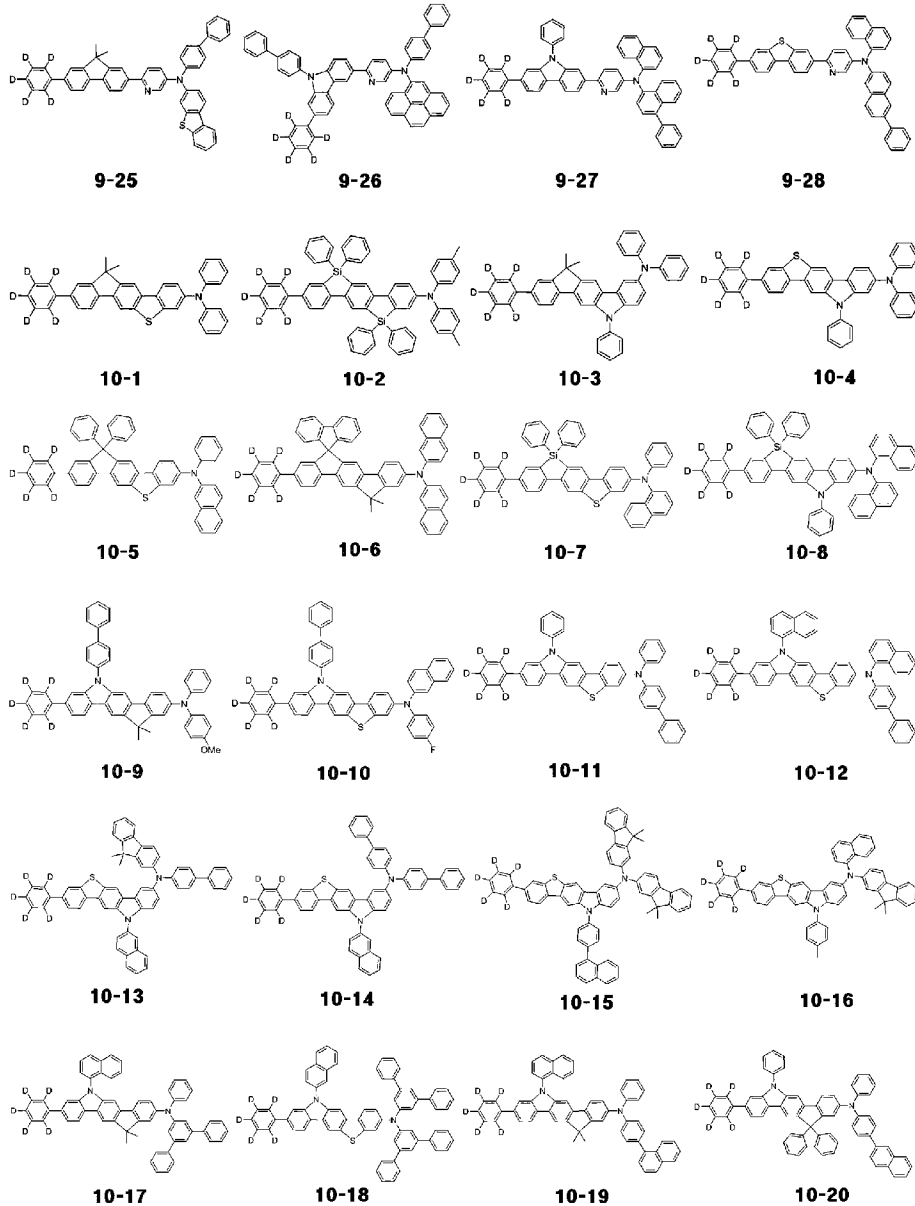


7-28









[청구항 7]

제1항 내지 제6항 중 어느 하나의 화합물을 포함하는 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기전기소자.

[청구항 8]

제7항에 있어서,
상기 화합물을 용액 공정(soluble process)에 의해 상기 유기물층을 형성하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

[청구항 9]

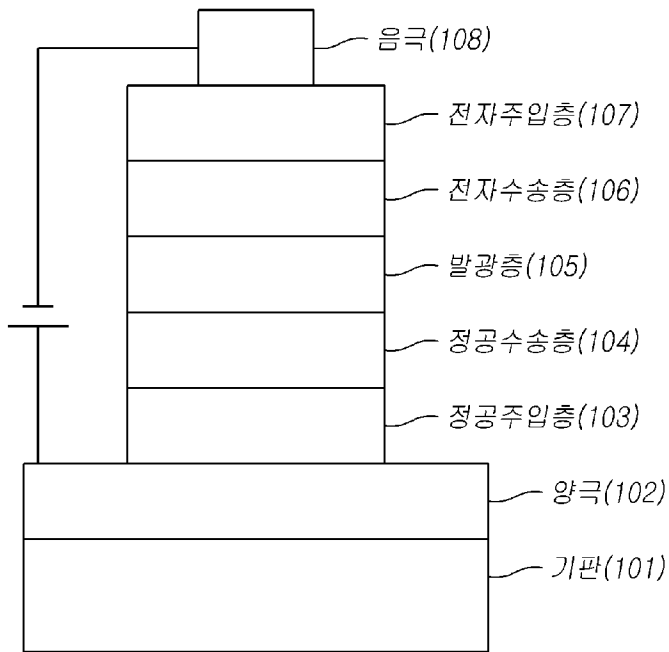
제7항에 있어서,
상기 유기전기소자는 제1 전극, 상기 1층 이상의 유기물층 및 제2 전극을 순차적으로 적층된 형태로 포함하는 유기전계발광소자인 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

[청구항 10]

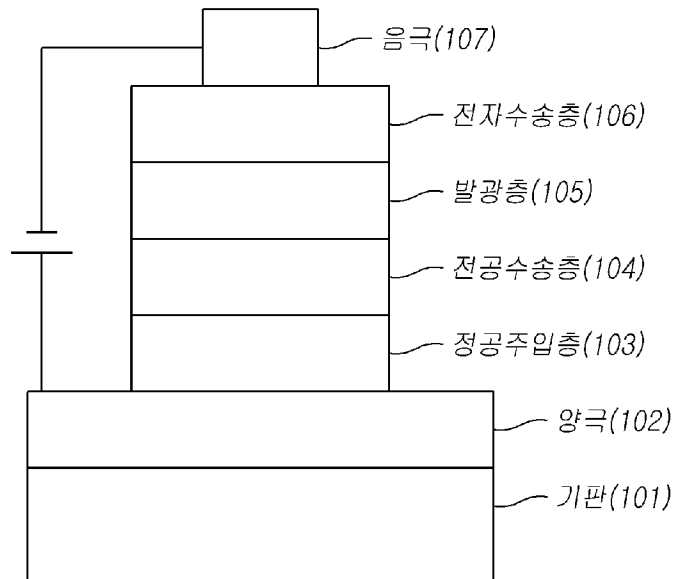
제9항에 있어서,
상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층, 발광층 중 어느 하나인 것을 특징으로 하는

- [청구항 11] 유기전기소자.
제10항에 있어서,
상기 발광층은 상기 화합물을 발광호스트 물질로 포함하거나 상기
정공수송층은 상기 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는
유기전기소자.
- [청구항 12] 제11항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치와;
상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부를 포함하는 전자장치.
- [청구항 13] 제12항에 있어서,
상기 유기전기소자는 유기전계발광소자(OLED), 유기태양전지,
유기감광체(OPC) 드럼, 유기트랜지스트(유기 TFT) 중 하나인
것을 특징으로 하는 전자장치.

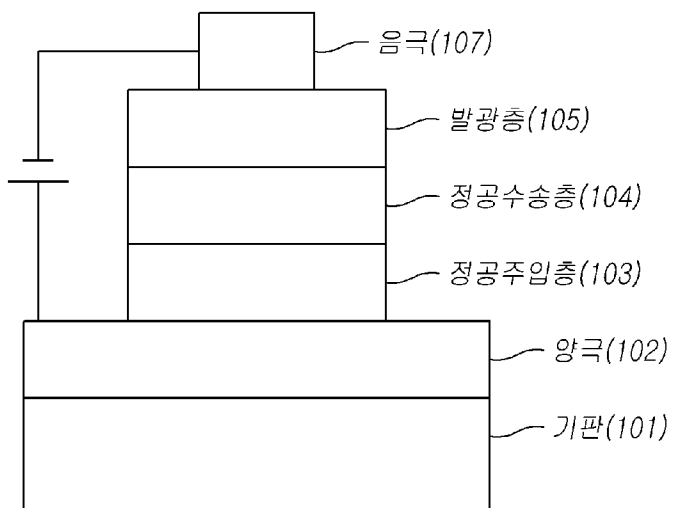
[Fig. 1]



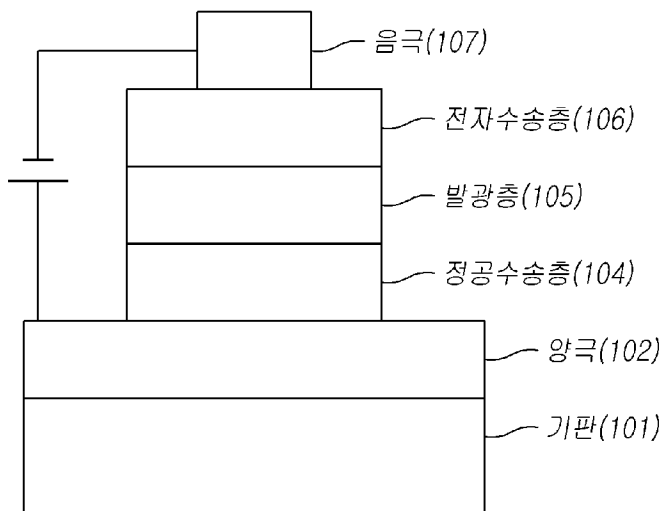
[Fig. 2]



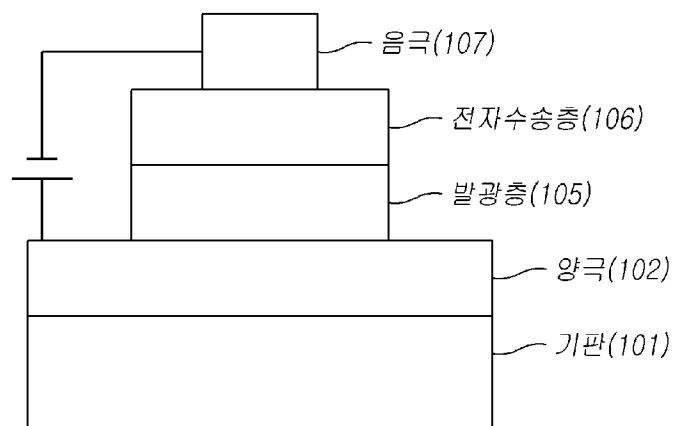
[Fig. 3]



[Fig. 4]



[Fig. 5]



[Fig. 6]

