

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2023년 4월 27일 (27.04.2023)



(10) 국제공개번호
WO 2023/068794 A1

(51) 국제특허분류: C07D 405/12 (2006.01) H10K 99/00 (2023.01) 공개:
C07D 409/12 (2006.01) — 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))

(21) 국제출원번호: PCT/KR2022/015930

(22) 국제출원일: 2022년 10월 19일 (19.10.2022)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:
10-2021-0139665 2021년 10월 19일 (19.10.2021)KR
10-2022-0134405 2022년 10월 18일 (18.10.2022)KR

(71) 출원인: 머티어리얼사이언스 주식회사 (MATERIAL SCIENCE CO.,LTD.) [KR/KR]; 08502 서울특별시 금천구 가산디지털1로 196, 805호, Seoul (KR).

(72) 발명자: 송걸 (SONG, Jie); 08502 서울특별시 금천구 가산디지털1로 196, 805호, Seoul (KR). 이태완 (LEE, Tae Wan); 08502 서울특별시 금천구 가산디지털1로 196, 805호, Seoul (KR). 전하니 (JEON, Hani); 08502 서울특별시 금천구 가산디지털1로 196, 805호, Seoul (KR). 진석근 (JIN, Seok Geun); 08502 서울특별시 금천구 가산디지털1로 196, 805호, Seoul (KR).

(74) 대리인: 원대규 (WON, Dae Gyu); 08505 서울특별시 금천구 디지털로 121, 509, Seoul (KR).

(81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

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

(54) Title: ORGANIC COMPOUND AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENT DEVICE INCLUDING SAME

(54) 발명의 명칭: 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자

(57) Abstract: The present invention relates to a novel organic compound and an organic light-emitting device including same and, more specifically, to an organic electroluminescent device having a low driving voltage and significant improvements in device efficiency and lifespan.

(57) 요약서: 본 발명은 신규한 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 낮은 구동 전압, 소자 효율 특성 및 수명을 현저히 개선한 유기전계발광소자를 제공한다.



WO 2023/068794 A1

명세서

발명의 명칭: 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자 기술분야

[1] 본 발명은 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

[2] 유기전계발광 소자는 기존 액정 표시 장치(LCD), 플라즈마 디스플레이 패널(PDP) 및 전계 방출 디스플레이(FED)등의 타 평판 표시 소자에 비해 구조가 간단하고, 제조 공정상 다양한 장점이 있으며 높은 휘도 및 시야각 특성이 우수하며, 응답속도가 빠르고 구동전압이 낮아 벽걸이 TV등의 평판 디스플레이 또는 디스플레이의 배면광, 조명, 광고판 등의 광원으로 사용되도록 활발하게 개발이 진행되고 있다.

[3] 유기전계발광 소자는 일반적으로 전압을 인가하였을 때 양극으로부터 주입된 정공과 음극으로부터 주입된 전자가 재결합하여 전자-정공 쌍인 엑시톤을 형성하며 이 엑시톤의 에너지를 발광 재료에 전달함에 의해 빛으로 변환된다.

[4] 유기전계발광 소자의 효율과 안정성을 높이기 위해 이스트만 코닥사의 탕(C. W. Tang) 등에 의해 두 개의 반대 전극 사이에 적층형 유기물 박막을 구성한 저전압 구동 유기 전기발광 소자가 보고(C. W. Tang, S. A. Vanslyke, Applied Physics Letters, 51권 913페이지, 1987년)된 이래, 다층 박막 구조형 유기전계발광 소자용 유기 재료에 대한 연구가 활발히 진행되어 왔다.

[5] 일반적으로, 유기전계발광 소자는 음극(전자주입전극)과 양극(정공주입전극), 및 상기 두 전극 사이에 하나 이상의 유기층을 포함하는 구조를 갖는다. 이때, 유기전계발광 소자는 양극으로부터 정공주입층(HIL, hole injection layer), 정공수송층(HTL, hole transport layer), 발광층(EML, light emitting layer), 전자수송층(ETL, electron transport layer) 또는 전자주입층(EIL, electron injection layer)의 순서로 적층되며, 발광층의 효율을 높이기 위하여 전자차단층(EBL, electron blocking layer) 또는 정공차단층(HBL, hole blocking layer)을 각각 발광층의 앞뒤에 추가로 포함할 수 있다.

[6] 이렇게 유기전계발광소자를 다층 박막 구조로 제작하는 이유는, 전극과 유기물 사이의 계면 안정화를 위함이며, 발광 효율을 높일 수 있기 때문이다.

[7] 특히, 다층 박막에 재료로 사용되는 유기화합물의 경우, 각각의 특성에 따라 정공과 전자의 이동 속도 차이가 크므로 적절한 화합물을 함유하는 정공수송층과 전자수송층을 사용하여야만 정공과 전자를 발광층으로 효과적으로 전달되고, 정공과 전자의 밀도가 균형을 이루어 발광 효율을 우수하게 높일 수 있다.

[8] 이로 인해, 유기 박막층의 각층에 포함되는 유기화합물 성분들의 특성은 소자의 구동 전압, 발광 효율, 휘도, 및 소자의 수명에 큰 영향을 미칠 뿐 아니라,

최종적으로 생산된 디스플레이의 효율이나 수명에도 영향을 끼치므로, 유기전계발광소자에서 다층 구조에 적절한 특정 유기물질을 사용하는 것이 중요하게 여겨지고 있다. 따라서, 상기 유기 박막층의 각층에 포함되는 성분들에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다.

- [9] [선행기술문헌]
 [10] [특허문헌]
 [11] (특허 문헌 1) KR 10-2014-0133572 A1
 [12] (특허 문헌 2) KR 10-1663355 B1

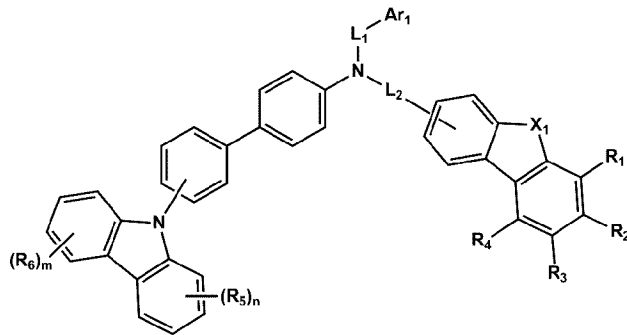
발명의 상세한 설명

기술적 과제

- [13] 본 발명의 목적은 신규 유기 화합물을 포함하여 구동 전압이 낮고, 소자 효율 특성 및 수명 특성이 우수한 유기전계발광 소자를 제공하는 것이다.

과제 해결 수단

- [14] 상기 목적을 달성하기 위하여, 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물에 관한 것일 수 있다:
 [15] [화학식 1]
 [16]



- [17] 여기서,
 [18] n 및 m은 0 내지 4의 정수이며,
 [19] X₁은 O, N(R₇), C(R₈)(R₉) 및 S로 이루어진 군으로부터 선택되며,
 [20] L₁ 및 L₂는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 30개의 아릴렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 30개의 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 10개의 알킬렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 10개의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 10개의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 10개의 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 10개의 헤테로알킬렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 10개의 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 10개의 헤테로알케닐렌기 및 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 10개의 헤테로시클로알케닐렌기로 이루어진 군으로부터 선택되며,
 [21] Ar₁은 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 30개의 아릴기, 치환 또는 비치환의

탄소수 1 내지 30개의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 20개의 알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 20개의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 20개의 헤테로알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 20개의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 30개의 아르알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 20개의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 20개의 시클로알케닐기 및 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 20개의 헤테로알케닐기로 이루어진 군으로부터 선택되며,

- [22] R_1 내지 R_9 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 니트로기, 할로젠기, 히드록시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 4의 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 24의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 30의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 30의 아르알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 24의 헤테로아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있고,
- [23] R_1 내지 R_4 중 어느 하나 이상은 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있다.
- [24] 또한, 본 발명은 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 하나 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 하나 이상의 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.
- [25] 본 발명에서 “수소”는 특별히 한정하지 않는 한, 수소, 경수소, 중수소 또는 삼중수소이다.
- [26] 본 발명에서 “할로젠기”는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드이다.
- [27] 본 발명에서 “알킬”은 탄소수 1 내지 40개의 직쇄 또는 측쇄의 포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [28] 본 발명에서 “알케닐(alkenyl)”은 탄소-탄소 이중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40개의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 비닐(vinyl), 알릴(allyl), 이소프로펜일(isopropenyl),

2-부텐일(2-butenyl) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

- [29] 본 발명에서 “알키닐(alkynyl)”은 탄소-탄소 삼중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40개의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 에티닐(ethynyl), 2-프로파닐(2-propynyl) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [30] 본 발명에서 “알킬티오”는 황 연결(-S-)을 통해 결합된 상기 기재된 알킬기를 의미한다.
- [31] 본 발명에서 “아릴”은 단독 고리 또는 2이상의 고리가 조합된 탄소수 6 내지 60개의 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있으며, 구체적으로 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 트리페닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 플루오레닐기는 치환될 수 있으며, 인접한 기들이 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.
- [32] 본 발명에서 “헤테로아릴”은 탄소수 6 내지 30개의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이때, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로원자로 치환된다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있고, 나아가 아릴기와의 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 헤테로아릴의 예로는 피리딜, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 트리아지닐과 같은 6-원 모노사이클릭 고리, 페녹사티에닐(phenoxathienyl), 인돌리지닐(indolizinyl), 인돌릴(indolyl), 퓨리닐(purinyl), 퀴놀릴(quinolyl), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazolyl)과 같은 폴리사이클릭 고리 및 2-퓨라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [33] 본 발명에서 “아릴옥시”는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R은 탄소수 6 내지 60개의 아릴을 의미한다. 이러한 아릴옥시의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [34] 본 발명에서 “알킬옥시”는 R'O-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R'는 탄소수 1 내지 40개의 알킬을 의미하며, 직쇄(linear), 측쇄(branched) 또는 사이클릭(cyclic) 구조를 포함할 수 있다. 알킬옥시의 예로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 1-프로폭시, t-부톡시, n-부톡시, 펜톡시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [35] 본 발명에서 “알콕시”는 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄일 수 있다. 알콕시의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 20인 것이 바람직하다. 구체적으로, 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 이소프로폭시, i-프로필옥시, n-부톡시, 이소부톡시, tert-부톡시, sec-부톡시, n-펜틸옥시, 네오펜틸옥시, 이소펜틸옥시,

n-헥실옥시, 3,3-디메틸부틸옥시, 2-에틸부틸옥시, n-옥틸옥시, n-노닐옥시, n-데실옥시, 벤질옥시, p-메틸벤질옥시 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[36] 본 발명에서 "아르알킬"은, 아릴 및 알킬이 상기한 바와 같은 아릴-알킬 그룹을 의미한다. 바람직한 아르알킬은 저급 알킬 그룹을 포함한다. 적합한 아르알킬 그룹의 비제한적인 예는 벤질, 2-펜에틸 및 나프탈레닐메틸을 포함한다. 모잔기에 대한 결합은 알킬을 통해 이루어진다.

[37] 본 발명에서 "아릴아미노기"는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환된 아민을 의미한다.

[38] 본 발명에서 "알킬아미노기"는 탄소수 1 내지 30의 알킬기로 치환된 아민을 의미한다.

[39] 본 발명에서 "아르알킬아미노기"는 탄소수 6 내지 30의 아릴-알킬기로 치환된 아민을 의미한다.

[40] 본 발명에서 "헤테로아릴아미노기"는 탄소수 6 내지 30의 아릴기 및 헤테로고리기로 치환된 아민기를 의미한다.

[41] 본 발명에서 "헤테로아르알킬기"는 헤테로고리기로 치환된 아릴-알킬 그룹을 의미한다.

[42] 본 발명에서 "사이클로알킬"은 탄소수 3 내지 40개의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1개의 치환기를 의미한다. 이러한 사이클로알킬의 예로는 사이클로프로필, 사이클로부틸, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 노르보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantine) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

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

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

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

[46] 본 발명에서 "인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성한다"는 것은 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 지방족 탄화수소고리; 치환 또는 비치환된 방향족 탄화수소고리; 치환 또는 비치환된 지방족 헤테로고리; 치환 또는 비치환된 방향족 헤테로고리; 또는 이들의 축합고리를 형성하는 것을 의미한다.

[47] 본 발명에서 "방향족 탄화수소고리"의 예로는 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기

등이 있으나 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[48] 본 발명에서 “지방족 헤테로고리”란 헤테로원자 중 1개 이상을 포함하는 지방족고리를 의미한다.

[49] 본 발명에서 “방향족 헤테로고리”란 헤테로원자 중 1개 이상을 포함하는 방향족고리를 의미한다.

[50] 본 발명에서 “치환”은 화합물의 탄소 원자에 결합된 수소 원자가 다른 치환기로 바뀌는 것을 의미하며, 치환되는 위치는 수소 원자가 치환되는 위치 즉, 치환기가 치환 가능한 위치라면 한정하지 않으며, 2 이상 치환되는 경우, 2 이상의 치환기는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 상기 치환기는 수소, 시아노기, 니트로기, 할로젠기, 히드록시기, 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 탄소수 2 내지 24의 알키닐기, 탄소수 2 내지 30의 헤테로알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아르알킬기, 탄소수 5 내지 30의 아릴기, 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴알킬기, 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기, 탄소수 6 내지 30의 아르알킬아미노기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로 아릴아미노기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 및 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있으나, 상기 예시에 국한되지 않는다.

발명의 효과

[51] 본 발명은 신규 유기 화합물로, 유기전계발광소자 재료로 사용 시, 인접한 층과의 계면 특성이 우수하고, 우수한 화학적 안정성을 가질 수 있다.

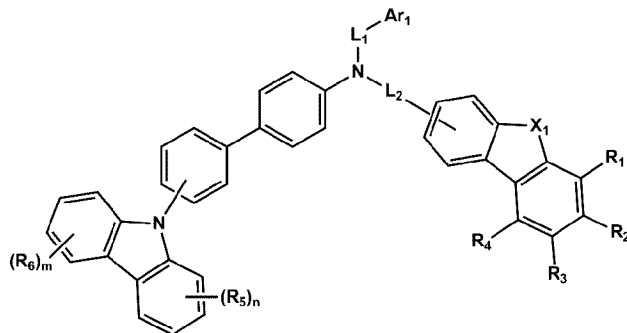
[52] 또한, 본 발명은 상기 신규 유기 화합물을 포함하여 구동 전압이 낮고, 소자 효율 특성 및 수명 특성이 우수한 유기전계발광 소자를 제공할 수 있다.

발명의 실시를 위한 최선의 형태

[53] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물에 관한 것일 수 있다:

[54] [화학식 1]

[55]



[56] 여기서,

[57] n 및 m은 0 내지 4의 정수이며,

[58] X₁은 O, N(R₇), C(R₈)(R₉) 및 S로 이루어진 군으로부터 선택되며,

- [59] L_1 및 L_2 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 30개의 아릴렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 30개의 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 10개의 알킬렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 10개의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 10개의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 10개의 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 10개의 헤테로알킬렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 10개의 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 10개의 헤테로알케닐렌기 및 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 10개의 헤테로시클로알케닐렌기로 이루어진 군으로부터 선택되며,
- [60] Ar_1 은 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 30개의 아릴기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 30개의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 20개의 알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 20개의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 20개의 헤테로알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 20개의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 30개의 아르알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 20개의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 20개의 시클로알케닐기 및 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 20개의 헤테로알케닐기로 이루어진 군으로부터 선택되며,
- [61] R_1 내지 R_9 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 니트로기, 할로젠기, 히드록시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 4의 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 24의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 30의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 30의 아르알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 24의 헤테로아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있고,
- [62] R_1 내지 R_4 중 어느 하나 이상은 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있다.

발명의 실시를 위한 형태

- [63] 이하, 본 발명이 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자가 용이하게

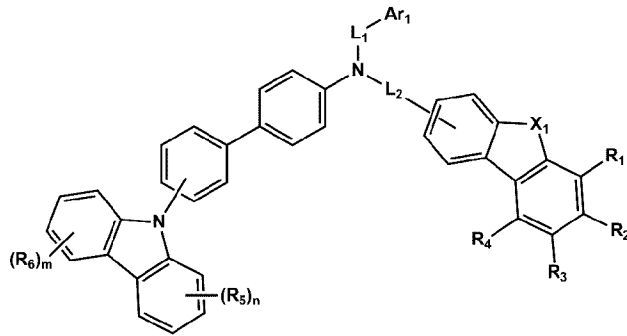
실시할 수 있도록 본 발명의 실시예에 대하여 상세히 설명한다. 그러나 본 발명은 여러 가지 상이한 형태로 구현될 수 있으며 여기에서 설명하는 실시예에 한정되지 않는다.

[64] 본 발명에 따른 신규한 유기 화합물은 인접한 층과의 계면 특성이 우수하고, 우수한 화학적 안정성을 가질 수 있고, 특히 정공수송이 용이한 HOMO 에너지 레벨을 가져 발광층으로의 정공수송 특성이 우수한 유기전계발광소자의 정공수송보조층 재료로 사용될 수 있다.

[65] 구체적으로 하기 화학식 1로 표시되는 화합물은 다음과 같다:

[66] [화학식 1]

[67]



[68] 여기서,

[69] n 및 m은 0 내지 4의 정수이며,

[70] X₁은 O, N(R₇), C(R₈)(R₉) 및 S로 이루어진 군으로부터 선택되며,

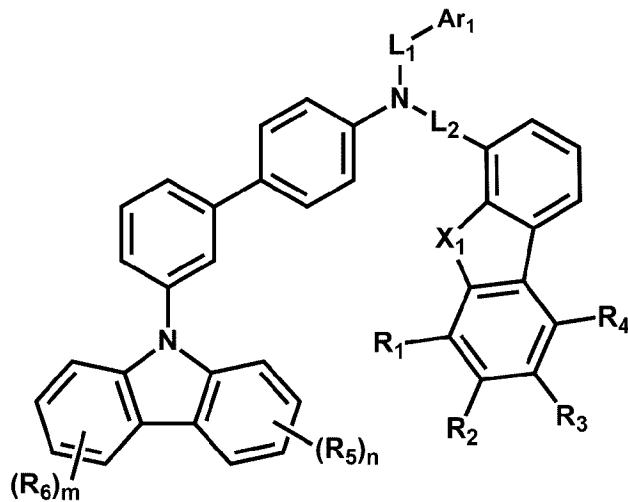
[71] L₁ 및 L₂는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 30개의 아릴렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 30개의 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 10개의 알킬렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 10개의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 10개의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 10개의 시클로알케닐렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 10개의 헤테로알킬렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 10개의 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 10개의 헤테로알케닐렌기 및 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 10개의 헤테로시클로알케닐렌기로 이루어진 군으로부터 선택되며,

[72] Ar₁은 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 30개의 아릴기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 30개의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 20개의 알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 20개의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 20개의 헤테로알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 20개의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 30개의 아르알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 20개의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 20개의 시클로알케닐기 및 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 20개의 헤테로알케닐기로 이루어진 군으로부터 선택되며,

- [73] R_1 내지 R_9 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 니트로기, 할로젠기, 히드록시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 4의 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 24의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 30의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 30의 아르알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 24의 헤테로아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있고,
- [74] R_1 내지 R_4 중 어느 하나 이상은 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있다.
- [75] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2 내지 7로 표시되는 화합물일 수 있다:

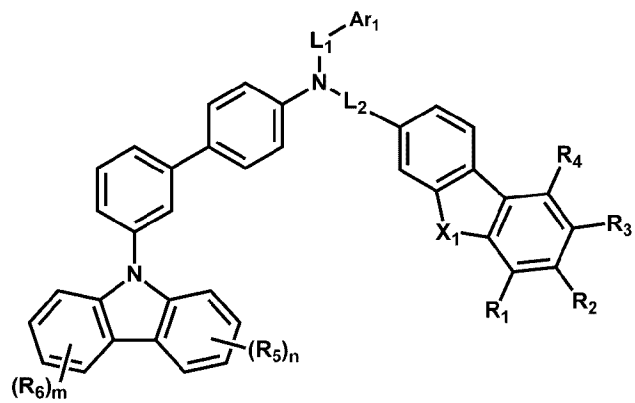
[76] [화학식 2]

[77]



[78] [화학식 3]

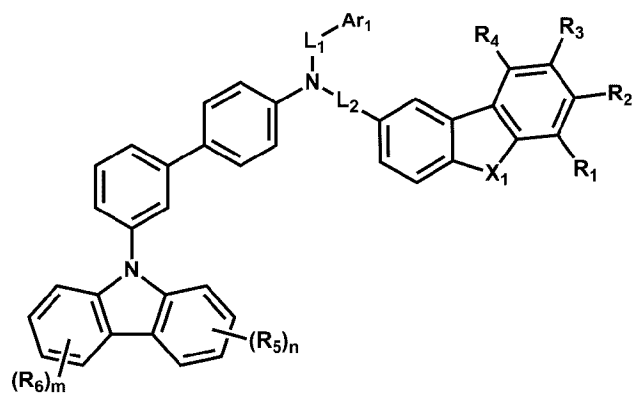
[79]



[80]

[화학식 4]

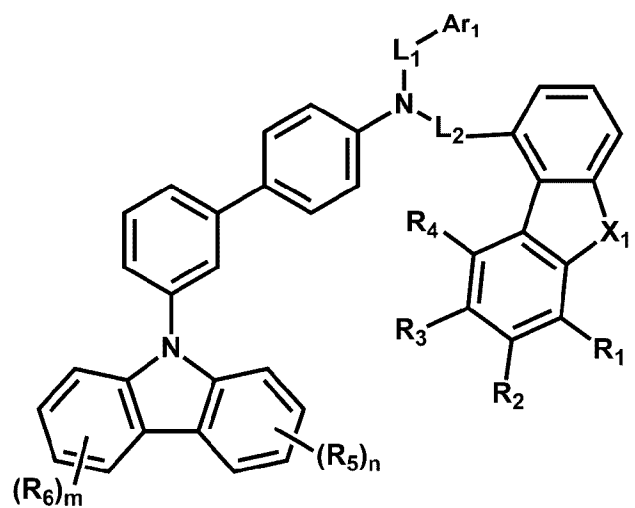
[81]



[82]

[화학식 5]

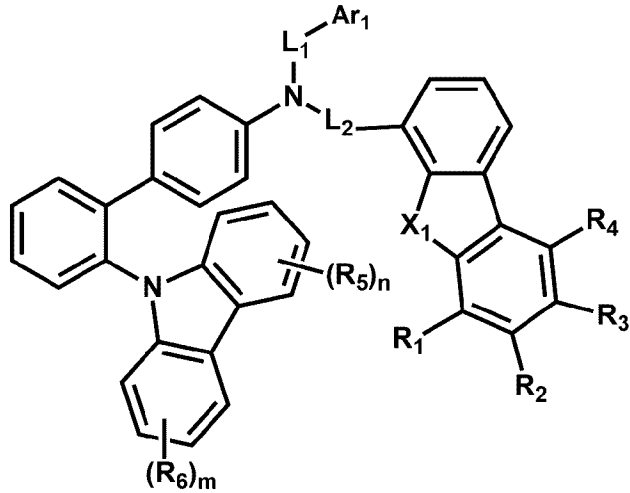
[83]



[84]

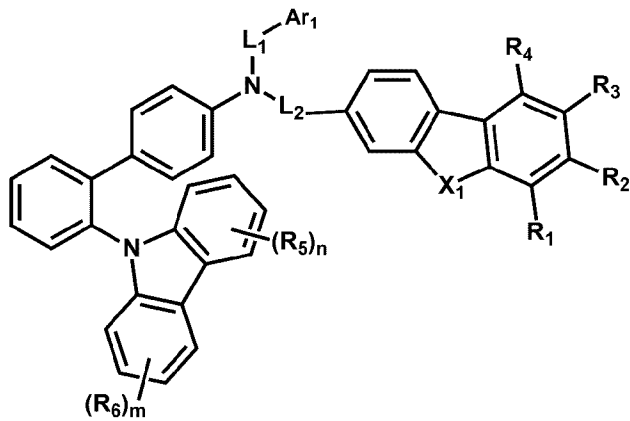
[화학식 6]

[85]



[86] [화학식 7]

[87]



[88] 여기서,

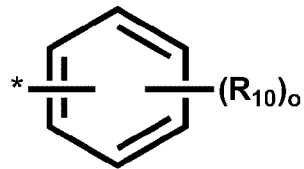
[89] n, m, L₁, L₂, Ar₁, X₁, R₁ 내지 R₆은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.[90] 상기 L₁ 및 L₂는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 단일결합 또는 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 30개의 아릴렌기일 수 있다.

[91] 상기 X는 O 또는 S일 수 있다.

[92] 상기 Ar₁은 하기 화학식 8 내지 12로 이루어진 군에서 선택될 수 있다:

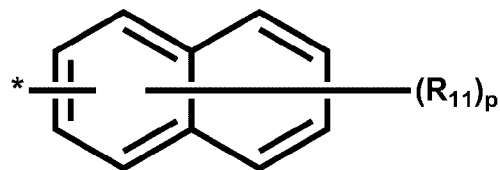
[93] [화학식 8]

[94]



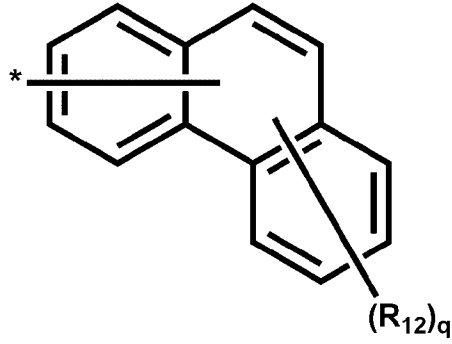
[95] [화학식 9]

[96]



[97] [화학식 10]

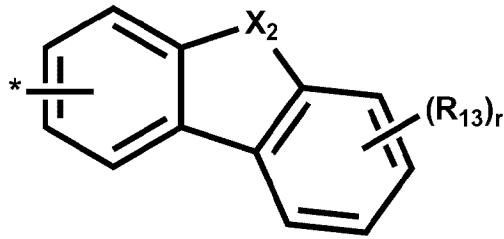
[98]



[99]

[화학식 11]

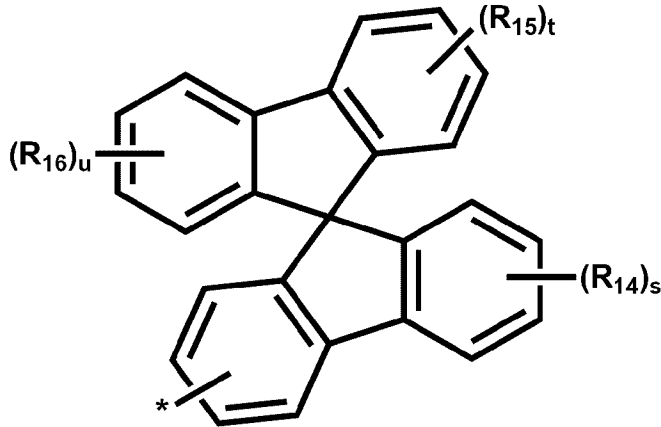
[100]



[101]

[화학식 12]

[102]



[103]

여기서,

[104]

*는 결합되는 부분이며,

[105]

o는 0 내지 5의 정수이며,

[106]

p는 0 내지 7의 정수이며,

[107]

q는 0 내지 6의 정수이며,

[108]

r, s, t 및 u는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며,

[109]

X₂는 O, N(R₁₇), C(R₁₈)(R₁₉) 및 S로 이루어진 군으로부터 선택되며,

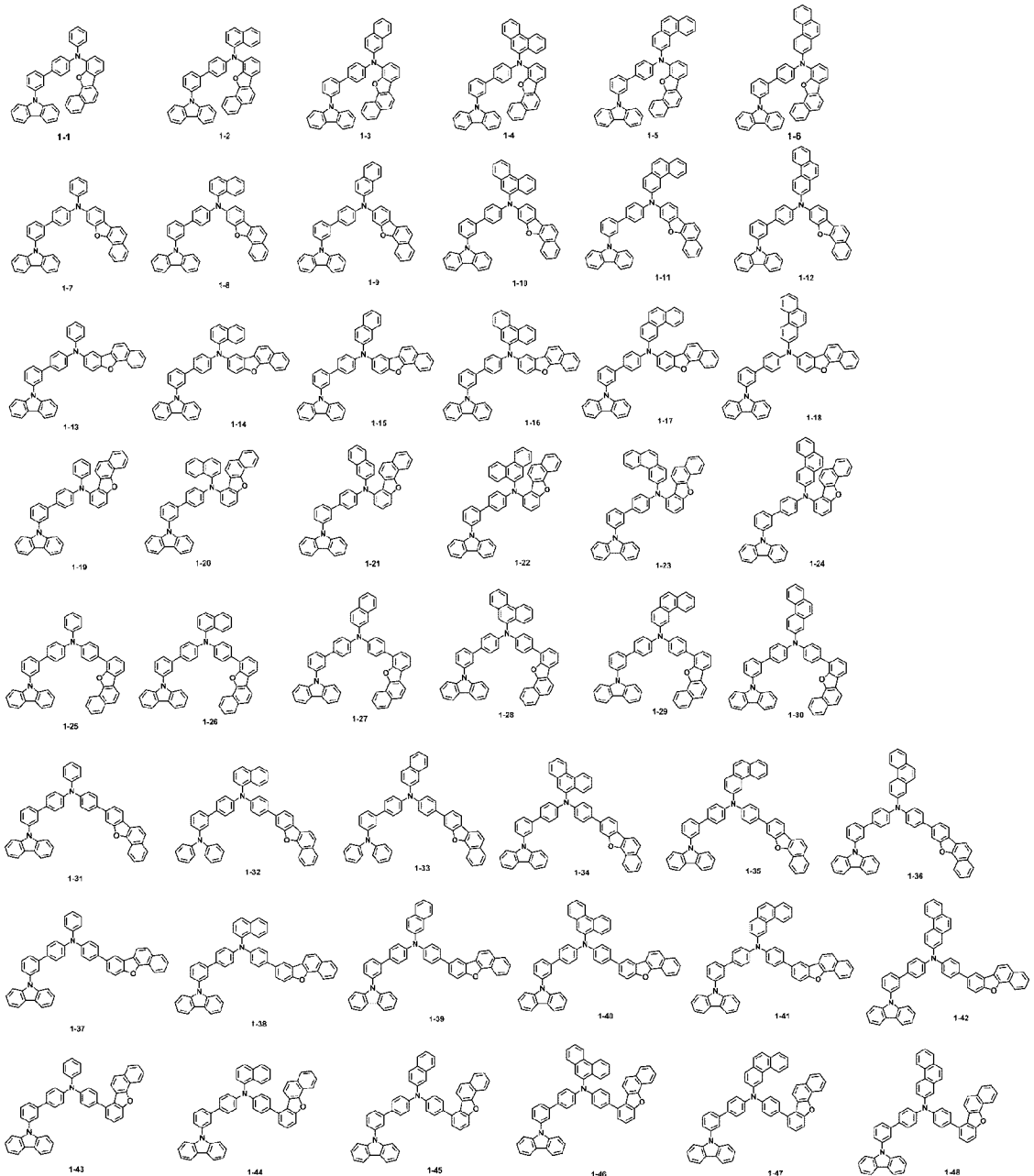
[110]

R₁₀ 내지 R₁₉는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 니트로기, 할로젠기, 히드록시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 4의 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 24의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 30의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지

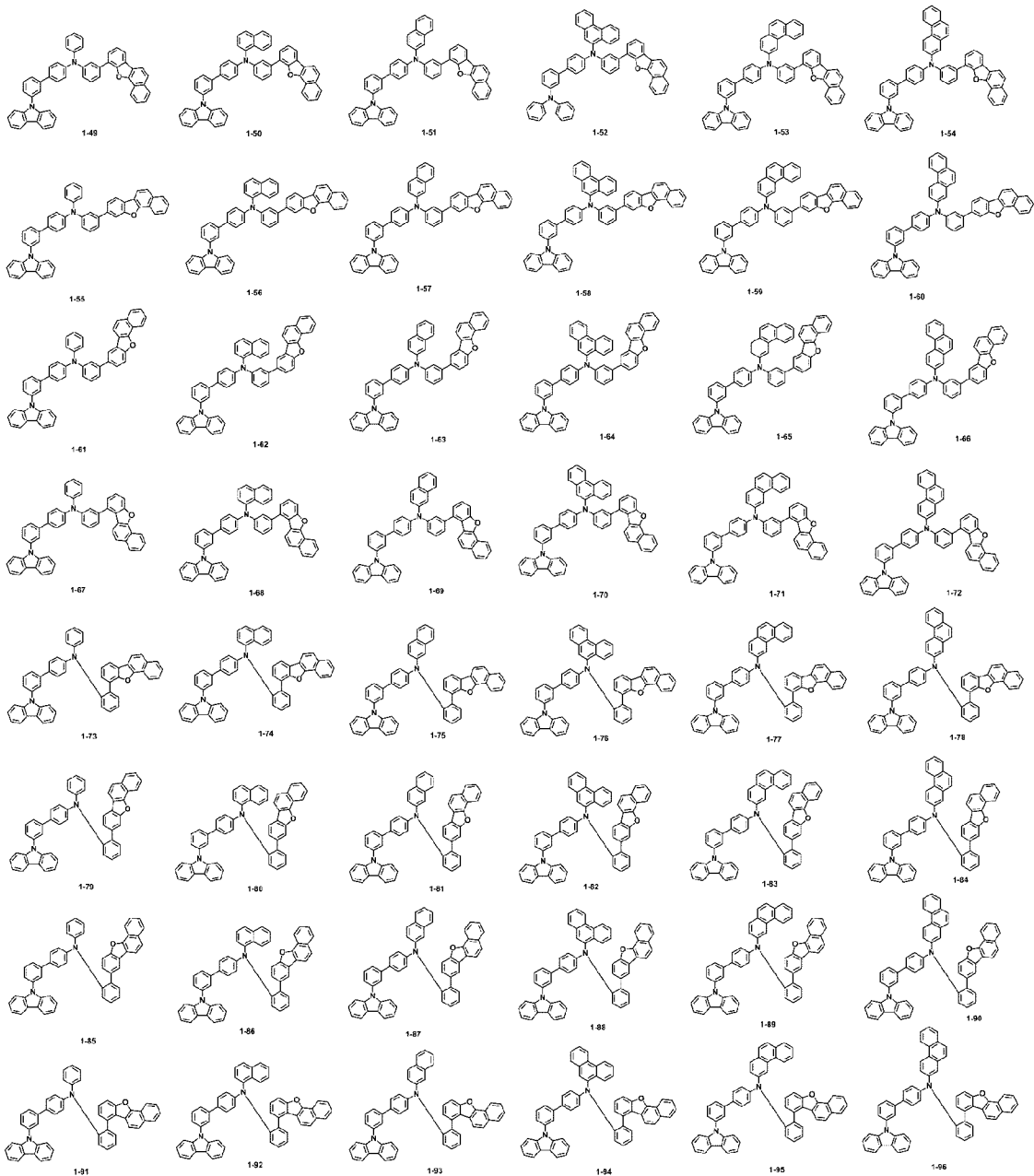
30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 30의 아르알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 24의 헤테로아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있다.

[111] 본 발명에 따른 화학식 1 로 표시되는 화합물은 하기 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되며, 이에 한정되는 것은 아니다:

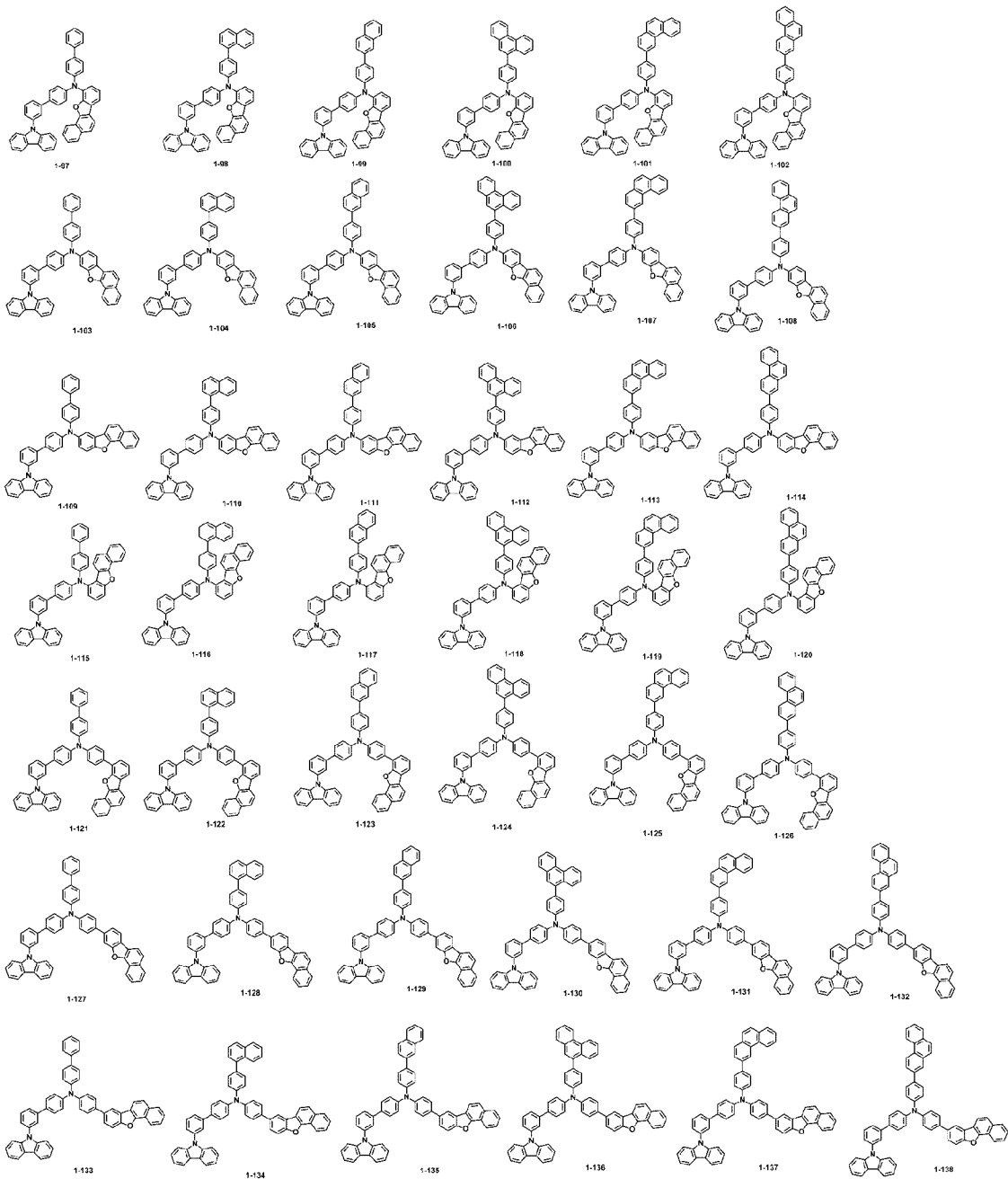
[112]



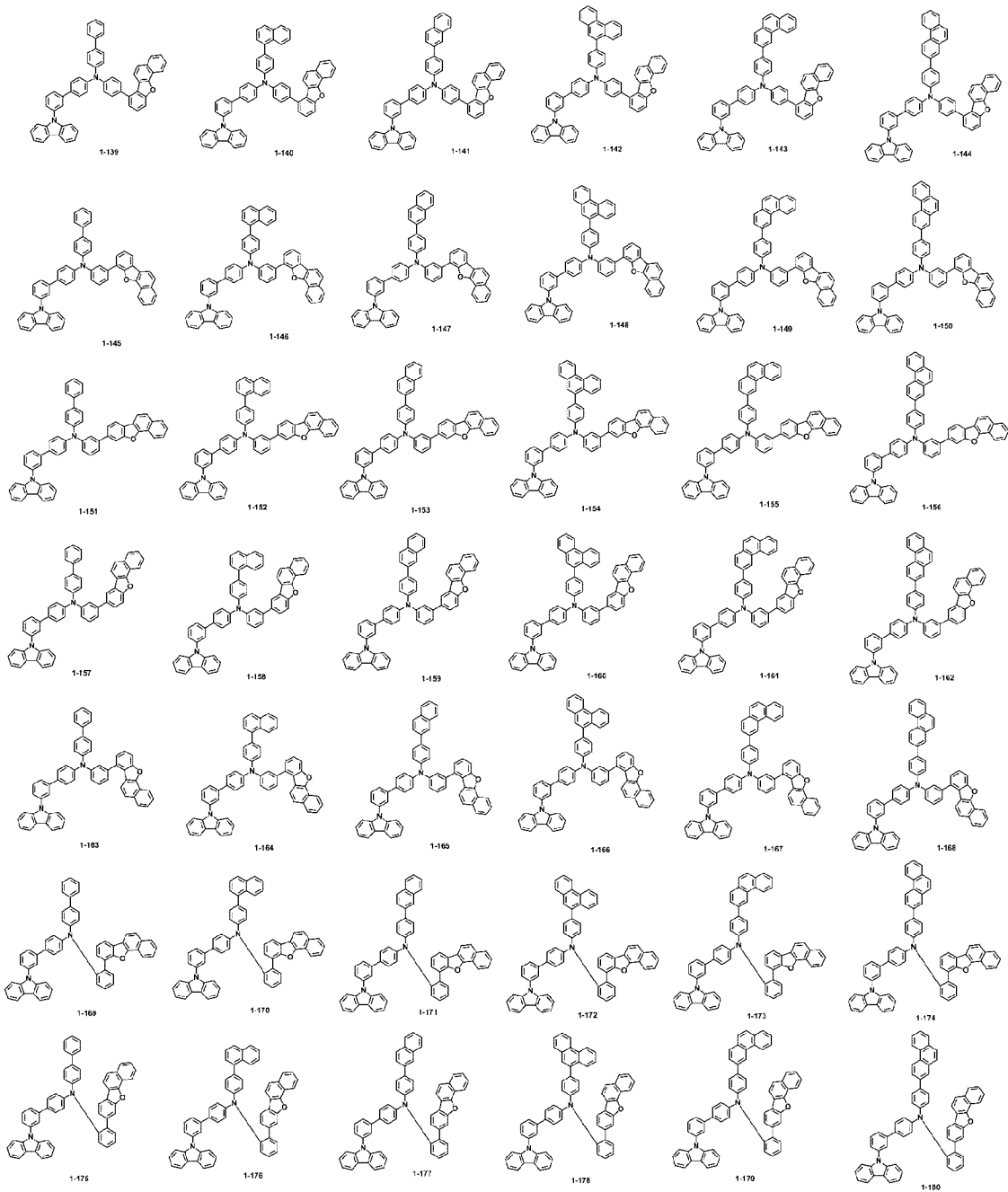
[113]



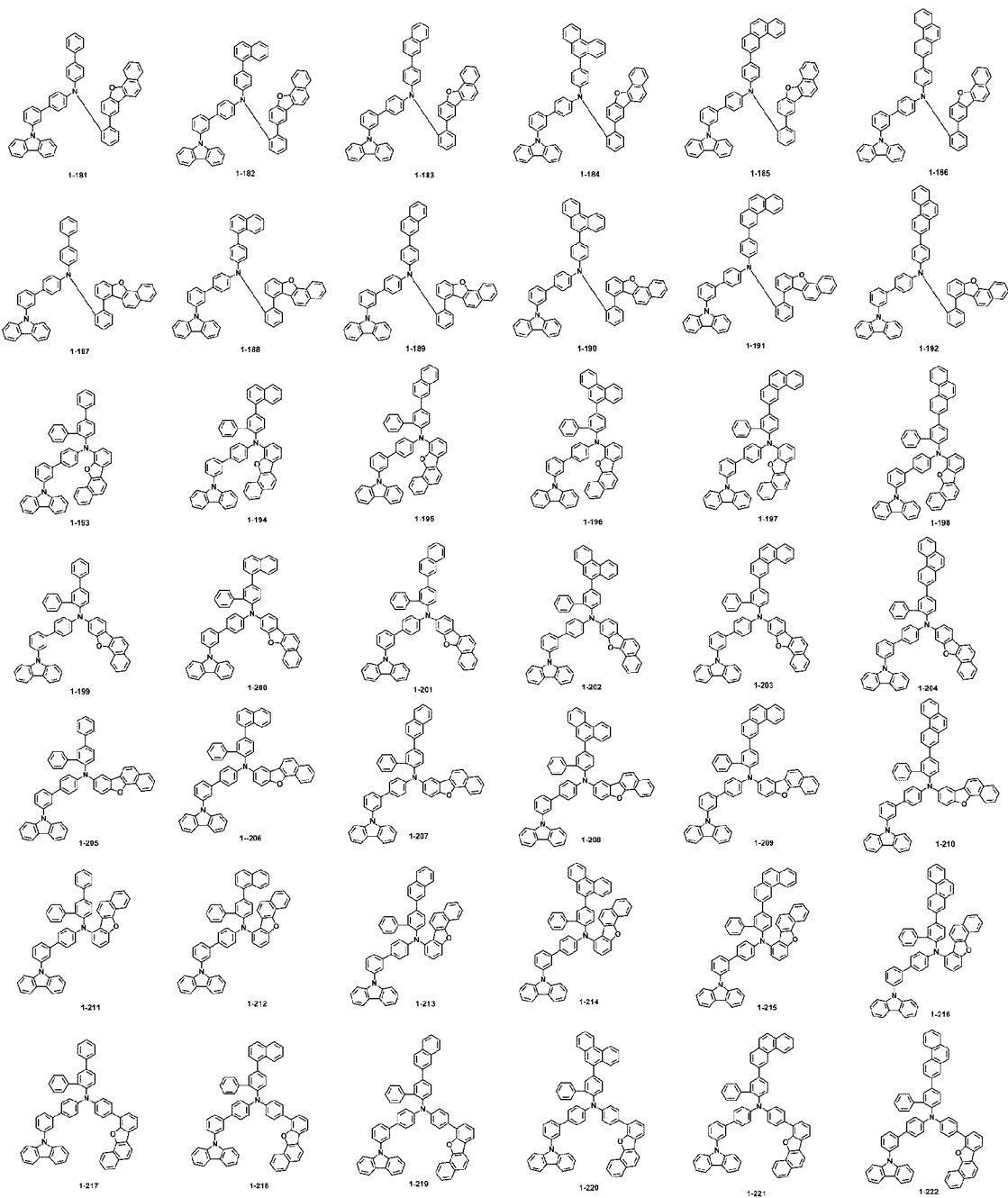
[114]



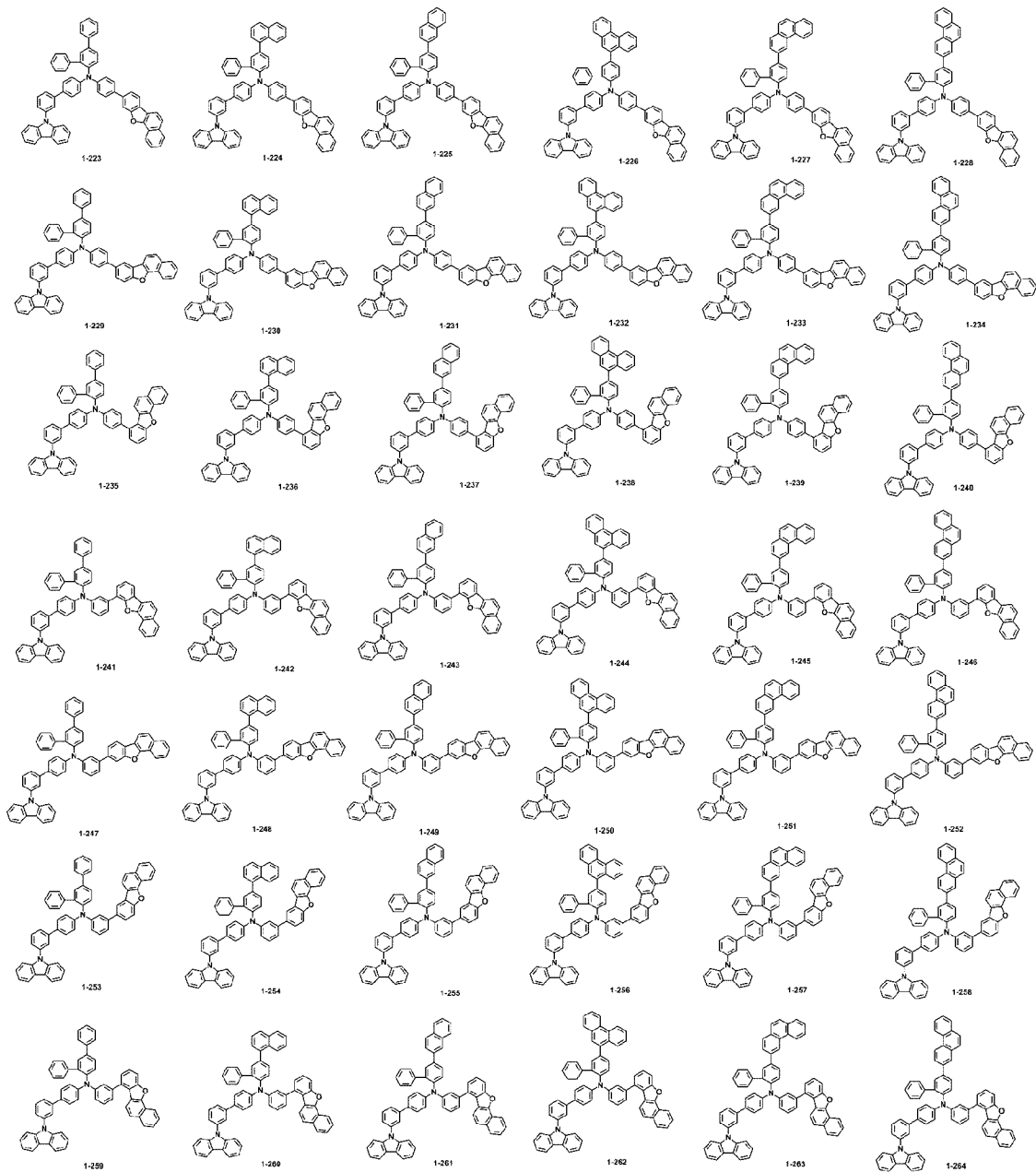
[115]



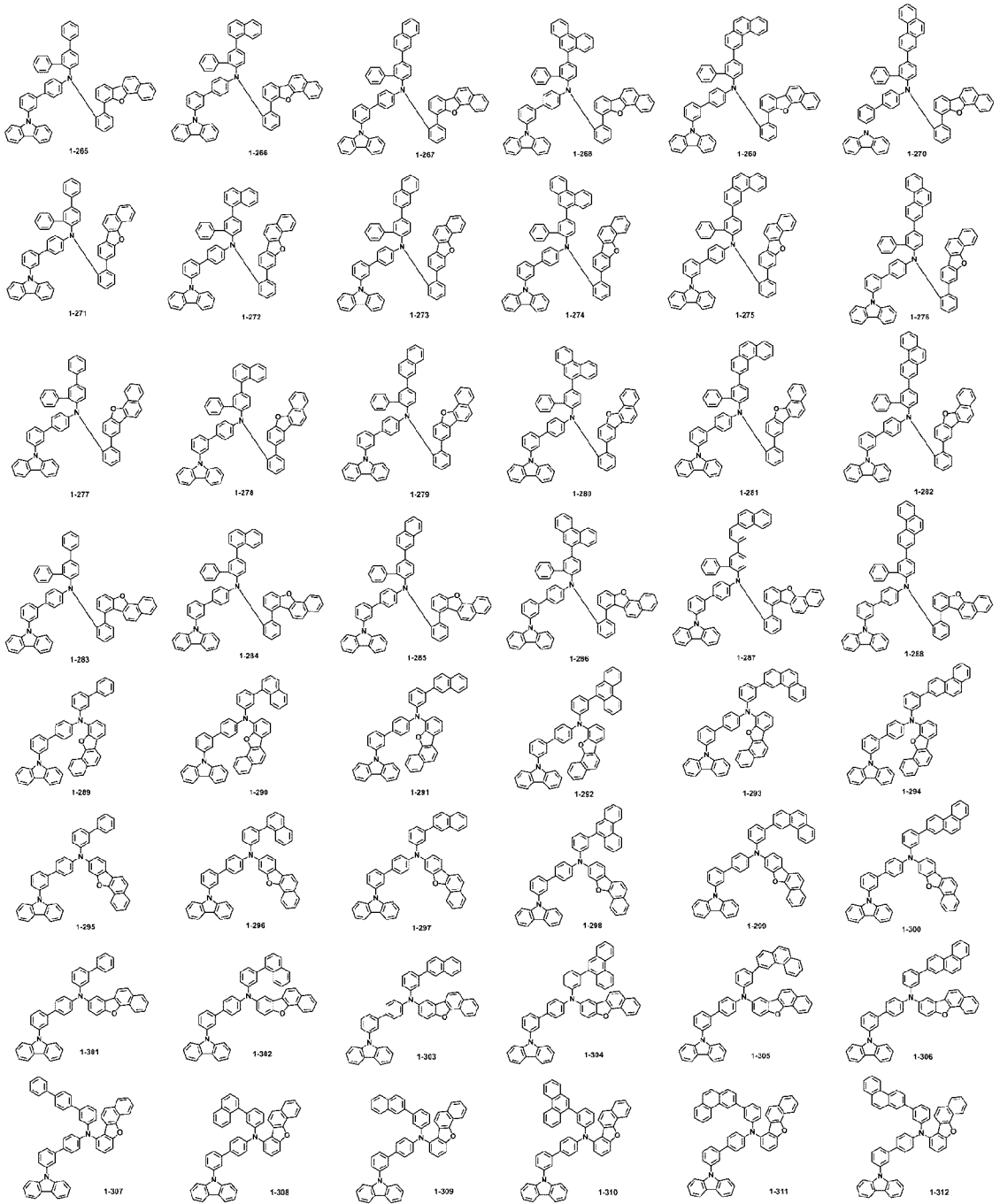
[116]



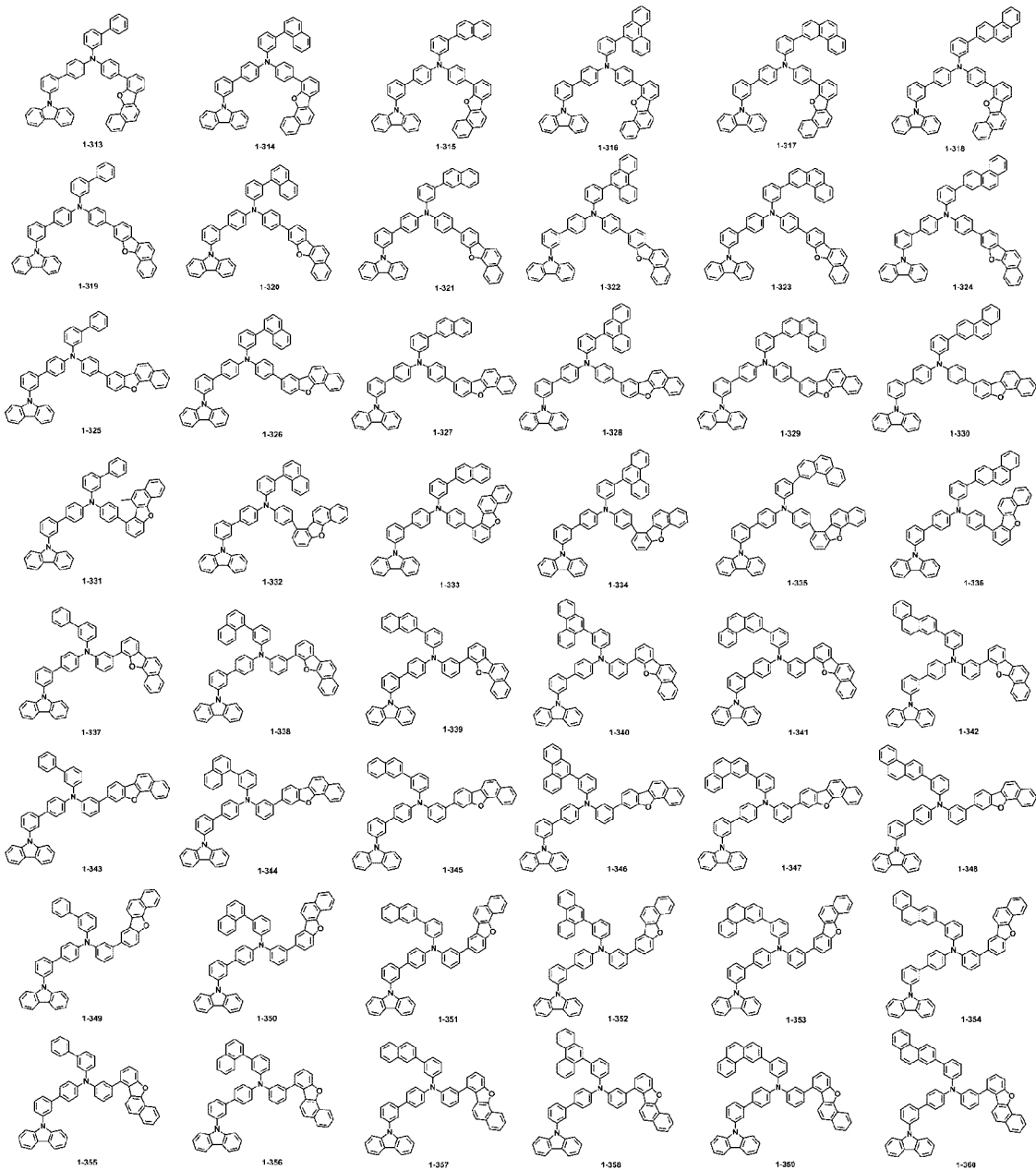
[117]



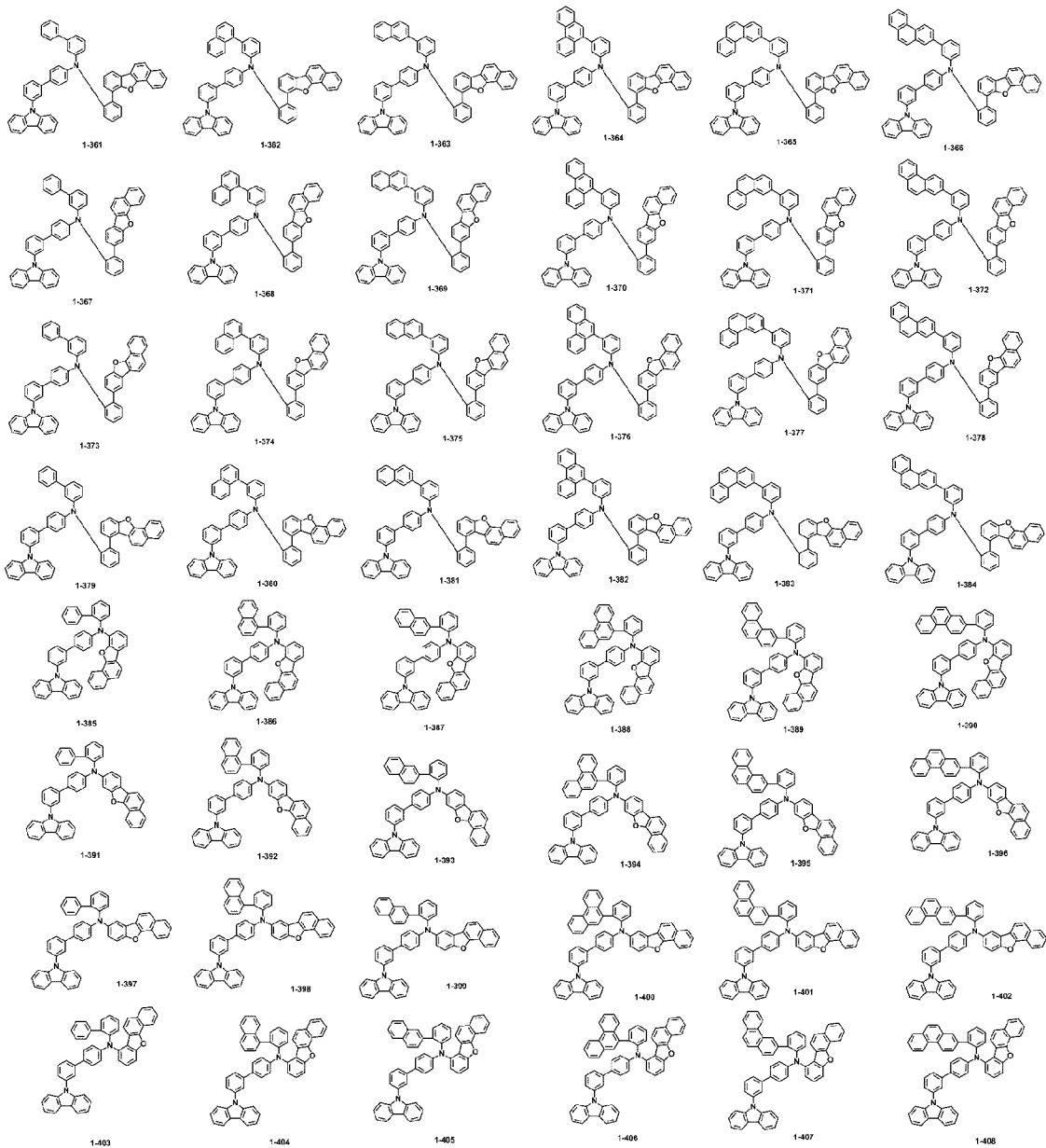
[118]



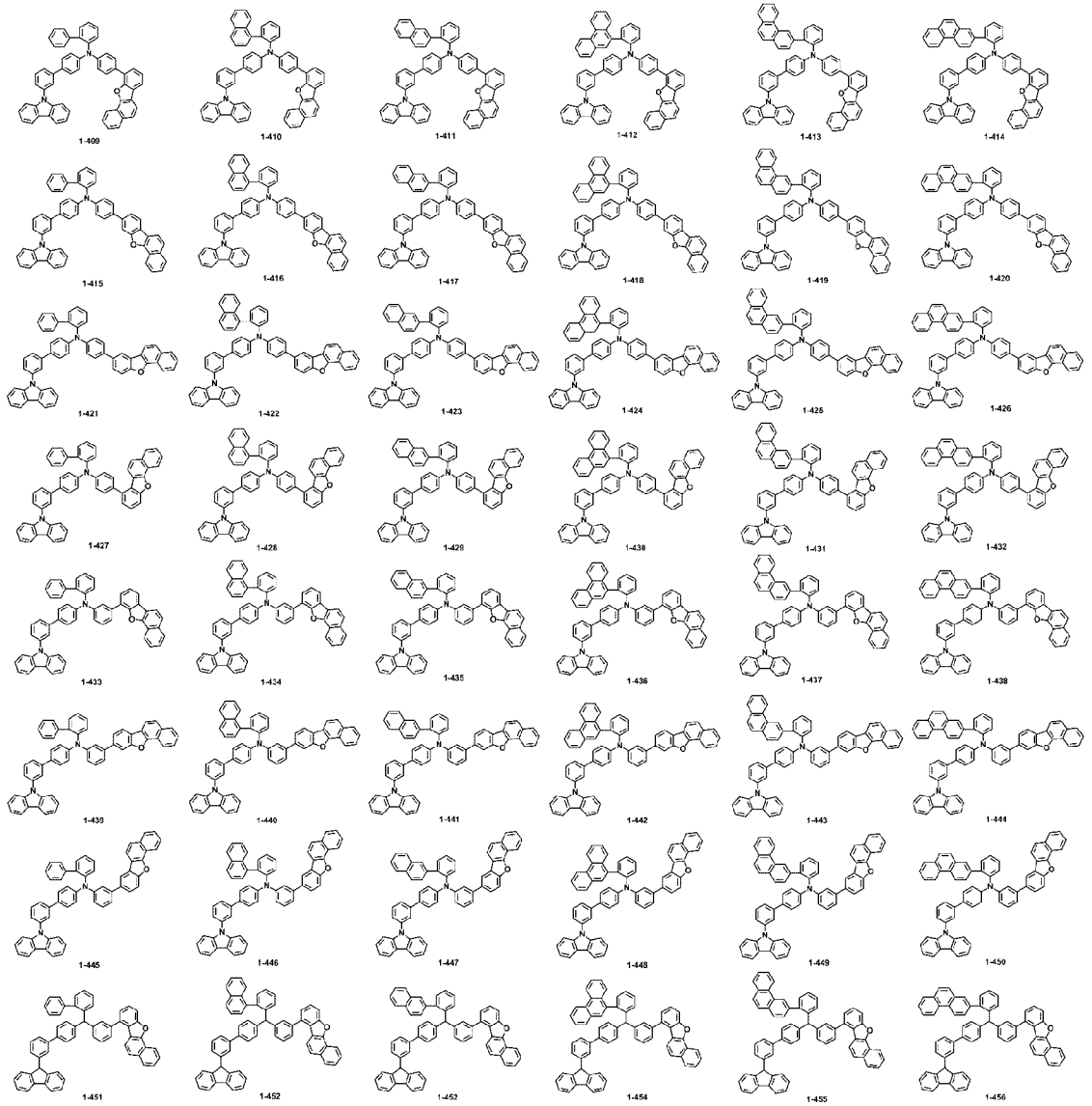
[119]



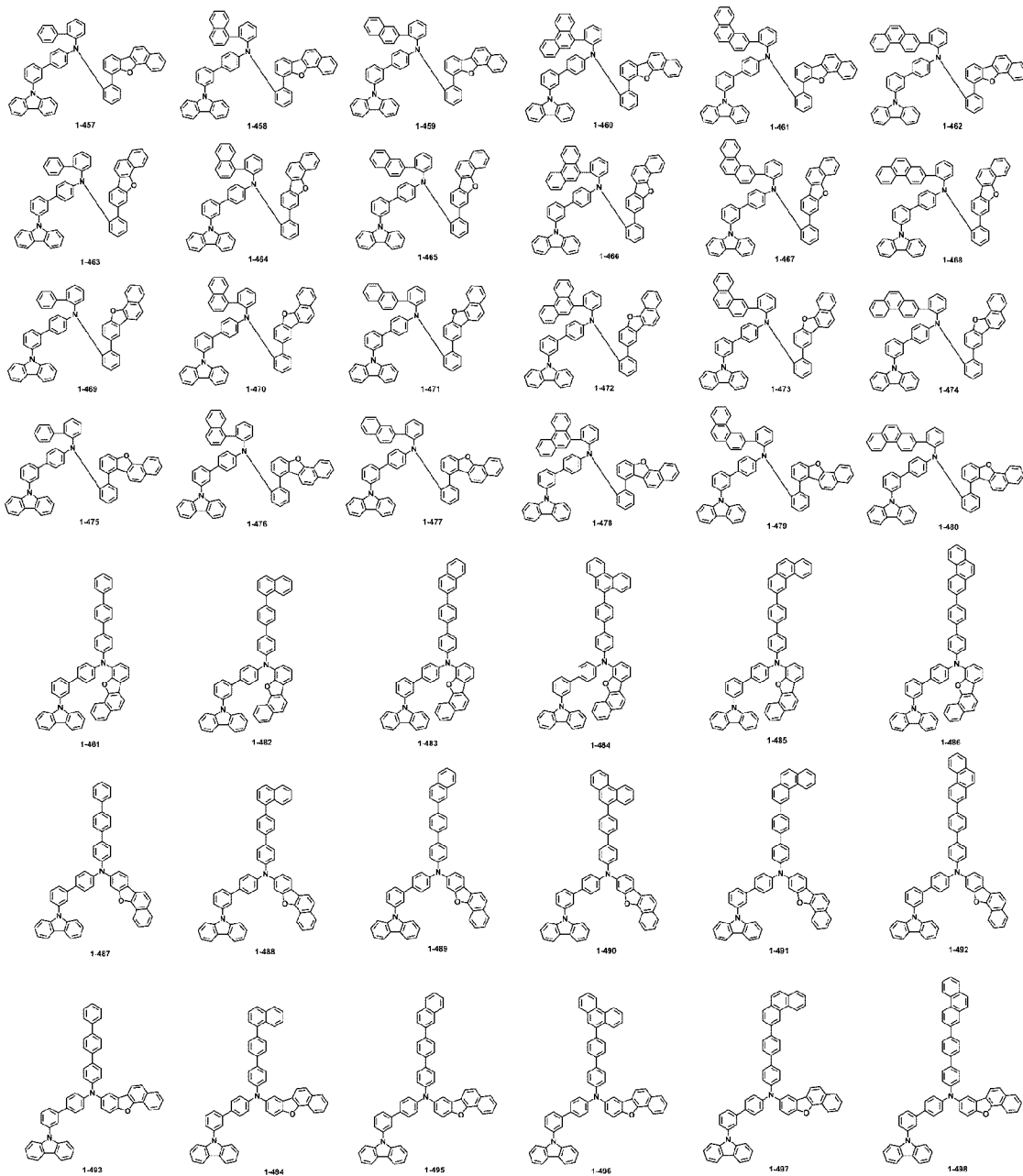
[120]



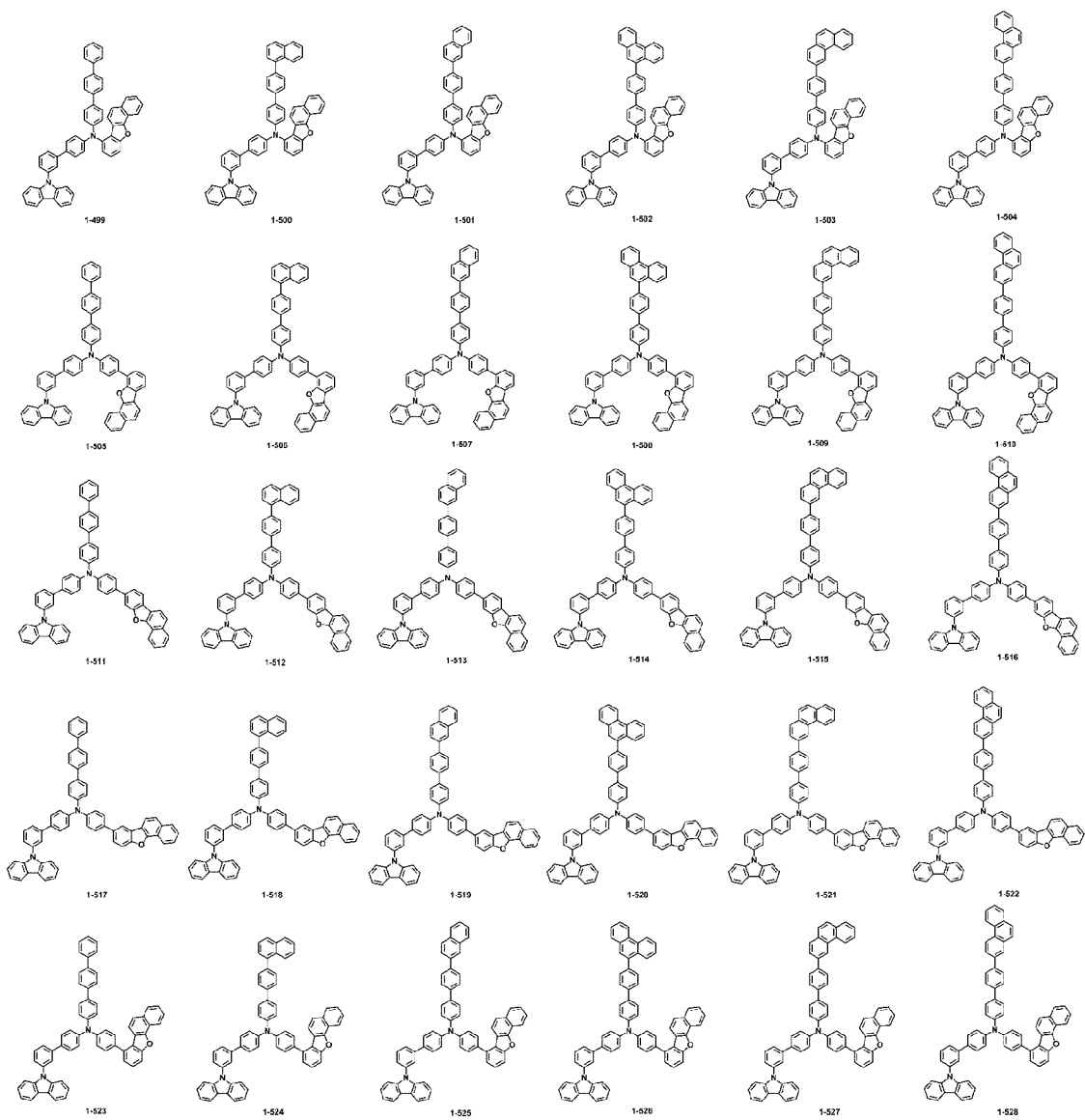
[121]



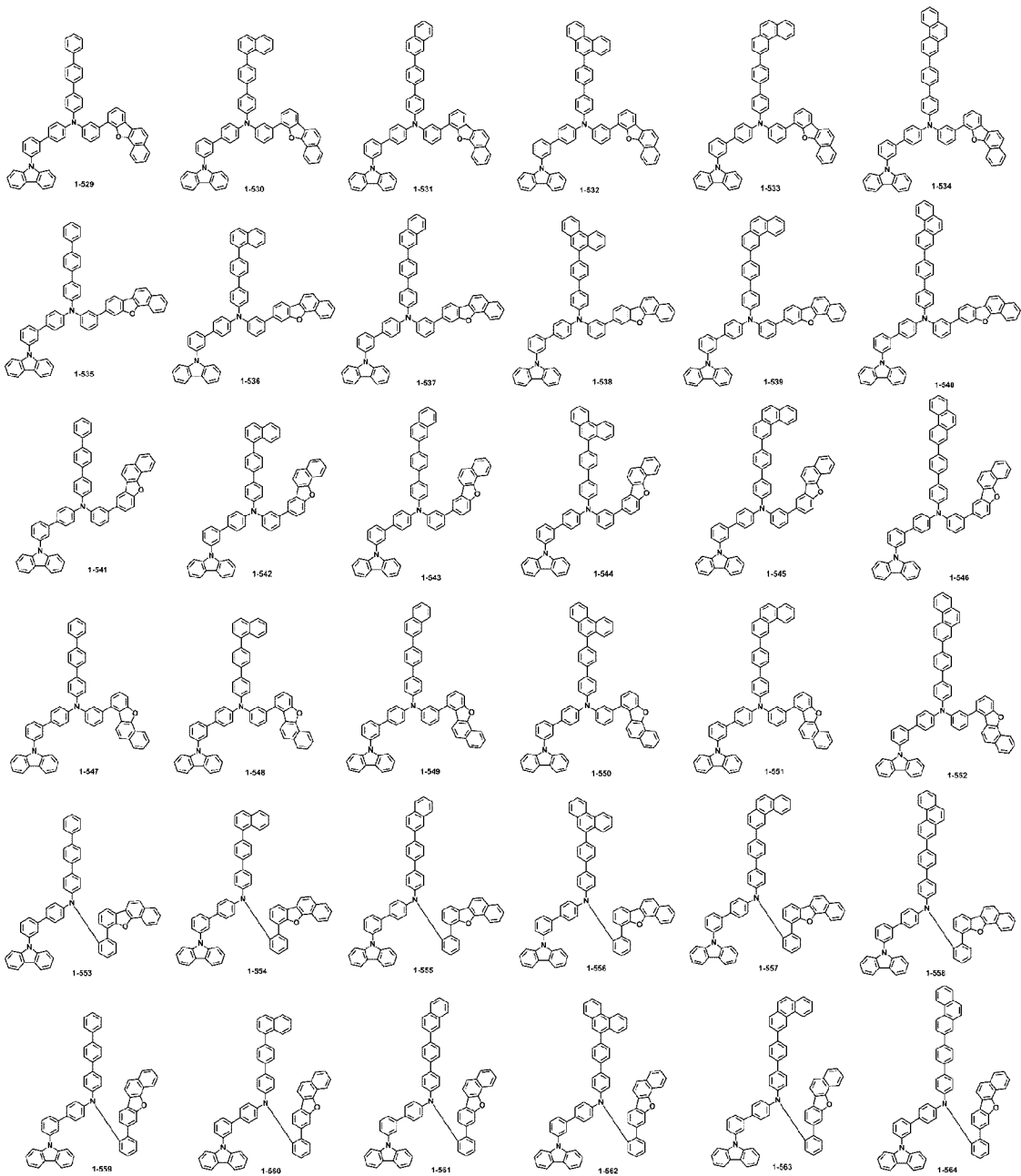
[122]



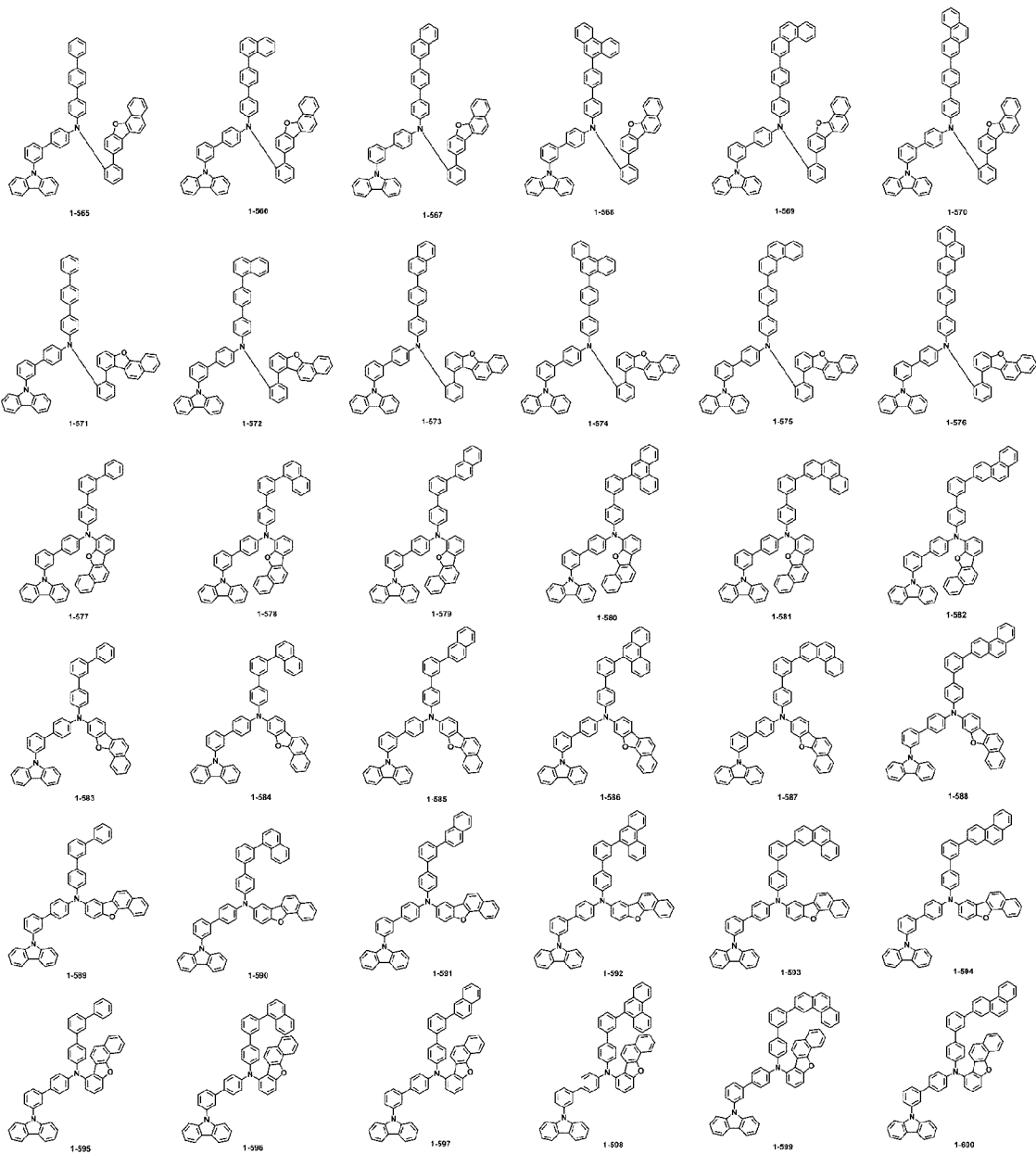
[123]



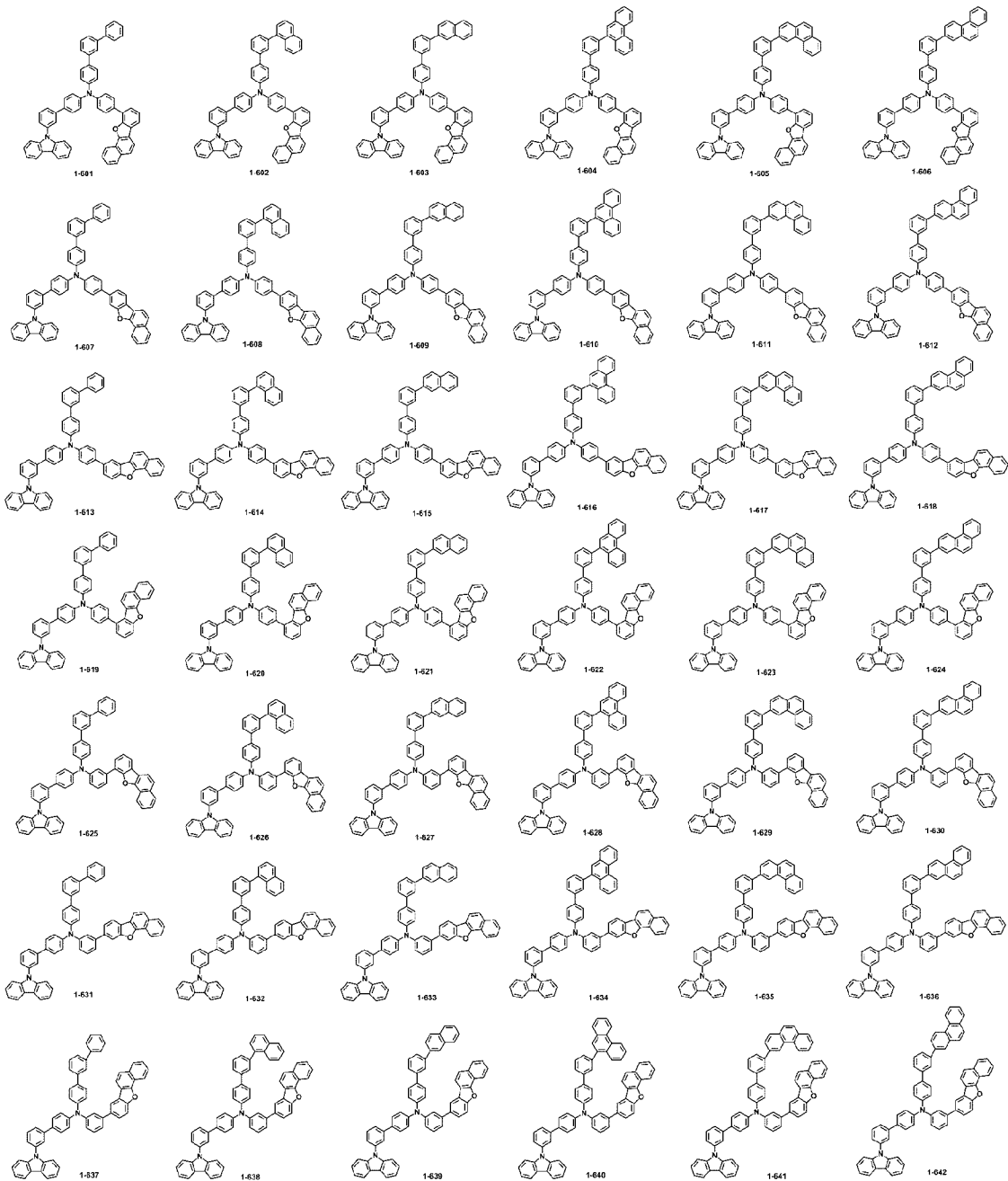
[124]



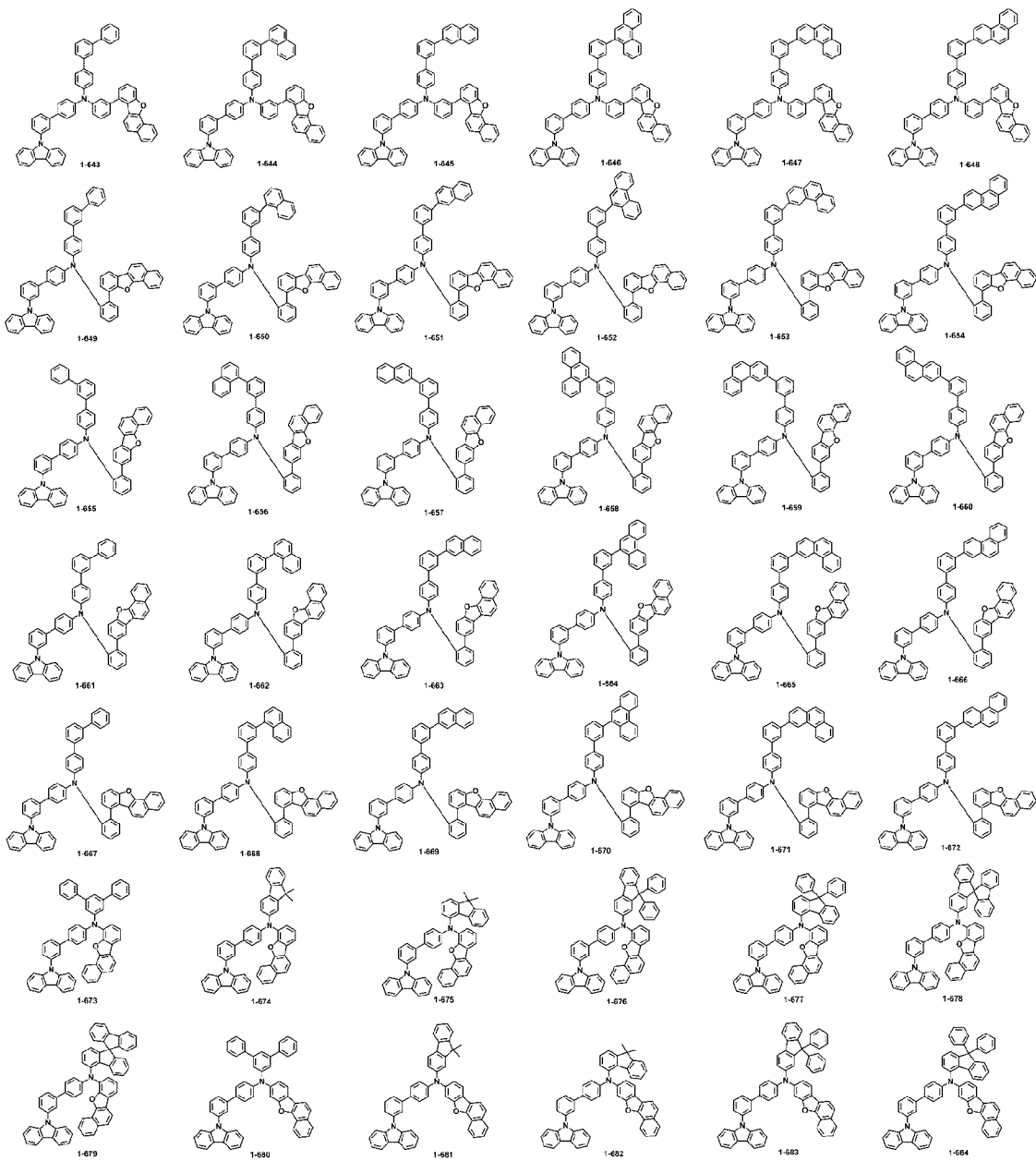
[125]



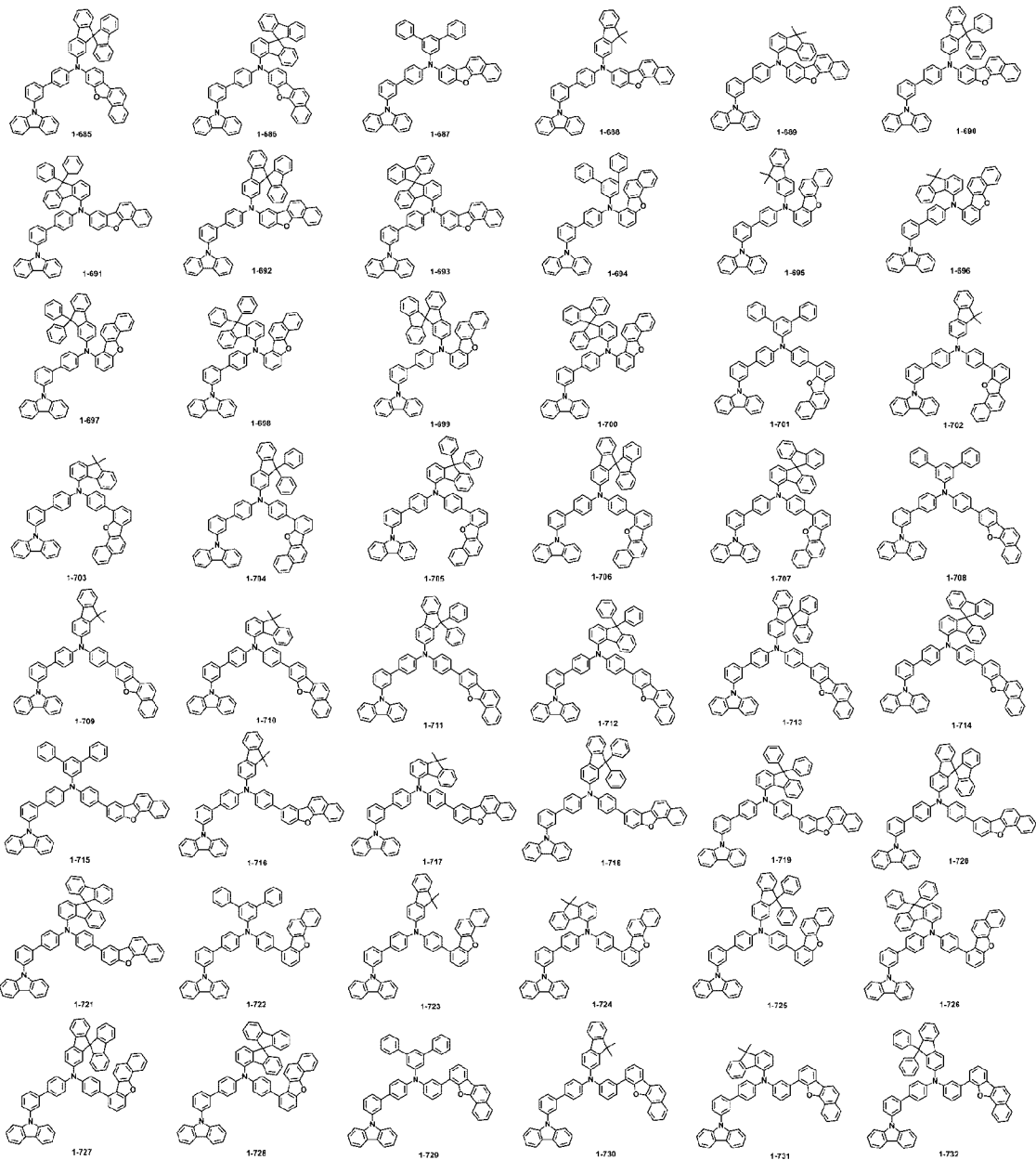
[126]



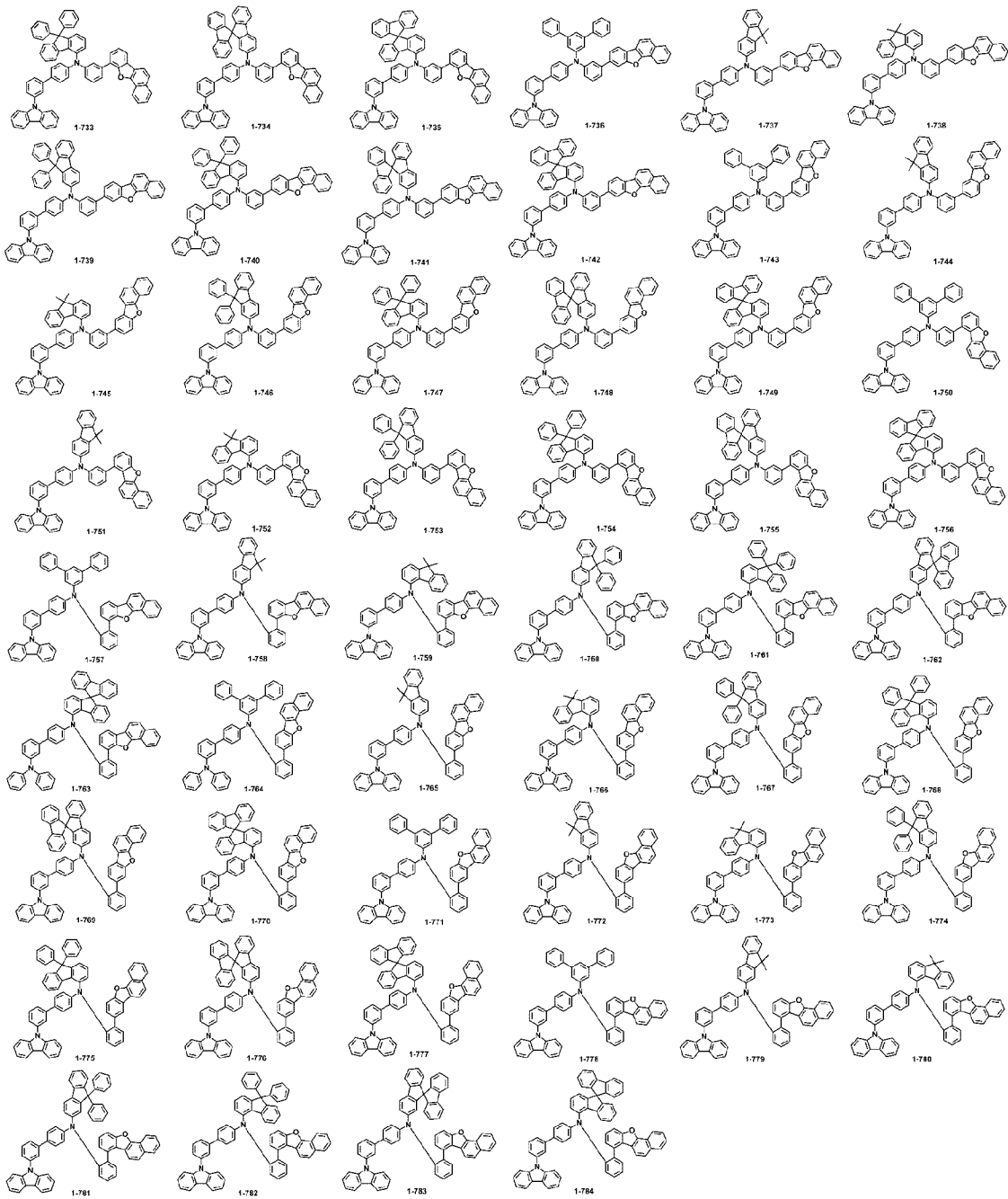
[127]



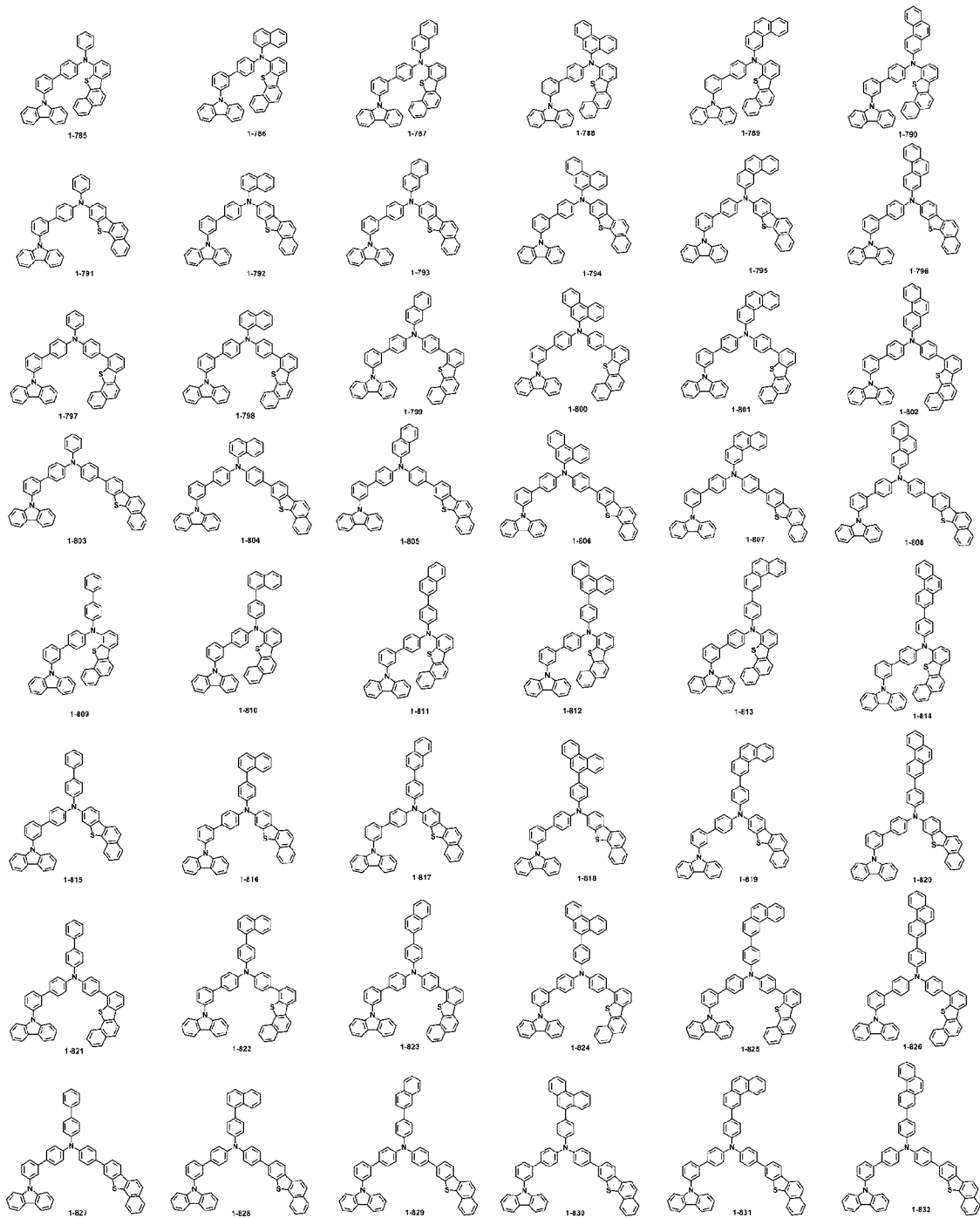
[128]



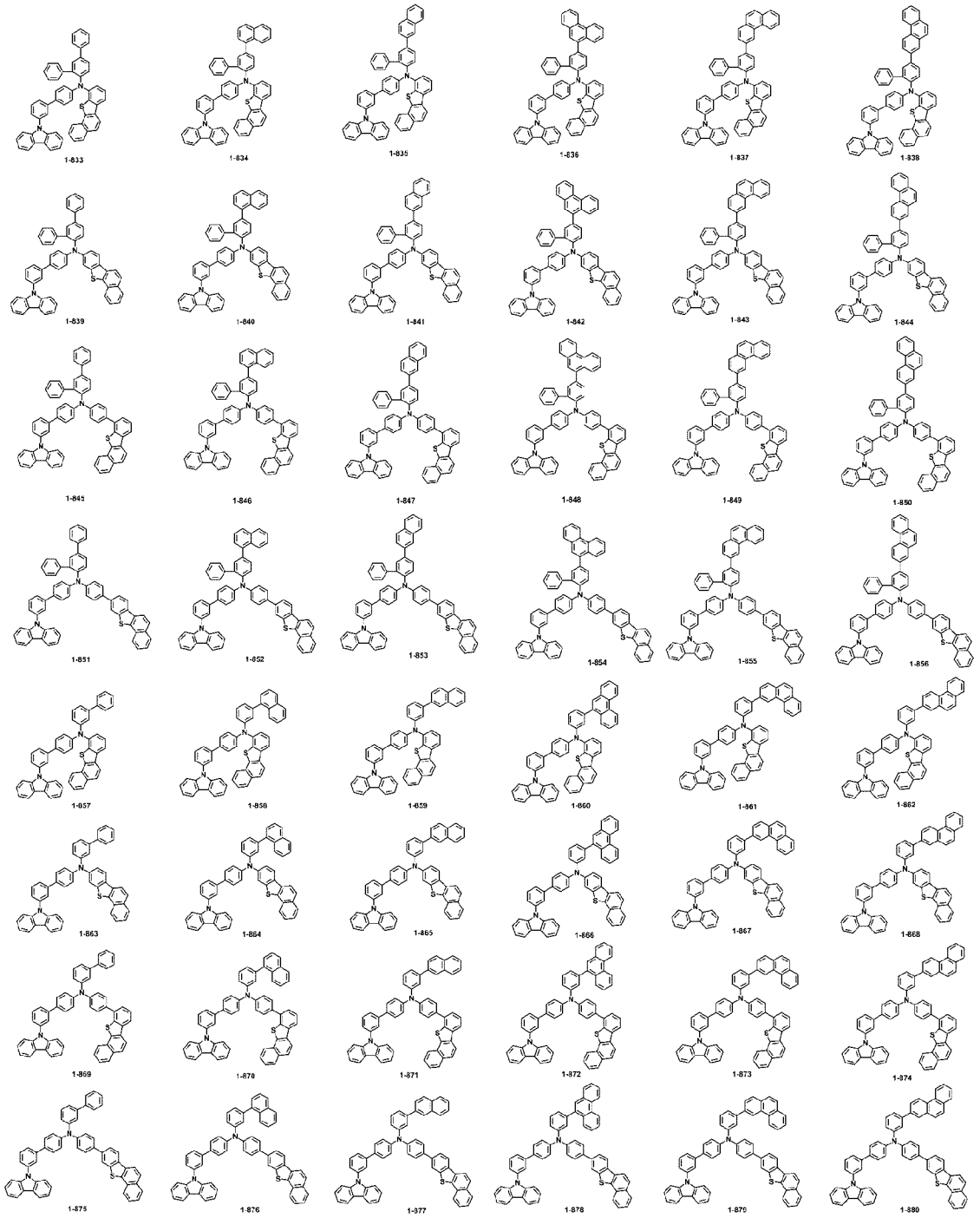
[129]



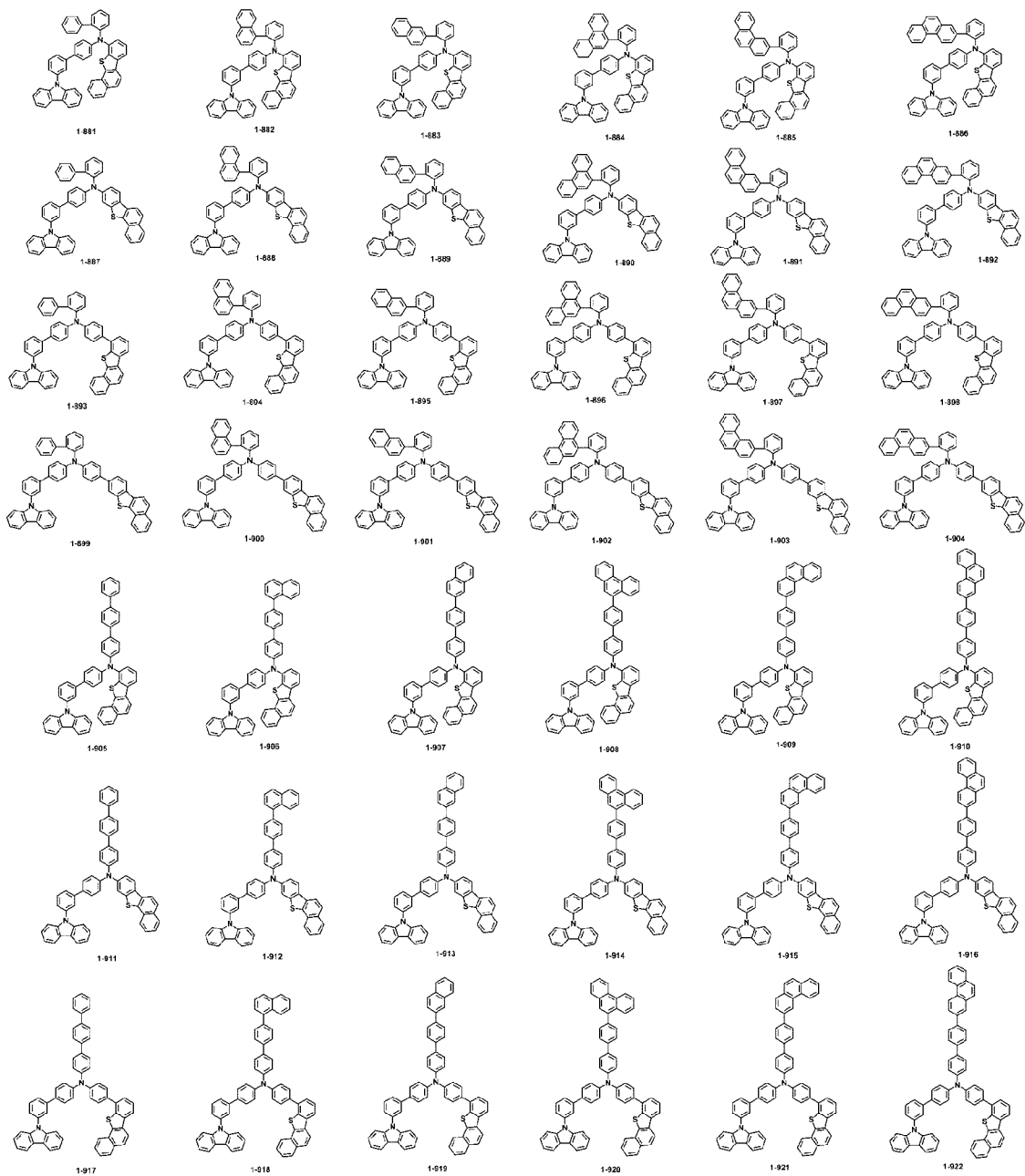
[130]



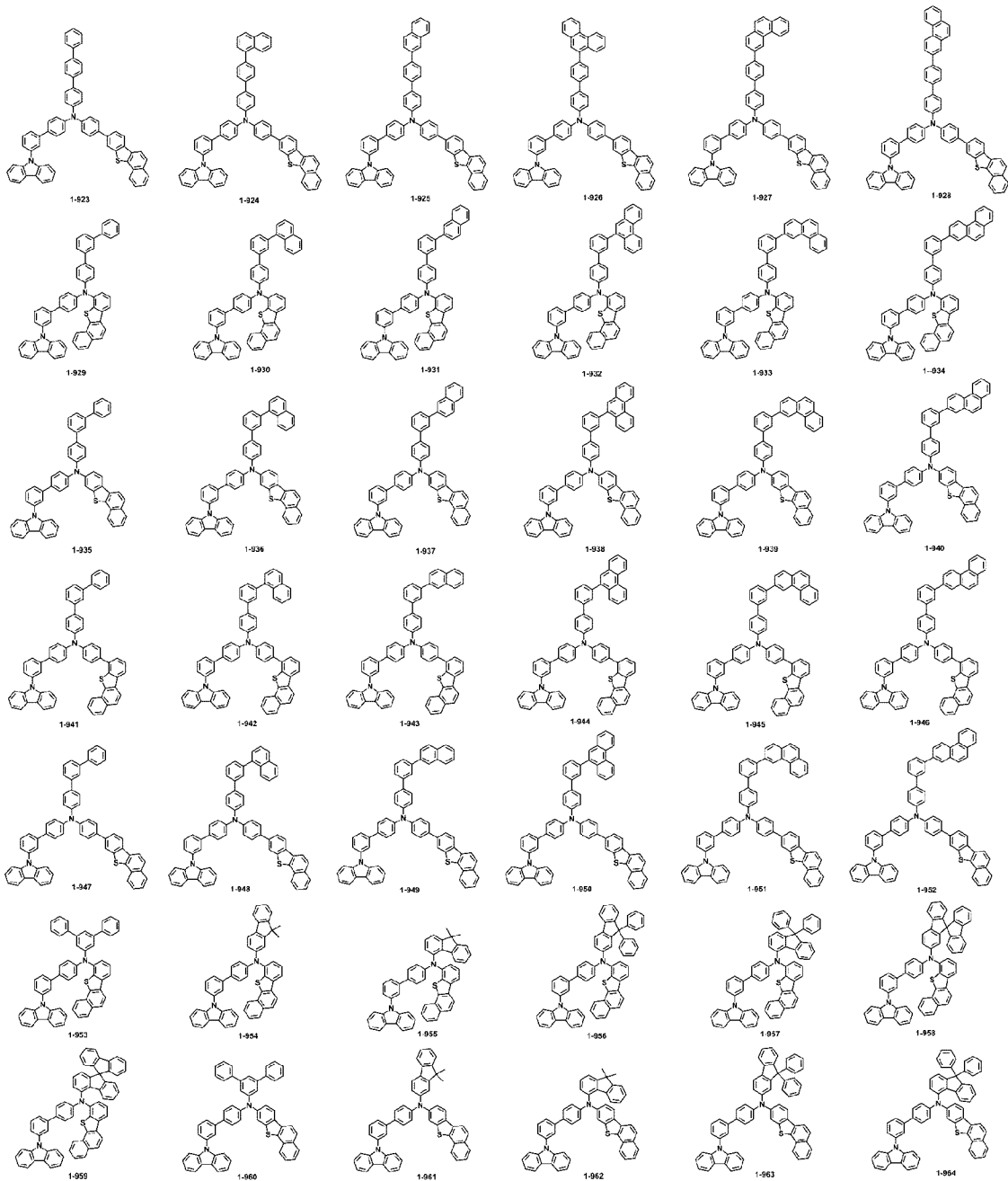
[131]



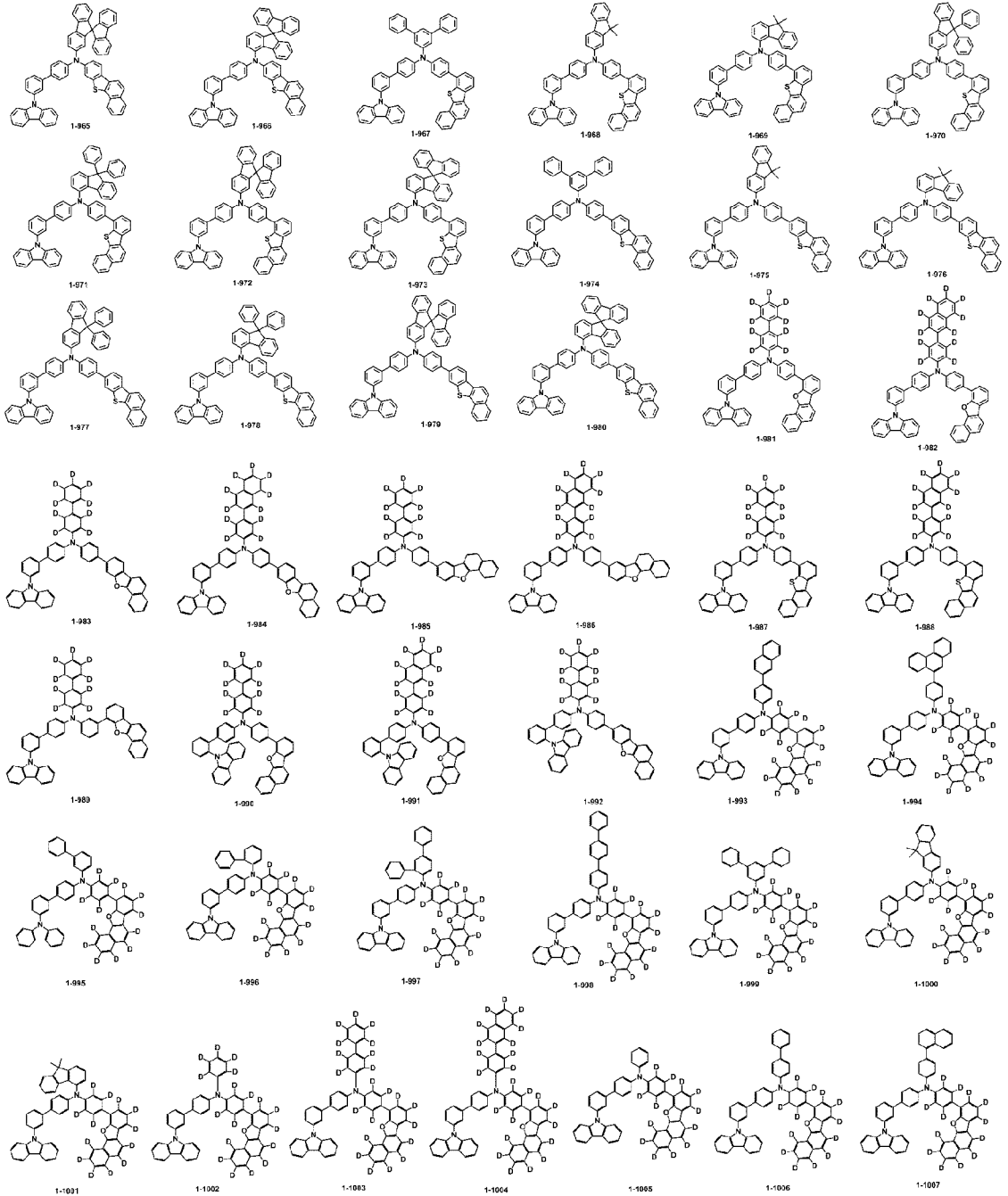
[132]



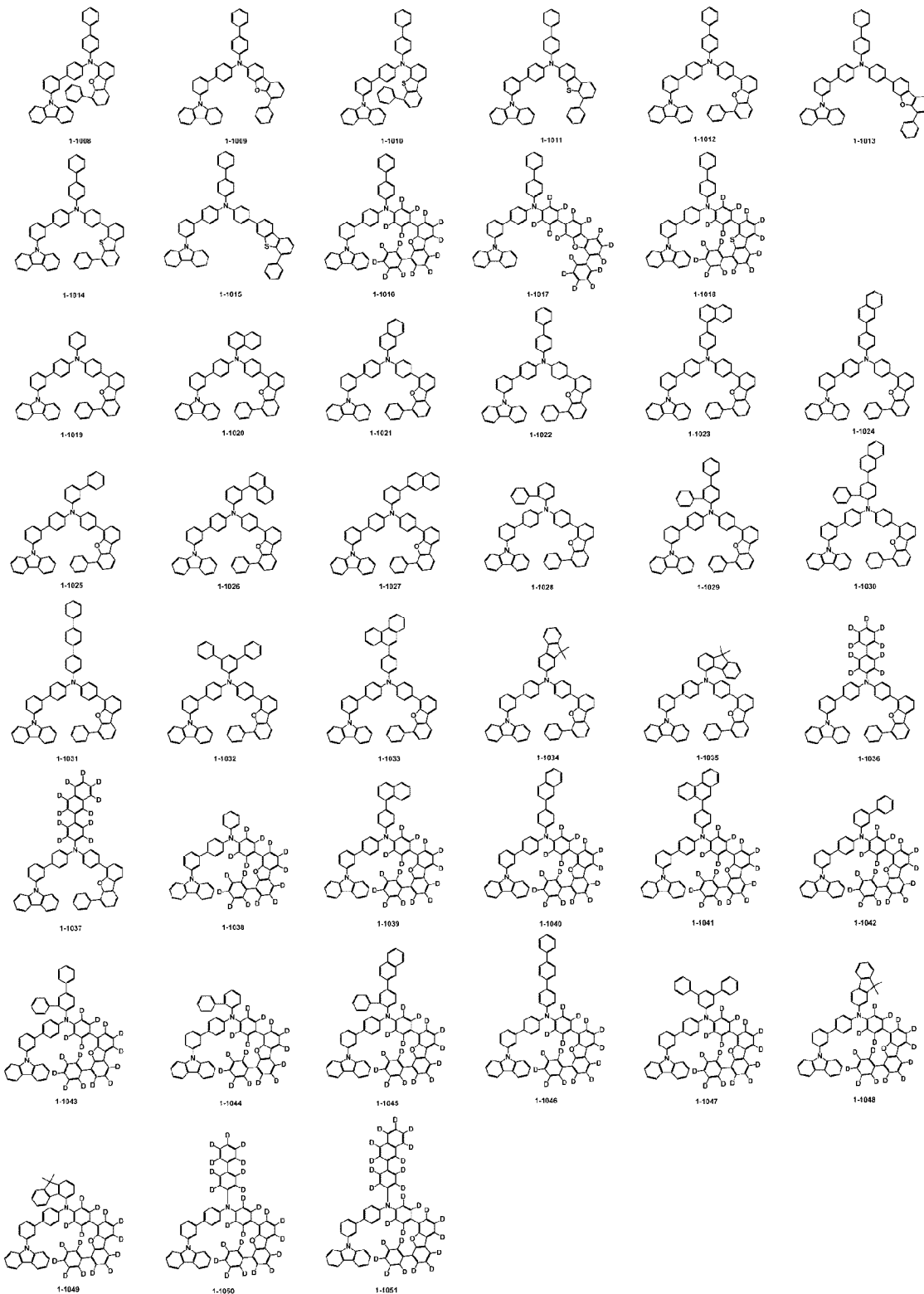
[133]



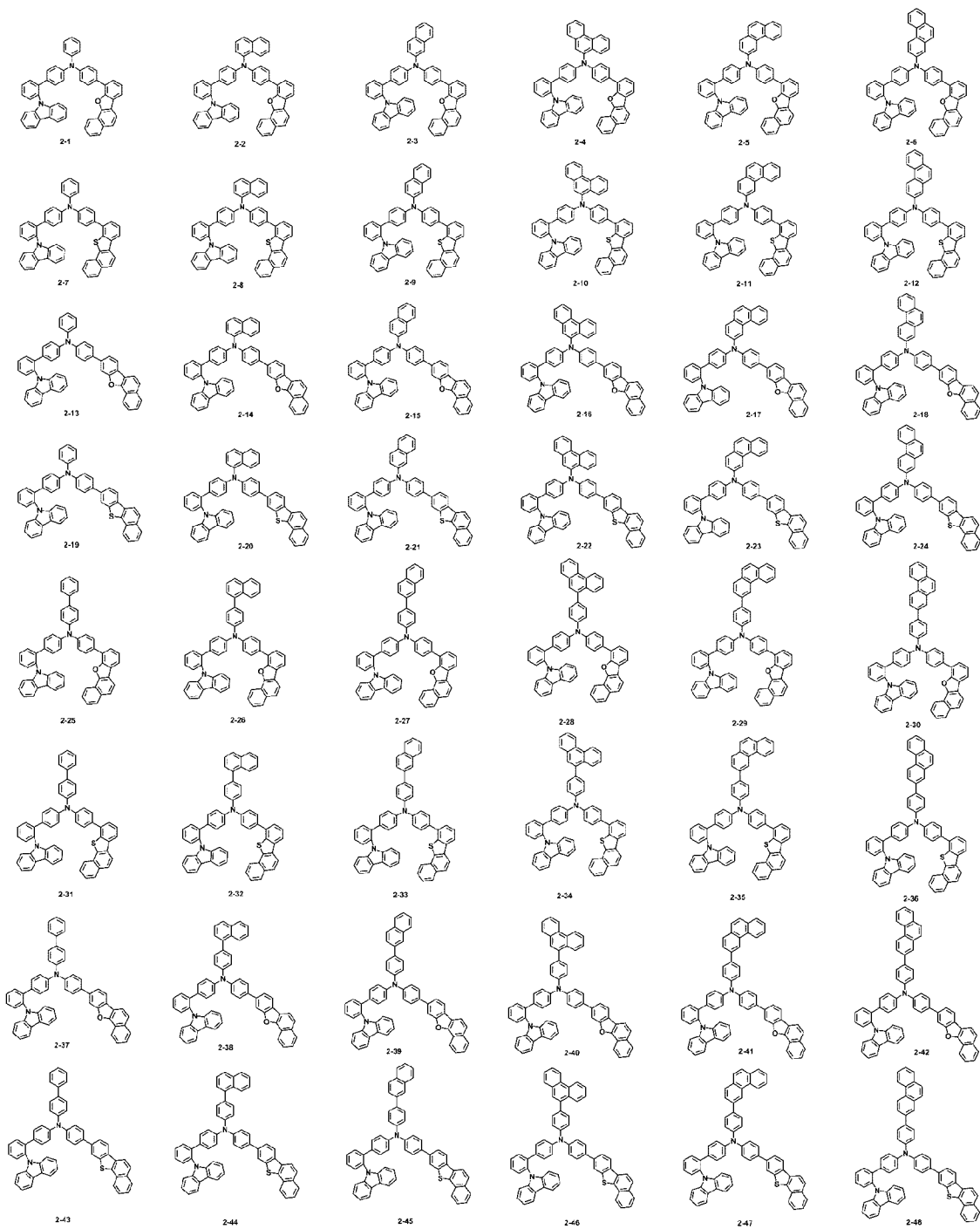
[134]



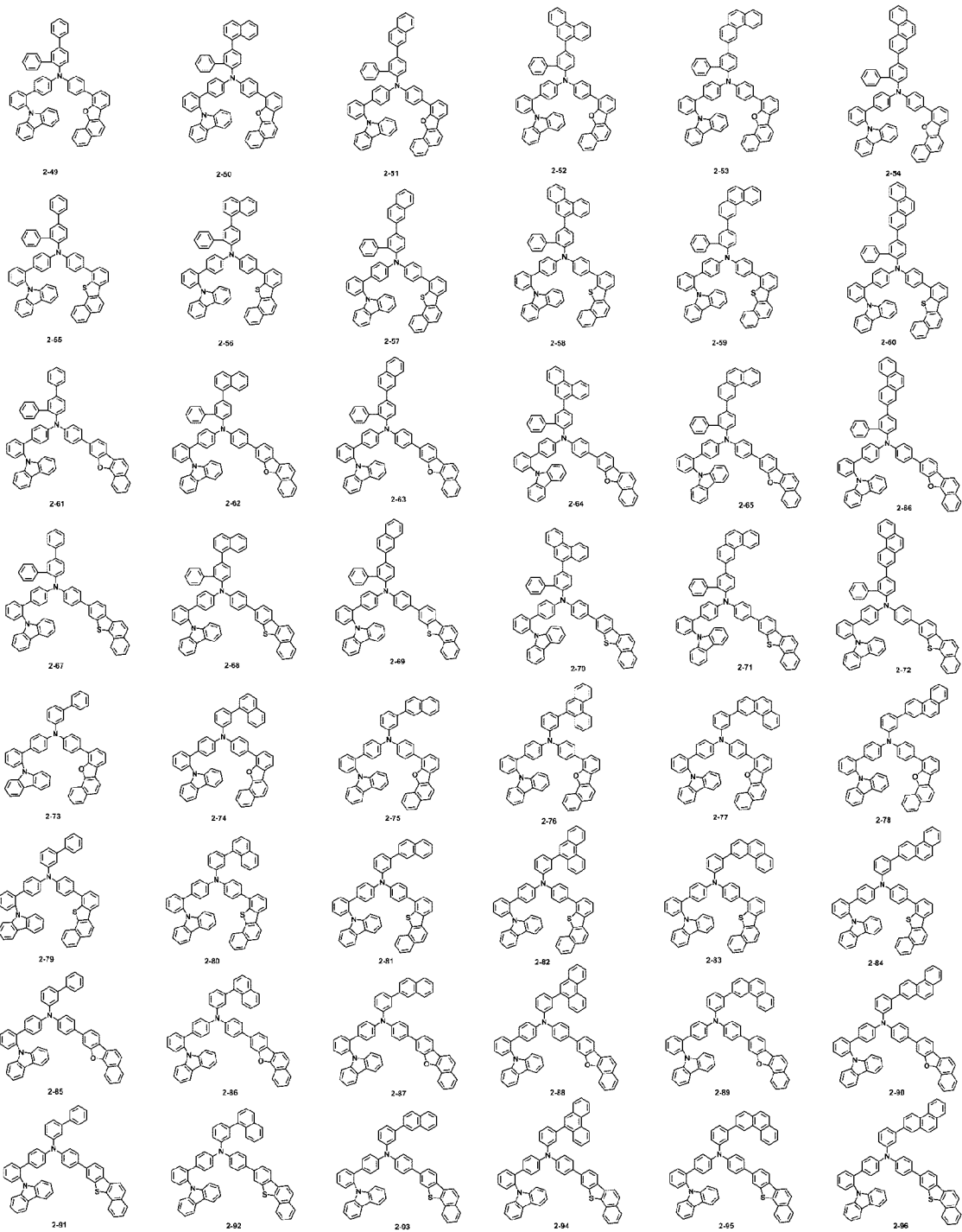
[135]



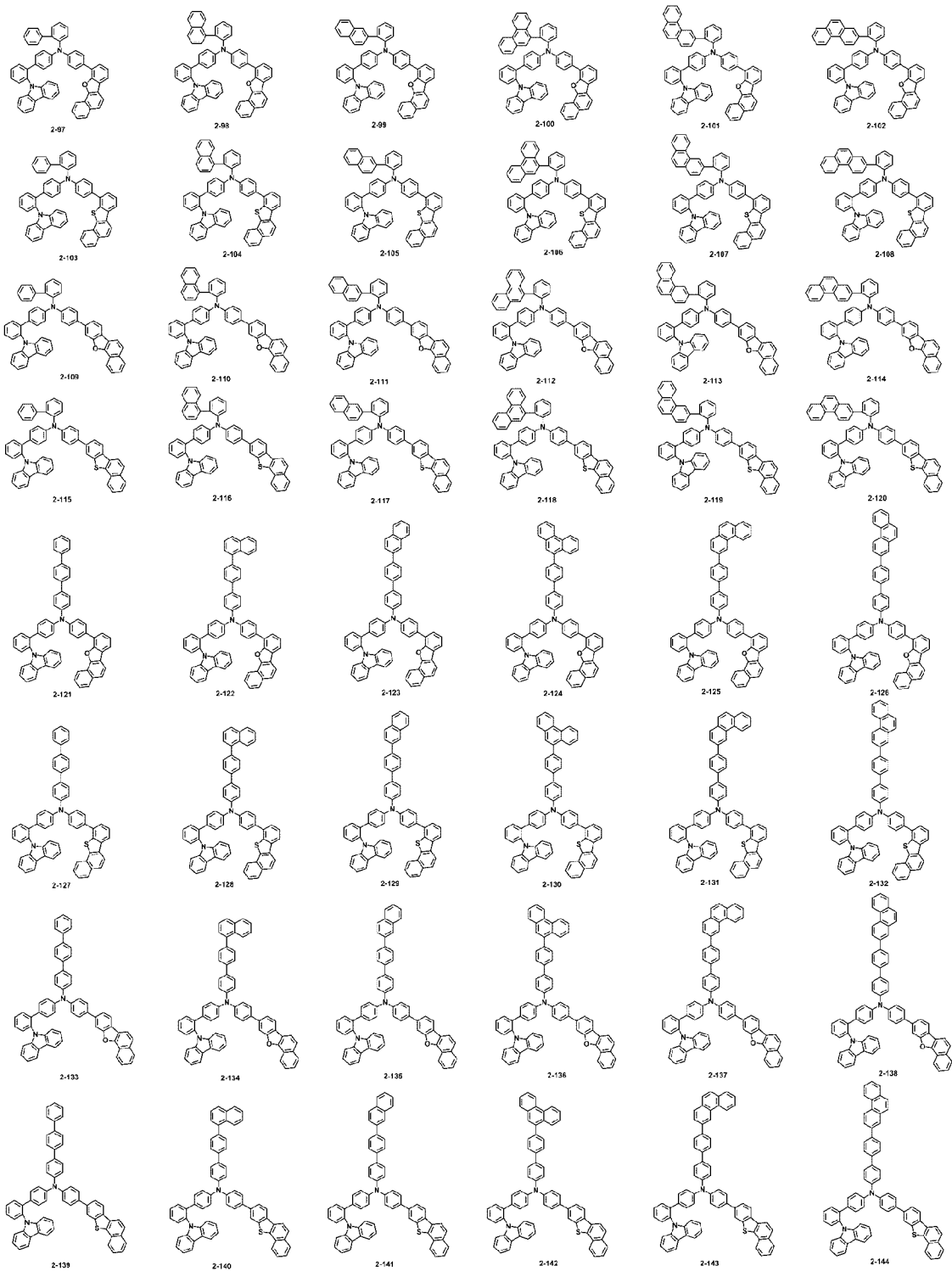
[136]



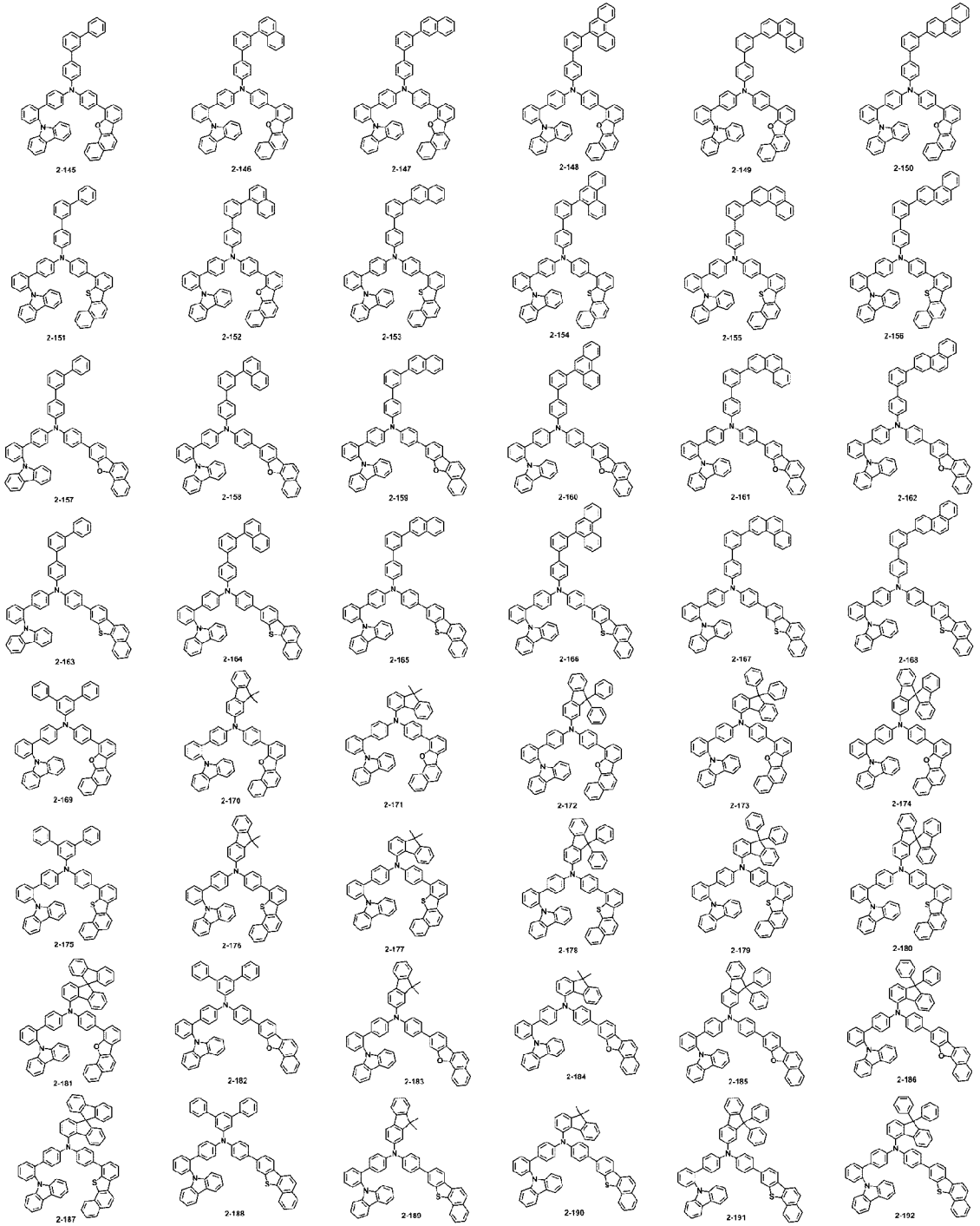
[137]



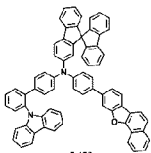
[138]



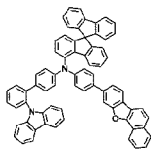
[139]



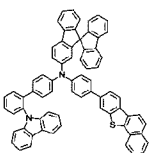
[140]



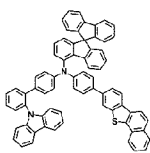
2-193



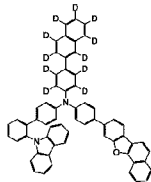
2-194



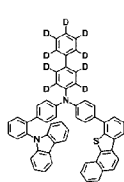
2-195



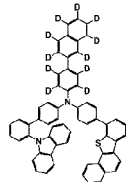
2-196



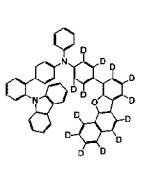
2-197



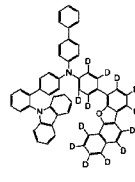
2-198



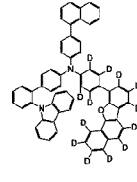
2-199



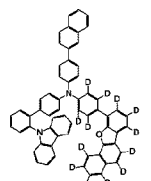
2-200



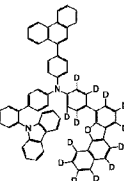
2-201



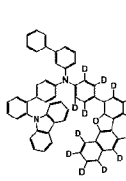
2-202



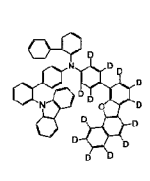
2-203



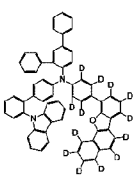
2-204



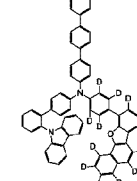
2-205



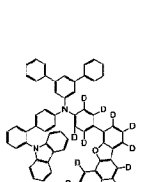
2-206



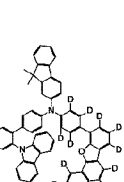
2-207



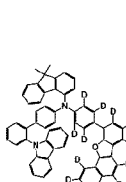
2-208



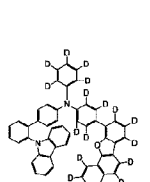
2-209



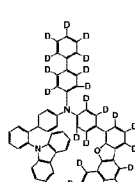
2-210



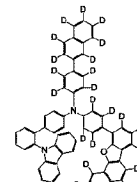
2-211



2-212

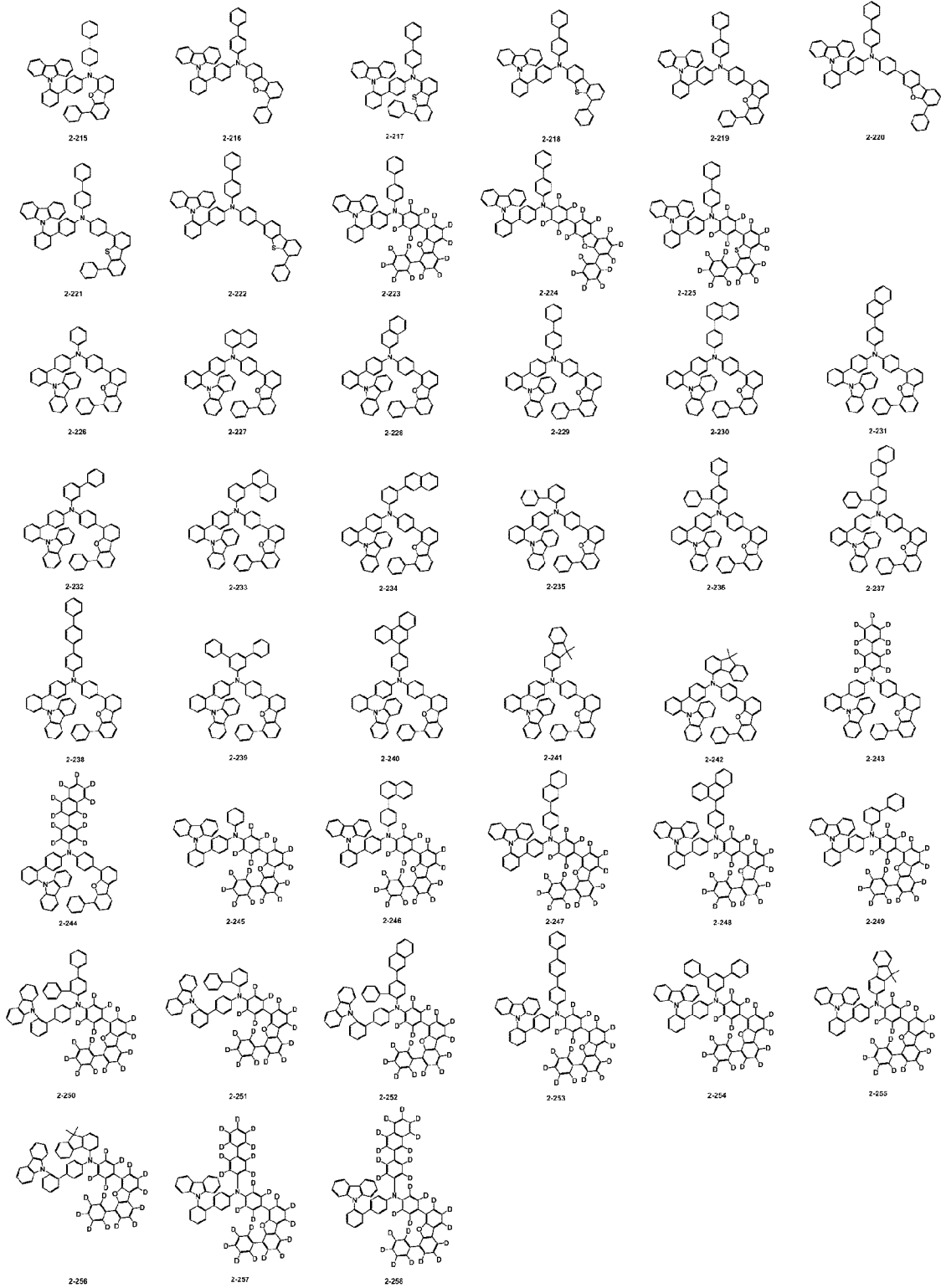


2-213



2-214

[141]



[142] 본 발명의 상기 화학식 1의 화합물은 정공수송보조층 물질로 유용하게 사용될 수 있다.

[143] 상기 유기화합물을 유기전계발광소자의 재료로 이용 시, 발광효율, 수명 등 대부분의 소자 특성에서 동등 또는 우수한 특성을 나타낼 수 있다.

[144] 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를

제공한다.

[145] 본 발명의 유기화합물은 정공수송보조층용 재료로 유용하게 사용될 수 있다.

[146] 또한, 본 발명은 음극과 양극 사이에 적어도 발광층을 포함하는 일층 또는 복수층으로 이루어지는 유기 박막층이 적층되어 있는 유기전계발광소자에 있어서, 상기 유기 박막층은 상기 제1전극 및 발광층 사이의 정공수송층 및/또는 정공수송보조층이다.

[147] 상기 정공수송층 및/또는 정공수송보조층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이다.

[148] 상기 정공수송보조층은 정공수송층과 발광층 사이의 HOMO 에너지 레벨 차이를 줄임으로써 정공의 주입 특성을 조절하여 정공수송보조층과 발광층의 계면에서 정공이 축적되는 것을 감소시켜 계면에서 폴라론(polaron)에 의한 엑시톤이 소멸되는 소광 현상(quenching)을 줄일 수 있다. 이에 따라 소자의 열화현상이 감소하고 소자가 안정화되어 효율 및 수명을 개선할 수 있다.

[149] 상기 유기전계발광소자는 양극, 정공주입층, 정공수송층, 정공수송보조층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 및 음극이 적층된 구조를 가질 수 있으며, 필요에 따라 전자수송보조층이 추가로 더 적층될 수 있다.

[150] 이하에서, 본 발명의 유기전계발광소자에 대하여 예를 들어 설명한다. 그러나, 하기에 예시된 내용이 본 발명의 유기전계발광소자를 한정하는 것은 아니다.

[151] 본 발명의 유기전계발광소자는 양극(정공주입전극), 정공주입층(HIL), 정공수송층(HTL), 정공수송보조층, 발광층(EML) 및 음극(전자주입전극)이 순차적으로 적층된 구조를 가질 수 있으며, 바람직하게는, 양극과 발광층 사이에 정공수송보조층을, 그리고 음극과 발광층 사이에 전자수송층(ETL), 전자주입층(EIL)을 추가로 포함할 수 있다. 또한 음극과 발광층 사이에 전자수송보조층을 더 포함할 수도 있다.

[152] 본 발명에 따른 유기전계발광소자의 제조방법으로는, 먼저 기판 표면에 양극용 물질을 통상적인 방법으로 코팅하여 양극을 형성한다. 이때, 사용되는 기판은 투명성, 표면 평활성, 취급 용이성 및 방수성이 우수한 유리기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다. 또한, 양극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 등이 사용될 수 있다.

[153] 다음으로, 상기 양극 표면에 정공주입층(HIL) 물질을 통상적인 방법으로 진공 열증착 또는 스펀 코팅하여 정공주입층을 형성한다. 이러한 정공주입층 물질로는 구리프탈로시아닌(CuPc),

4,4',4"-트리스(3-메틸페닐아미노)트리페닐아민(m-MTDATA),

4,4',4"-트리스(3-메틸페닐아미노)페녹시벤젠(m-MTDAPB),

스타버스트(starburst)형 아민류인 4,4',4"-트리(N-카바졸릴)트리페닐아민(TCTA),

4,4',4"-트리스(N-(2-나프틸)-N-페닐아미노)-트리페닐아민(2-TNATA) 또는

이데미츠사(Idemitsu)에서 구입가능한 IDE406을 예로 들 수 있다.

- [154] 상기 정공주입층 표면에 정공수송층 물질을 통상적인 방법으로 진공 열증착 또는 스핀 코팅하여 정공수송층을 형성한다. 상기 정공수송층 물질은 일반적으로 사용되는 정공수송층 물질을 사용할 수도 있다.
- [155] 상기 정공수송층 표면에 본 발명에 따른 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 진공 열증착 또는 스핀 코팅하여 정공수송보조층을 형성할 수 있다. 상기 정공수송보조층은, 앞서 설명한 바와 같이 본 발명에 따른 화합물을 정공수송보조층 물질로 이용할 수 있으며, 통상적으로 사용되는 정공수송보조층 물질을 사용하여, 정공수송보조층을 형성할 수 있다.
- [156] 상기 정공수송보조층 표면에 발광층(EML) 물질을 통상적인 방법으로 진공 열증착 또는 스핀 코팅하여 발광층을 형성한다. 이때, 사용되는 발광층 물질 중 단독 발광물질 또는 발광 호스트 물질은 녹색의 경우 트리스(8-하이드록시퀴놀리놀라토)알루미늄(Alq₃) 등이 사용될 수 있으며, 청색의 경우 Alq₃, CBP(4,4'-N,N'-dicabazole-biphenyl, 4,4'-N,N'-디카바졸 -비페닐), PVK(poly(n-vinylcabazole), 폴리 (n-비닐카바졸)), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene, 9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센), TCTA, TPBI(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene, 1,3,5-트리스(N-페닐벤즈이미다졸-2-일) 벤젠), TBADN(3-tert-butyl-9,10-di(naphth-2-yl) anthracene, 3-tert-부틸-9,10-디(나프트-2일) 안트라센), E3, DSA(distyrylarylene, 디스티릴아릴렌) 또는 이들의 2 이상의 혼합물을 사용할 수 있으나, 이에 국한되는 것은 아니다.
- [157] 발광층 물질 중 발광 호스트와 함께 사용될 수 있는 도펀트(Dopant)(dopant)의 경우, 이데미츠사(Idemitsu)에서 구입 가능한 IDE102, IDE105, 인광 도펀트(Dopant)로는 트리스(2-페닐피리딘)이리듐(III)(Ir(ppy)₃), 이리듐(III)비스[(4,6-다이플루오로페닐)피리디나토-N,C-2']피콜린산염(FIrpc) (참조문헌[Chihaya Adachi et al., Appl. Phys. Lett., 2001, 79, 3082-3084]), 플라티늄(II)옥타에틸포르피린(PtOEP), TBE002(코비온사) 등이 사용될 수 있다.
- [158] 상기 발광층 표면에 전자수송층(ETL) 물질을 통상적인 방법으로 진공 열증착 또는 스핀 코팅하여 전자수송층을 형성한다. 이때, 사용되는 전자수송층 물질의 경우 특별히 제한되지 않으며, 바람직하게는 트리스(8-하이드록시퀴놀리놀라토)알루미늄(Alq₃)을 사용할 수 있다.
- [159] 선택적으로는, 발광층과 전자수송층 사이에 정공차단층(HBL)을 추가로 형성하고 발광층에 인광 도펀트(Dopant)를 함께 사용함으로써, 삼중항 여기자 또는 정공이 전자수송층으로 확산되는 현상을 방지할 수 있다.
- [160] 정공차단층의 형성은 정공차단층 물질을 통상적인 방법으로 진공 열증착 및 스핀 코팅하여 실시할 수 있으며, 정공차단층 물질의 경우 특별히 제한되지는 않으나, 바람직하게는 (8-하이드록시퀴놀리놀라토)리튬(Liq), 비스(8-하이드록시-2-메틸퀴놀리놀라토)-알루미늄비페녹사이드(BAlq),

바쏘쿠프로인 (bathocuproine, BCP) 및 LiF 등을 사용할 수 있다.

[161] 상기 전자수송층 표면에 전자주입층(EIL) 물질을 통상적인 방법으로 진공 열증착 또는 스핀 코팅하여 전자주입층을 형성한다. 이때, 사용되는 전자주입층 물질로는 LiF, Liq, Li₂O, BaO, NaCl, CsF 등의 물질이 사용될 수 있다.

[162] 상기 전자주입층 표면에 음극용 물질을 통상적인 방법으로 진공 열증착하여 음극을 형성한다.

[163] 이때, 사용되는 음극용 물질로는 리튬(Li), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘(Mg), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등이 사용될 수 있다. 또한, 전면 발광 유기전계발광소자의 경우 산화인듐주석(ITO) 또는 산화인듐아연(IZO)를 사용하여 빛이 투과할 수 있는 투명한 음극을 형성할 수도 있다.

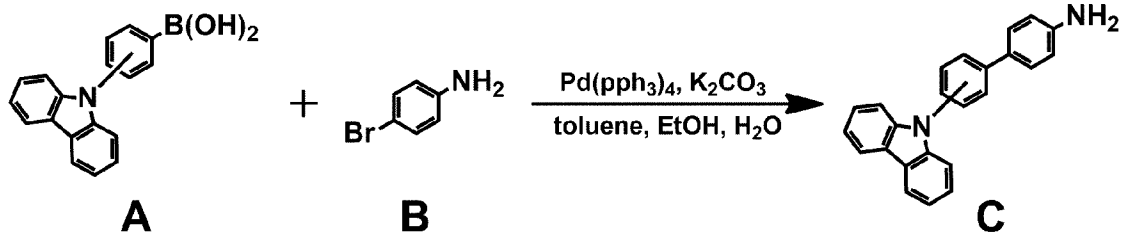
[164] 상기 음극의 표면에는 캡핑층 형성용 조성물에 의해 캡핑층(CPL)이 형성될 수 있다.

[165] 이하에서, 상기 화합물들의 합성 방법을 대표적인 예를 들어 하기에 설명한다. 그러나, 본 발명의 화합물들의 합성 방법이 하기 예시된 방법으로 한정되는 것은 아니며, 본 발명의 화합물들은 하기에 예시된 방법과 이 분야의 공지의 방법에 의해 제조될 수 있다.

[166] [합성에]

[167] 중간체 그룹 C의 합성

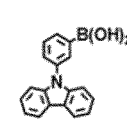
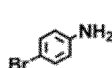
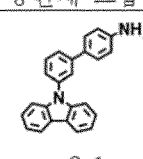
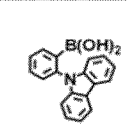
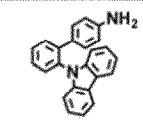
[168]



[169] 질소 기류 하에서 둥근바닥플라스크에 반응물 A(28.7g, 100 mmol), 반응물 B(18.9g, 110 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.31 g, 2.0 mmol), K₂CO₃ (27.6 g, 200 mmol)와 톨루엔(150 mL), 물(80 mL), 에탄올(50 mL)을 넣은 후에 100°C에서 교반 하며 반응을 진행하였다. 반응이 완료되면 유기 층 분리 후 수분제거 하여 필터 한 뒤 실리카겔 컬럼(silica gel column) 및 재결정 방법으로 정제하여 중간체 그룹 C을 제조하였다.

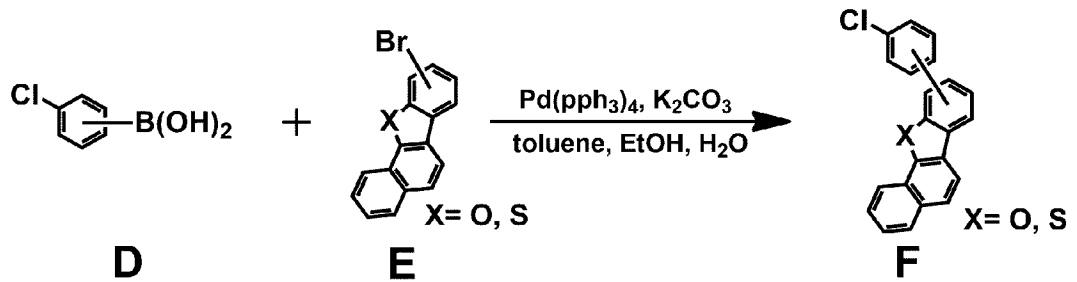
[170] 결과는 하기 표 1과 같다.

[171] [표1]

구분	반응물A	반응물B	중간체 그룹 C	수득량(g)	수율(%)	순도(%)
C-1				24.4	73	98.6
C-2				19.7	59	98.9

[172] 중간체 그룹 F의 합성

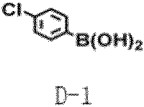
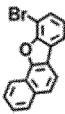
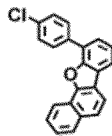
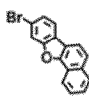
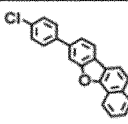
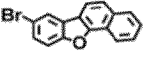
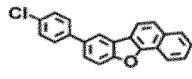

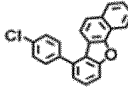
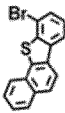
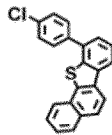
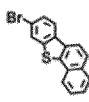
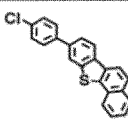
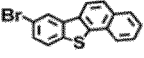
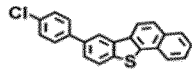
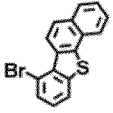
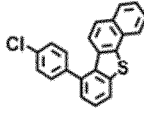
[173]



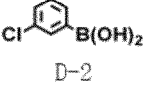
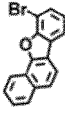
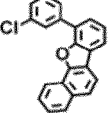

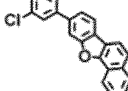
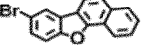
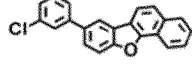

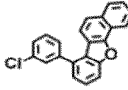
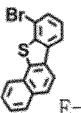
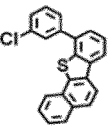
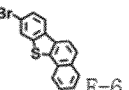
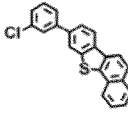
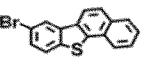
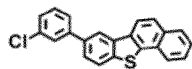
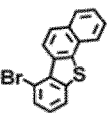
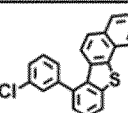
[174] 질소 기류 하에서 둥근바닥플라스크에 반응물D(17.2g, 110 mmol), 반응물E(29.7g, 100 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.31 g, 2.0 mmol), K₂CO₃ (27.6 g, 200 mmol)와 톨루엔(150 mL), 물(80 mL), 에탄올(50 mL)을 넣은 후에 100°C에서 교반하며 반응을 진행하였다. 반응이 완료되면 유기 층 분리 후 수분제거 하여 필터한 뒤 실리카겔 컬럼(silica gel column) 및 재결정 방법으로 정제하여 중간체 그룹 F을 제조하였다.

[175] 결과는 하기 표 2와 같다.

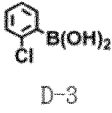
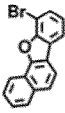
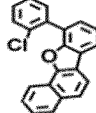

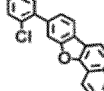
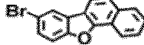
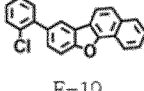

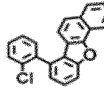
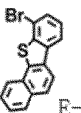
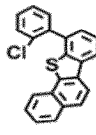
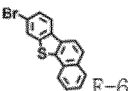
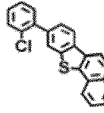
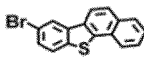
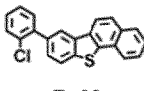
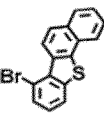
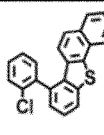
[176] [표2]

구분	반응물D	반응물E	중간체 그룹F	수득량 (g)	수율 (%)	순도 (%)
F-1	 D-1	 E-1	 F-1	25.9	79	99.1
F-2		 E-2	 F-2	24.7	75	99.2
F-3		 E-3	 F-3	26.6	81	99.1
F-4		 E-4	 F-4	23.3	71	98.9
F-5		 E-5	 F-5	25.223.8	73	98.7
F-6		 E-6	 F-6	23.8	69	98.6
F-7		 E-7	 F-7	24.8	72	99.1
F-8		 E-8	 F-8	23.4	68	98.5

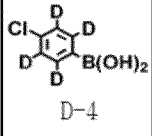
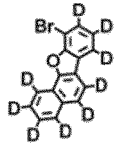
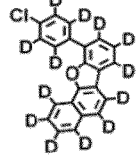
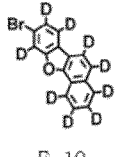
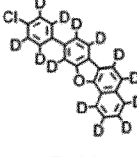
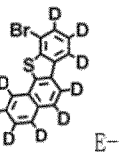
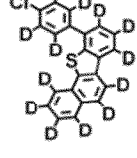
[177]

F-9	 D-2	 E-1	 F-9	24.7	75	97.8
F-10		 E-2	 F-10	20.7	63	99.3
F-11		 E-3	 F-11	22.7	69	97.9
F-12		 E-4	 F-12	26.0	79	98.2
F-13		 E-5	 F-13	21.4	62	98.4
F-14		 E-6	 F-14	23.4	68	98.0
F-15		 E-7	 F-15	22.8	66	97.8
F-16		 E-8	 F-16	20.3	59	99.0

[178]

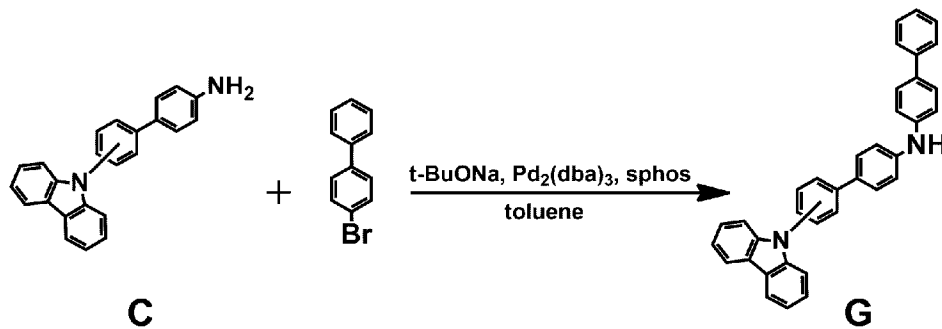
F-17	 D-3	 E-1	 F-17	18.4	56	97.6
F-18		 E-2	 F-18	18.1	55	98.4
F-19		 E-3	 F-19	19.1	58	99.1
F-20		 E-4	 F-20	17.1	52	97.8
F-21		 E-5	 F-21	20.3	59	97.9
F-22		 E-6	 F-22	17.6	51	98.1
F-23		 E-7	 F-23	10.3	56	98.3
F-24		 E-8	 F-24	18.3	53	98.6

[179]

F-25	 D-4	 E-9	 F-25	19.5	59	98.5
F-26		 E-10	 F-26	19.8	62	97.9
F-27		 E-11	 F-27	17.8	52	98.5

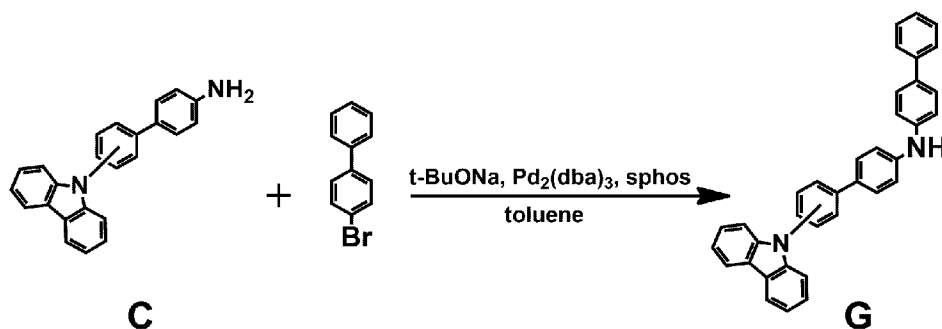
[180] 중간체 그룹 G의 합성

[181]



[182] 중간체 그룹 G의 합성

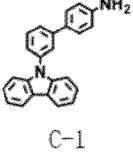

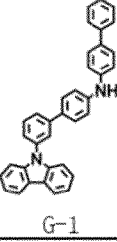
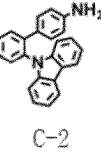
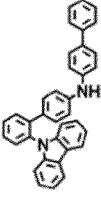
[183]



[184] 질소 기류 하에서 둥근바닥플라스크에 중간체 C (33.4 g, 100 mmol), 4-브로모바이페닐 (4-bromobiphenyl, 25.6 g, 110 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.83 g, 2.0 mmol), t-BuONa (19.2 g, 200 mmol), SPhos (1.64 g, 4.0 mmol)와 톨루엔 (480 mL)을 넣은 후에 100°C에서 교반하며 반응을 진행하였다. 반응이 완료되면 메탄올에 넣어 침전시킨 후 침전물을 필터 한 뒤 실리카겔 컬럼(silicagel column) 및 재결정 방법으로 정제하여 중간체 그룹 G를 제조하였다.

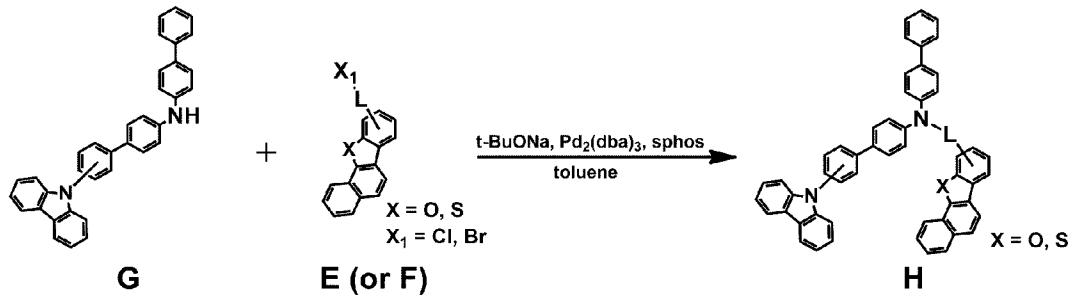
[185] 결과는 하기 표 3과 같다.

[186] [표3]

구분	중간체 C	반응물	중간체 그룹 G	수득량 (g)	수율 (%)	순도 (%)
G-1	 C-1	 Br	 G-1	37.0	76	99.3
G-2	 C-2		 G-2	38.4	79	99.5

[187] 화합물 그룹H의 합성

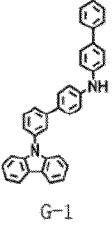
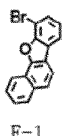
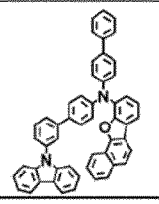
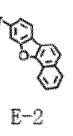
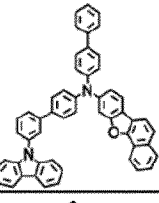
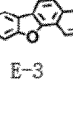
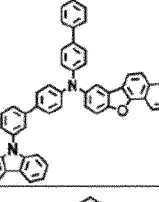
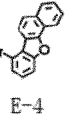
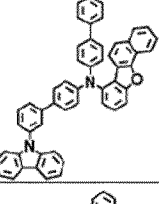
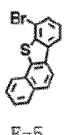
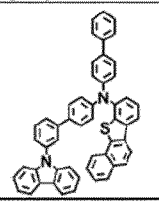
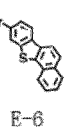
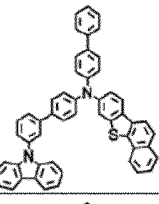
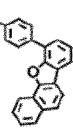
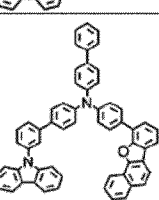
[188]



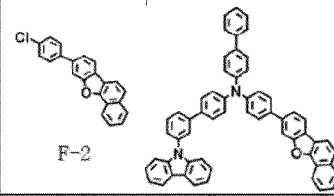
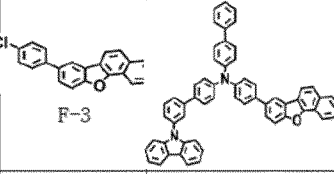
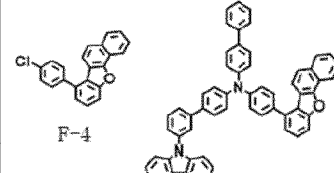
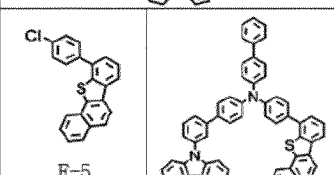
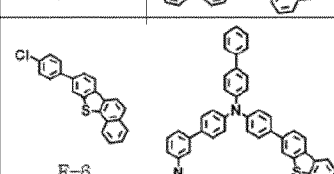
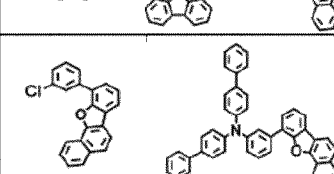
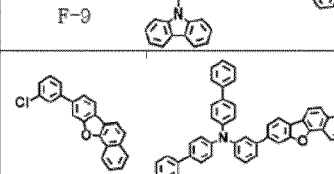
[189] 질소 기류 하에서 둥근바닥플라스크에 중간체 G (4.86 g, 10 mmol), 중간체 E(혹은 F) (11 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.183 g, 0.2 mmol), t-BuONa (1.92 g, 20 mmol), SPhos (0.164 g, 0.4 mmol)와 톨루엔 (60 mL)을 넣은 후에 100°C에서 교반하며 반응을 진행하였다. 반응이 완료되면 메탄올에 넣어 침전시킨 후 침전물을 필터한 뒤 실리카겔 컬럼(silicagel column) 및 재결정 방법으로 정제하여 화합물 그룹H를 제조하였다.

[190] 결과는 하기 표 4와 같다.

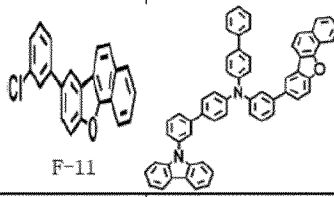
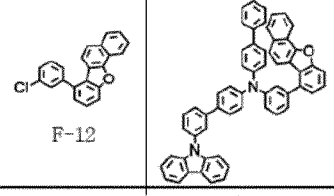
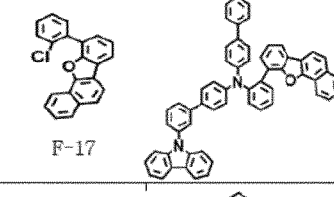
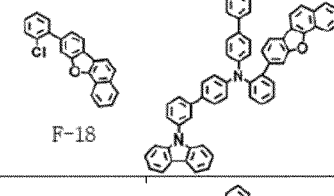
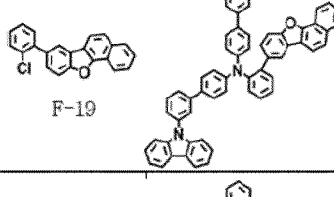
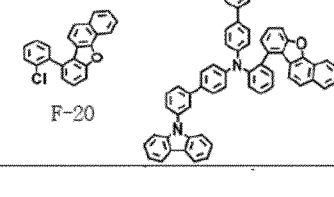
[191] [표4]

구분	중간체 G	중간체 그룹 E, F	화합물 그룹H	수득량 (g)	수율(%)	순도(%)	MS[M+H] ⁺
화합물 1-97	 G-1	 E-1		4.56	65	99.96	703.27
화합물 1-103		 E-2		4.77	68	99.95	703.27
화합물 1-109		 E-3		4.14	59	99.93	703.28
화합물 1-115		 E-4		4.84	69	99.94	703.27
화합물 1-809		 E-5		5.17	72	99.92	719.25
화합물 1-815		 E-6		5.02	70	99.97	719.24
화합물 1-121		 F-1		5.84	75	99.91	779.30

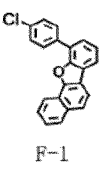
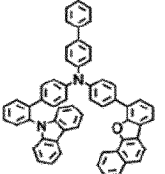
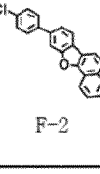
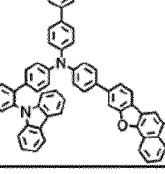
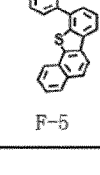
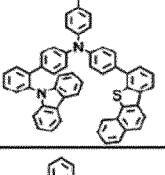
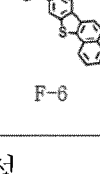
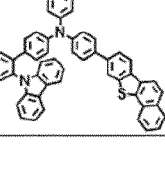
[192]

화합물 1-127		5.60	72	99.95	779.30
화합물 1-133		5.37	69	99.92	779.29
화합물 1-139		4.51	58	99.94	779.30
화합물 1-821		6.20	78	99.98	795.27
화합물 1-827		5.88	74	99.96	795.28
화합물 1-145		4.98	64	99.92	779.30
화합물 1-151		5.14	66	99.98	779.29

[193]

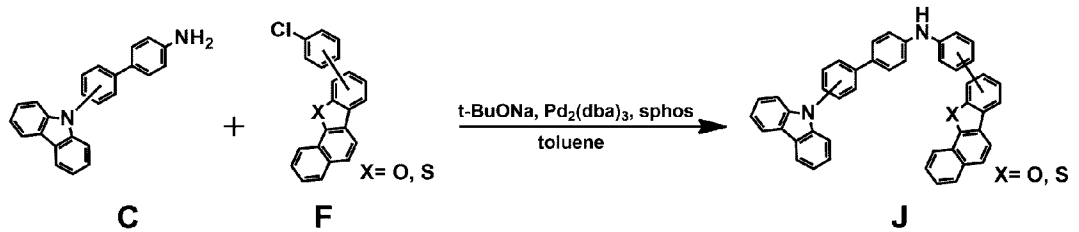
화합물 1-157		4.51	58	99.97	779.30
화합물 1-163		4.05	52	99.90	779.30
화합물 1-169		4.36	56	99.93	779.31
화합물 1-175		4.20	54	99.92	779.30
화합물 1-181		4.51	58	99.90	779.30
화합물 1-187		3.81	49	99.94	779.31

[194]

화합물 2-25	 F-1		5.45	70	99.98	779.30
화합물 2-37	 F-2		5.84	75	99.95	779.30
화합물 2-31	 F-5		6.20	78	99.97	795.28
화합물 2-43	 F-6		5.72	72	99.96	795.27

[195] 중간체 그룹 J의 합성

[196]

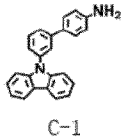
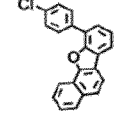
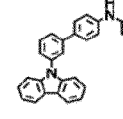
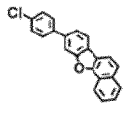
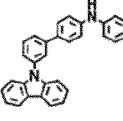
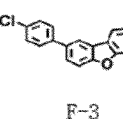
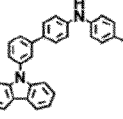
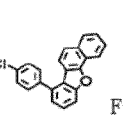
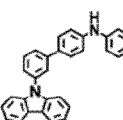
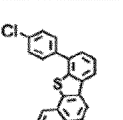
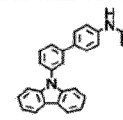
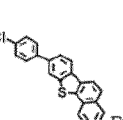
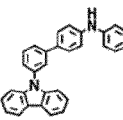
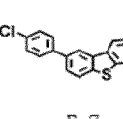
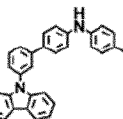
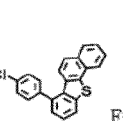
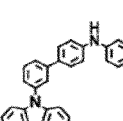
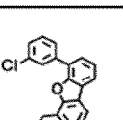
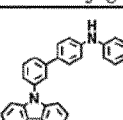


[197] 질소 기류 하에서 둥근바닥플라스크에 중간체 C (33.4 g, 100 mmol), 중간체 F (36.2g, 110 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.83 g, 2.0 mmol), t-BuONa (19.2 g, 200 mmol), SPhos (1.64 g, 4.0 mmol)와 톨루엔 (560 mL)을 넣은 후에 100°C에서 교반하며 반응을 진행하였다. 반응이 완료되면 메탄올에 넣어 침전시킨 후 침전물을 필터 한 뒤 실리카겔 컬럼(silicagel column) 및 재결정 방법으로 정제하여 중간체 그룹 J를 제조하였다.

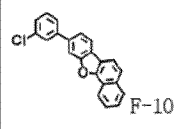
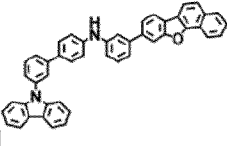
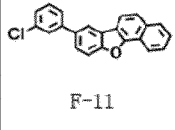
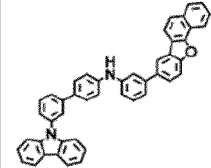
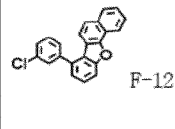
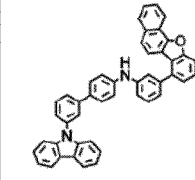
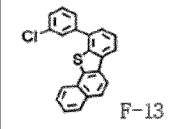
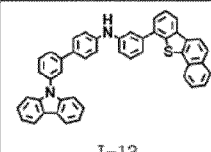
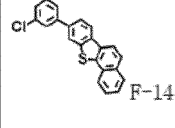
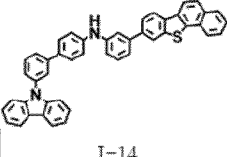
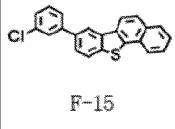
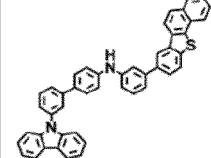
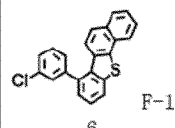
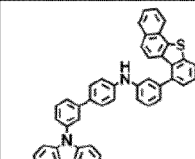
[198]

[199] *결과는 하기 표 5와 같다.

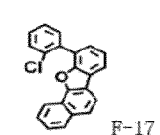
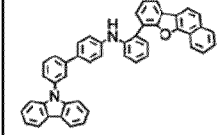
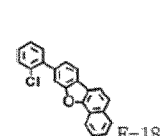
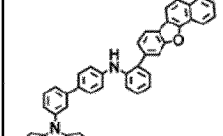
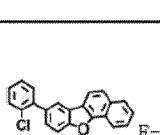
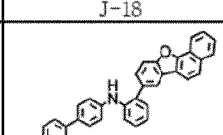
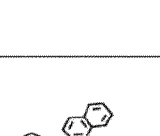
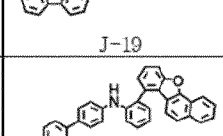
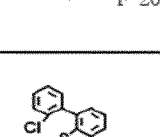
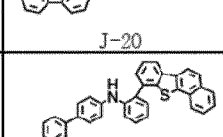
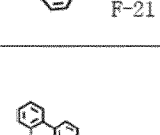
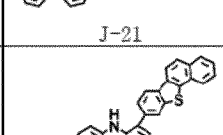
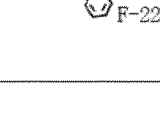
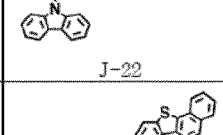
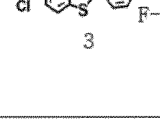
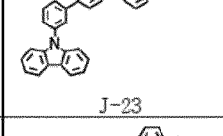
[200] [표5]

구분	중간체 그룹C	중간체 그룹 F	중간체 그룹J	수득양(g)	수율(%)	순도(%)
J-1	 C-1	 F-1	 J-1	40.0	64	99.3
J-2		 F-2	 J-2	44.4	71	99.2
J-3		 F-3	 J-3	36.9	59	99.1
J-4		 F-4	 J-4	45.0	72	99.3
J-5		 F-5	 J-5	43.65	68	99.5
J-6		 F-6	 J-6	39.1	61	99.2
J-7		 F-7	 J-7	38.5	60	99.0
J-8		 F-8	 J-8	46.8	73	99.5
J-9		 F-9	 J-9	36.9	59	99.4

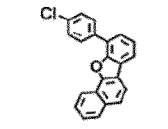
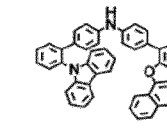
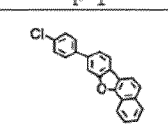
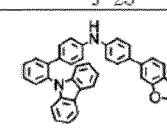
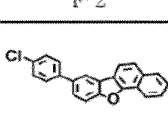
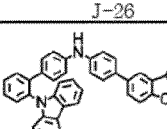
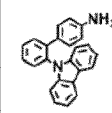
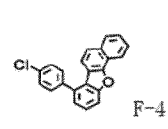
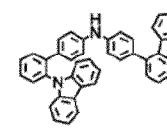
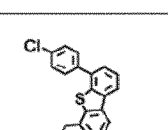
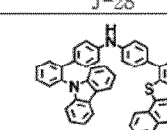
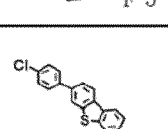
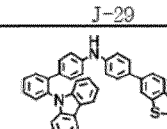
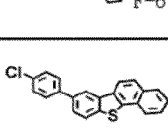
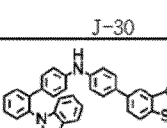
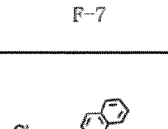
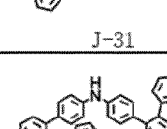
[201]

J-10	 F-10	 J-10	39.4	63	99.2
J-11	 F-11	 J-11	41.3	66	99.6
J-12	 F-12	 J-12	42.5	68	99.4
J-13	 F-13	 J-13	40.4	63	99.0
J-14	 F-14	 J-14	41.0	64	99.3
J-15	 F-15	 J-15	43.6	68	99.1
J-16	 6 F-1	 J-16	45.5	71	99.4

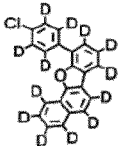
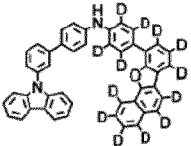
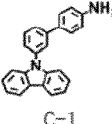
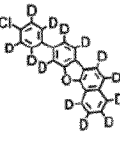
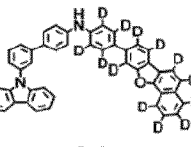
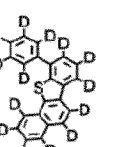
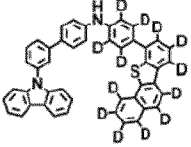
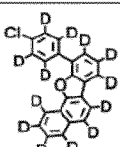
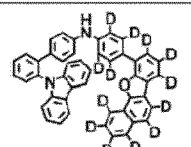
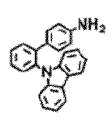
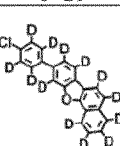
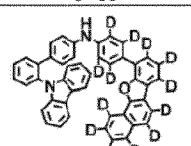
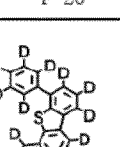
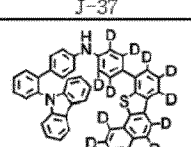
[202]

J-17	 F-17	 J-17	43.8	70	99.0
J-18	 F-18	 J-18	36.9	59	99.1
J-19	 F-19 9	 J-19	40.7	65	99.0
J-20	 F-20	 J-20	38.2	61	99.3
J-21	 F-21	 J-21	38.5	60	99.5
J-22	 F-22	 J-22	37.2	58	99.4
J-23	 F-23 3	 J-23	35.9	56	99.3
J-24	 F-24	 J-24	38.5	60	99.0

[203]

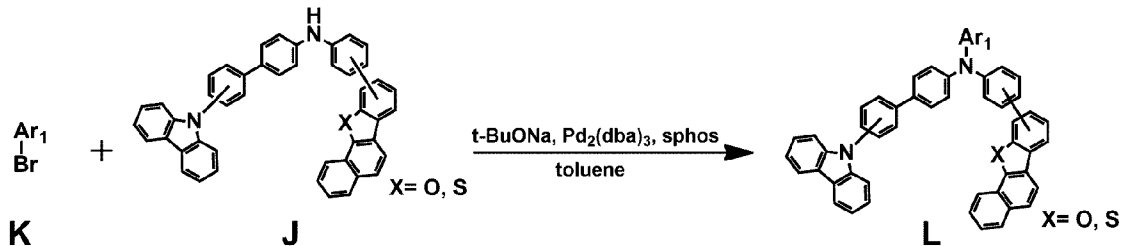
J-25		 F-1	 J-25	45.7	73	99.2
J-26		 F-2	 J-26	43.2	69	99.5
J-27		 F-3	 J-27	42.6	68	99.2
J-28	 C-2	 F-4	 J-28	41.3	66	99.0
J-29		 F-5	 J-29	48.8	76	99.3
J-30		 F-6	 J-30	44.9	70	99.1
J-31		 F-7	 J-31	43.6	68	99.3
J-32		 F-8	 J-32	37.8	59	99.4

[204]

J-33				43.5	68	98.5
J-34				37.7	59	98.7
J-35				45.9	70	99.0
J-36				40.9	64	97.8
J-37				44.1	69	98.4
J-38				38.7	59	98.9

[205] 화합물 그룹L의 합성


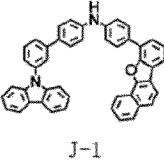
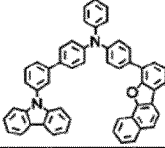

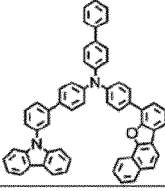

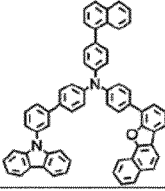

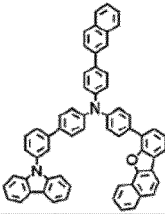

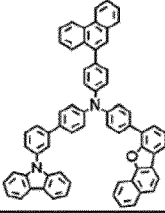

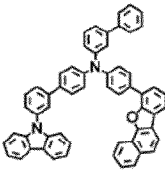

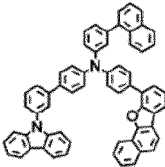
[206]




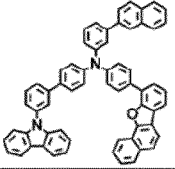

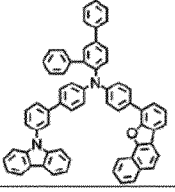

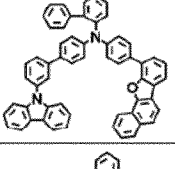
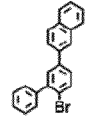
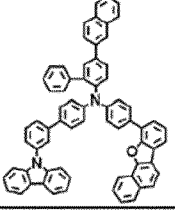
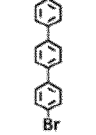
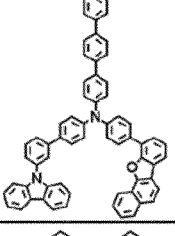

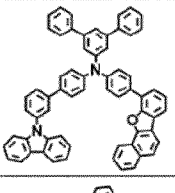
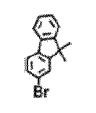
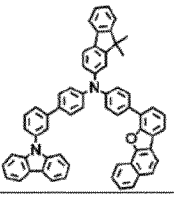
[207] 질소 기류 하에서 둥근바닥플라스크에 반응물 K (11 mmol), 중간체 J(10 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.183 g, 0.2 mmol), t-BuONa (1.92 g, 20 mmol), SPhos (0.164 g, 0.4 mmol)와 톨루엔 (60 mL)을 넣은 후에 100°C에서 교반하며 반응을 진행하였다. 반응이 완료되면 메탄올에 넣어 침전시킨 후 침전물을 필터 한 뒤 실리카겔 컬럼(silicagel column) 및 재결정 방법으로 정제하여 화합물 그룹L을 제조하였다.

[208] 결과는 하기 표 6과 같다.


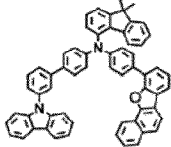

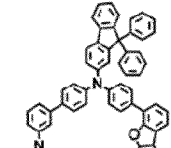

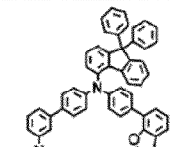

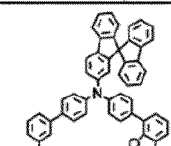

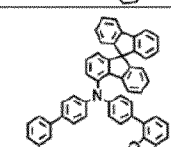

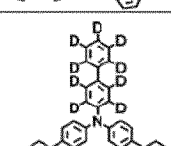

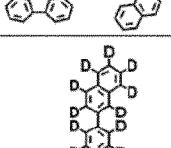
[209] [표6]

구분	반응물K	중간체 그룹J	화합물 그룹L	수득량 (g)	수율 (%)	순도 (%)	MS [M+H] ⁺
화합물 1-1		 J-1		3.65	52	99.95	703.27
화합물 1-121				3.89	50	99.93	779.30
화합물1- 152				3.98	48	99.92	829.32
화합물1- 153				4.64	56	99.95	829.33
화합물1- 160				5.27	60	99.90	879.33
화합물1- 313				4.12	53	99.96	779.30
화합물1- 314				4.64	56	99.95	829.32


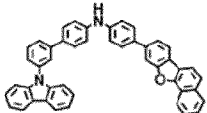
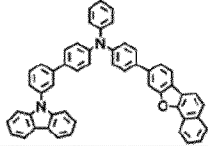

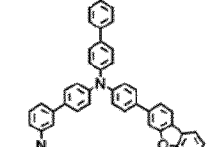

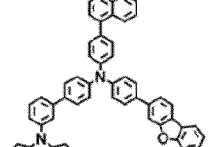

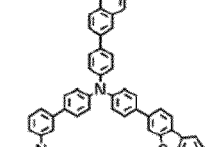

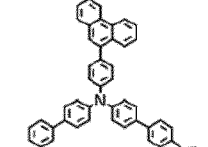

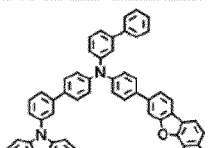

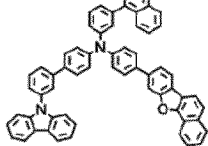
[210]

화합물 1-321			4.47	54	99.90	829.32
화합물 1-217			4.19	49	99.94	855.33
화합물 1-409			4.36	56	99.95	779.31
화합물 1-285			5.25	58	99.96	905.35
화합물 1-505			4.87	57	99.98	905.36
화합물 1-701			4.78	56	99.92	905.35
화합물 1-702			4.66	57	99.92	819.33


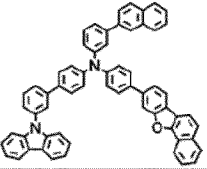

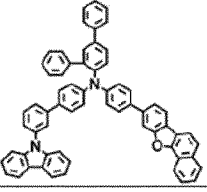

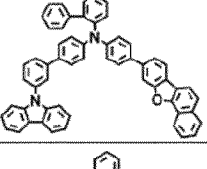

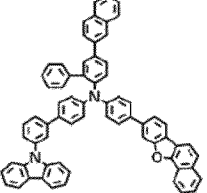

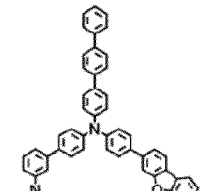

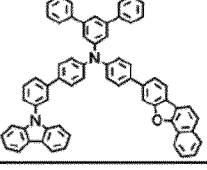

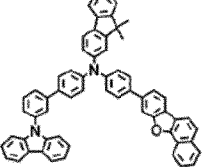
[211]

화합물 1-703			5.24	64	99.90	819.33
화합물 1-704			5.47	58	99.97	943.36
화합물 1-705			5.65	60	99.98	943.36
화합물 1-706			5.56	59	99.90	941.35
화합물 1-707			5.75	61	99.92	941.35
화합물 1-981			5.35	68	99.94	788.36
화합물 1-982			4.20	50	99.94	840.30


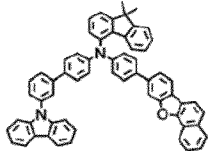

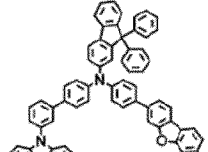

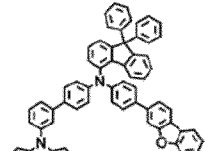

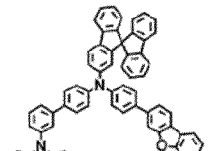

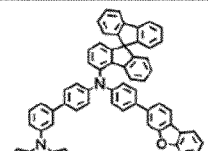

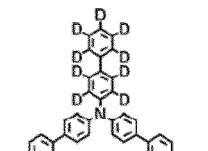

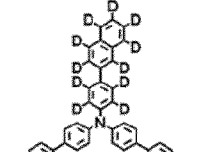
[212]

화합물 1-31		 J-2		4.07	58	99.92	703.27
화합물 1-127				4.75	61	99.94	779.30
화합물1- 128				5.55	67	99.97	829.32
화합물1- 129				4.89	59	99.96	829.32
화합물1- 130				4.65	53	99.95	879.33
화합물1- 319				4.83	62	99.90	779.30
화합물1- 320				4.97	60	99.94	829.31

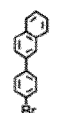
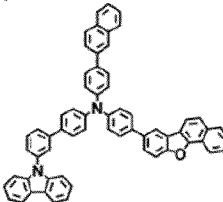

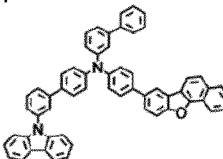
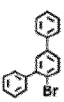
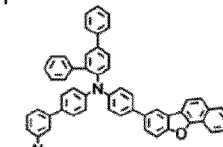
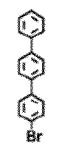
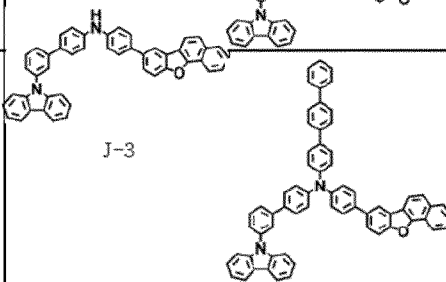

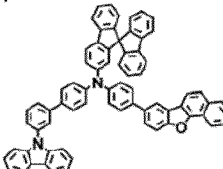

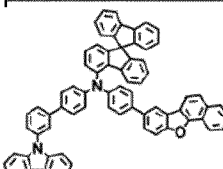
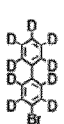
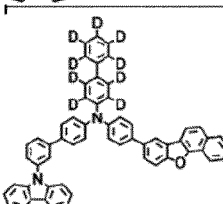
[213]

화합물 1-321			5.05	61	99.95	829.32
화합물 1-223			4.61	54	99.96	855.33
화합물 1-415			4.12	53	99.90	779.30
화합물 1-225			4.97	55	99.93	905.35
화합물 1-487			5.13	60	99.95	855.32
화합물 1-708			5.21	61	99.94	855.32
화합물 1-709			5.32	65	99.98	819.33

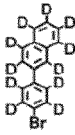
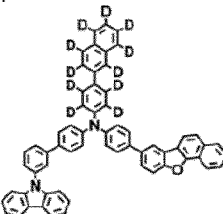

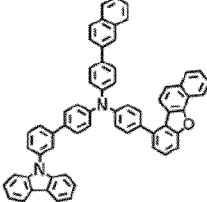

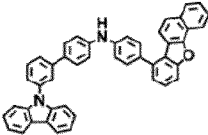
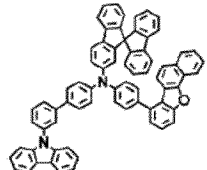

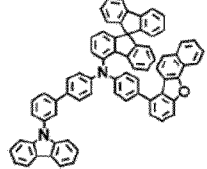
[214]

화합물1-710			5.24	64	99.97	819.33
화합물1-711			6.03	64	99.96	943.36
화합물1-712			5.65	60	99.95	943.37
화합물1-713			5.39	58	99.93	941.35
화합물1-714			5.09	54	99.91	941.35
화합물1-983			4.65	59	99.92	788.36
화합물1-984			5.04	60	99.96	840.39


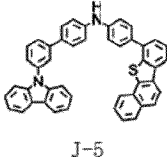
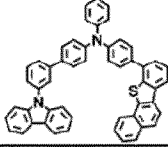

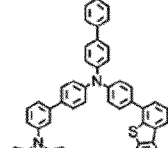

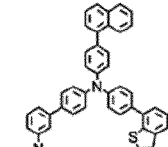

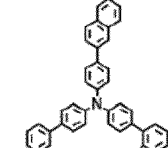

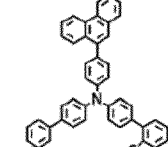

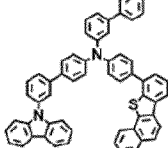

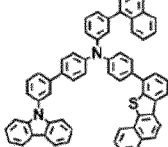
[215]

화합물 1-135			5.63	68	99.95	829.32
화합물 1-301			4.51	58	99.90	829.32
화합물1- 229			4.70	55	99.95	855.33
화합물1- 517		 J-3	4.61	54	99.94	855.32
화합물1- 706			5.56	59	99.95	941.35
화합물1- 707			5.47	58	99.96	941.35
화합물1- 985			4.09	52	99.97	788.35


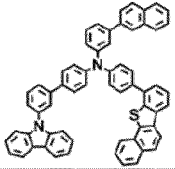

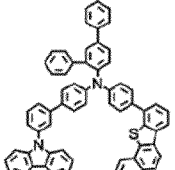

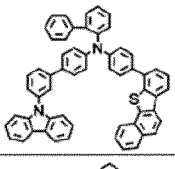
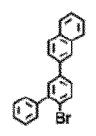
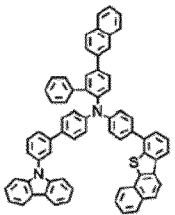
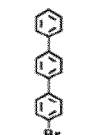
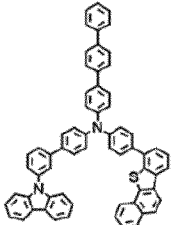

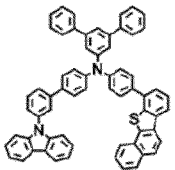
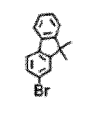
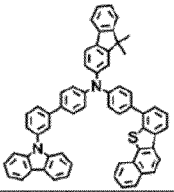
[216]

<p>화합물1-986</p> 			5.04	60	99.91	840.39
<p>화합물1-414</p> 			5.05	61	99.94	829.32
<p>화합물1-727</p> 	<p>J-4</p> 		6.03	64	99.93	941.35
<p>화합물1-728</p> 			5.56	59	99.90	941.35


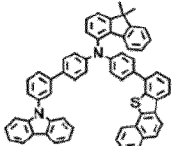

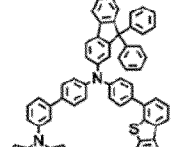

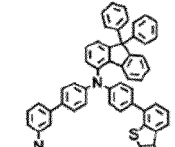

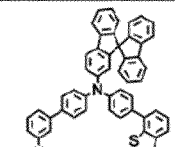

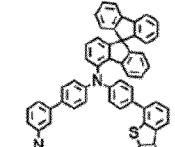

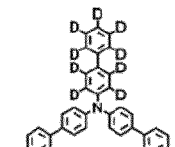

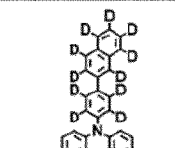
[217]

화합물 1-797		 J-5		3.52	49	99.94	719.25
화합물 1-821				4.61	58	99.95	795.28
화합물1- 822				4.73	56	99.91	845.29
화합물1- 823				4.56	54	99.96	845.29
화합물1- 824				5.81	65	99.92	895.31
화합물1- 869				4.85	61	99.93	795.28
화합물1- 864				4.30	51	99.95	845.29


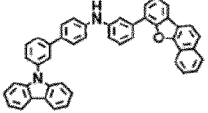
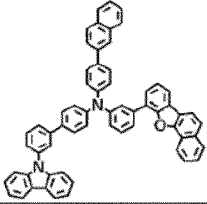

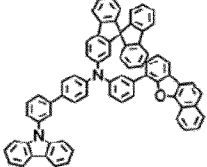

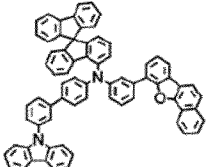
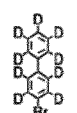
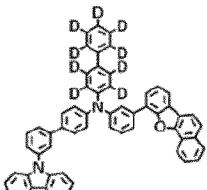
[218]

화학물 1-885			4.47	53	99.96	845.30
화학물 1-845			5.05	58	99.94	871.31
화학물 1-893			4.37	55	99.96	795.28
화학물 1-847			5.15	56	99.98	921.33
화학물 1-917			4.87	56	99.95	871.31
화학물 1-967			4.52	52	99.91	871.32
화학물 1-968			4.17	50	99.98	835.31


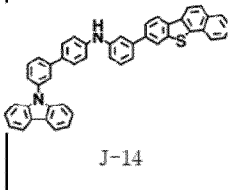
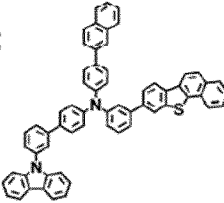

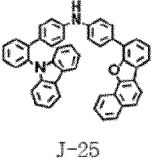
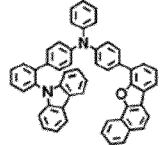

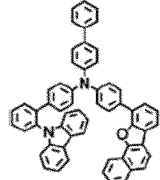

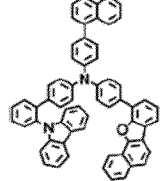
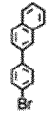
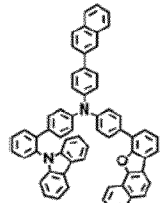
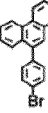
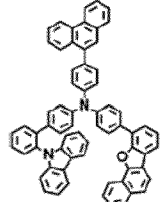

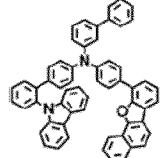

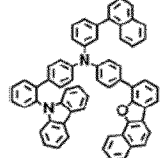
[219]

화합물 1-969			4.50	54	99.97	835.31
화합물 1-970			4.69	49	99.94	959.34
화합물 1-971			6.52	68	99.96	959.34
화합물 1-972			5.56	58	99.95	957.33
화합물 1-973			5.56	58	99.97	957.33
화합물 1-987			4.58	57	99.92	804.34
화합물 1-988			5.22	61	99.95	856.36


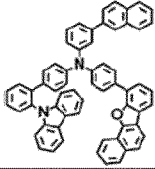

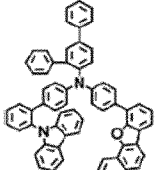

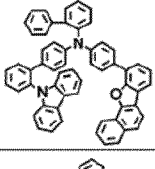
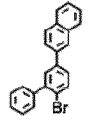
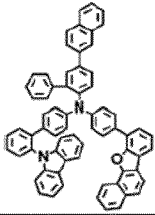
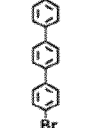
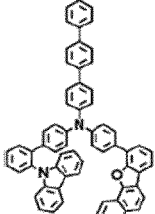

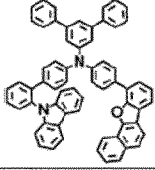

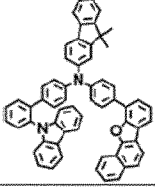
[220]

화합물 1-147		 J-9		4.97	60	99.94	829.32
화합물 1-732				4.90	52	99.96	941.35
화합물1- 733				5.56	59	99.93	941.36
화합물1- 989				4.49	57	99.95	788.37


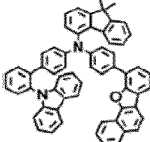

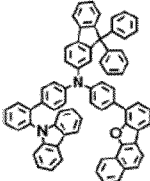

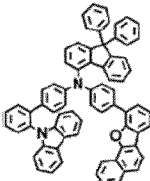

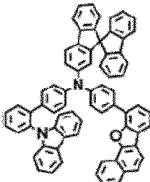

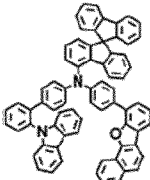
[221]

화합물 1-829		 J-14		5.07	60	99.93	845.29
화합물 2-1		 J-25		3.72	53	99.96	703.27
화합물 2-25				4.44	57	99.95	779.30
화합물 2- 26				4.47	54	99.94	829.32
화합물 2- 27				4.14	50	99.90	829.31
화합물 2- 28				5.09	58	99.96	879.33
화합물 2- 145				4.05	52	99.96	779.30
화합물 2- 146				4.80	58	99.94	829.32


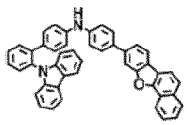
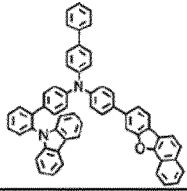

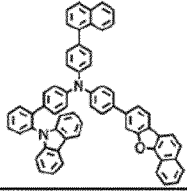

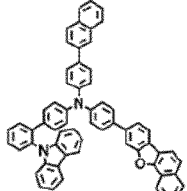

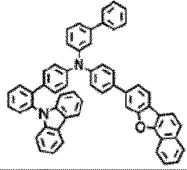

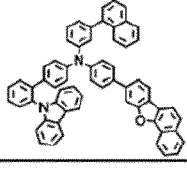

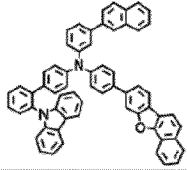

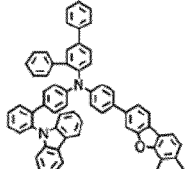
[222]

화합물2-147			5.38	65	99.96	829.33
화합물2-49			5.47	64	99.97	855.33
화합물2-97			4.67	60	99.92	779.31
화합물2-51			4.70	52	99.93	905.35
화합물2-121			4.96	58	99.90	855.33
화합물2-169			4.53	53	99.98	855.33
화합물2-170			4.91	60	99.93	819.33

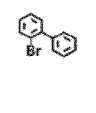
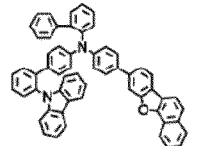
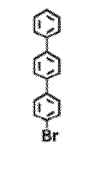
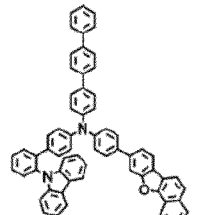
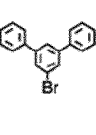
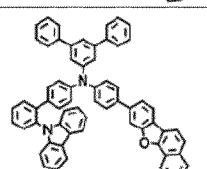
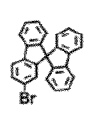
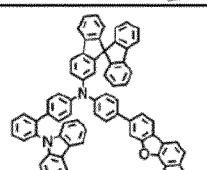
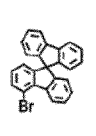
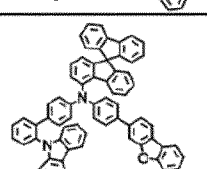
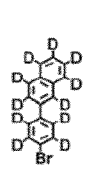
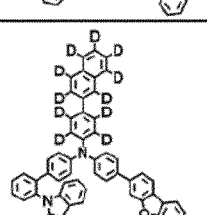
[223]

화합물2-171				5.24	64	99.94	819.33
화합물2-172				5.84	62	99.90	943.35
화합물2-173				6.41	68	99.92	943.36
화합물2-174				5.47	58	99.95	941.35
화합물2-181				5.09	54	99.97	941.35


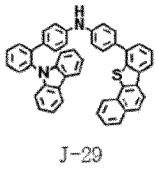
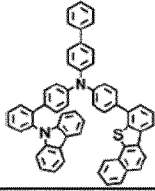

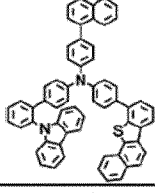

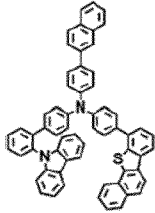

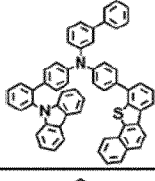

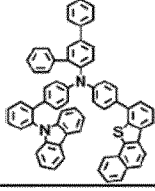
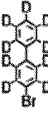
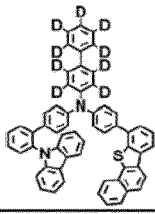

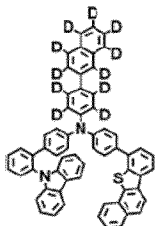
[224]

화합물 2-37		 J-26		5.06	65	99.94	779.31
화합물 2-38				5.30	64	99.96	829.33
화합물 2- 45				4.31	52	99.92	829.32
화합물 2- 85				4.36	56	99.91	779.30
화합물 2- 86				4.47	54	99.97	829.32
화합물 2- 87				4.80	58	99.93	829.32
화합물 2- 61				5.04	59	99.90	855.33


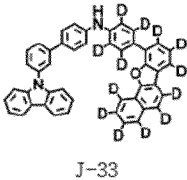
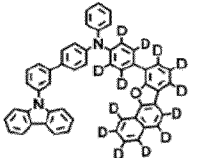

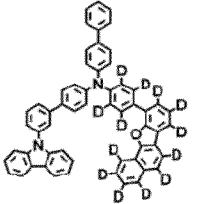

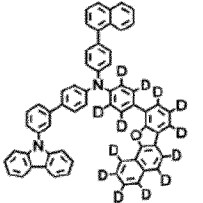

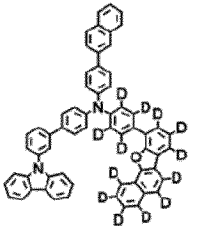
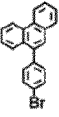
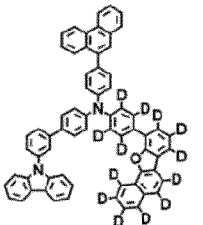

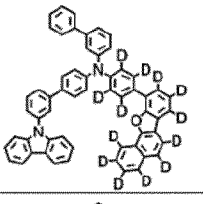

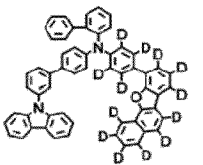
[225]

화합물 2-109			4.36	56	99.93	779.30
화합물 2-133			4.95	58	99.90	855.33
화합물 2-182			4.44	52	99.91	855.34
화합물 2-193			5.37	57	99.95	941.36
화합물 2-194			5.75	61	99.91	941.35
화합물 2-197			4.87	58	99.95	840.39


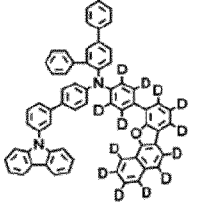
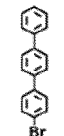
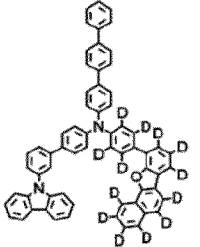

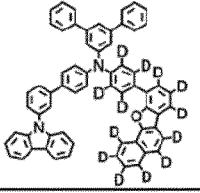

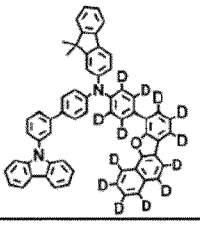

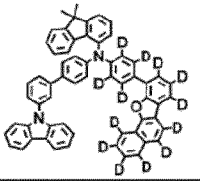

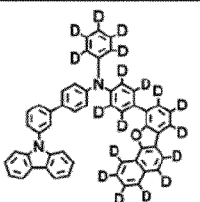
[226]

화합물 2-31		 J-29		4.77	60	99.94	795.28
화합물 2-32				5.24	62	99.95	845.30
화합물 2- 22				5.40	64	99.96	845.29
화합물 2- 79				4.61	58	99.96	795.28
화합물 2- 55				4.53	52	99.95	871.31
화합물 2- 198				4.10	51	99.92	804.34
화합물 2- 199				4.28	50	99.98	856.37

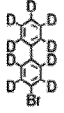
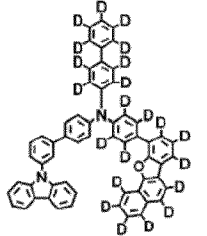
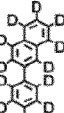
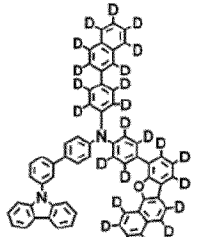
[227]

화합물 1-1005		 J-33		4.00	56	99.95	716.35
화합물 1-1006				4.67	59	99.94	792.38
화합물1- 1007				4.04	48	99.90	842.40
화합물1- 993				4.37	52	99.94	842.41
화합물1- 994				4.19	47	99.96	892.41
화합물1- 995				3.96	50	99.98	792.38
화합물1- 996				4.43	56	99.97	792.37


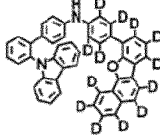
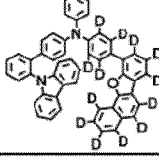

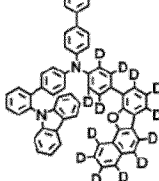

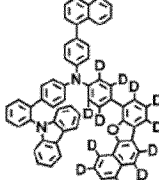

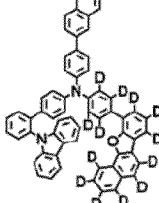
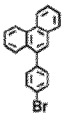
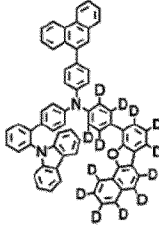

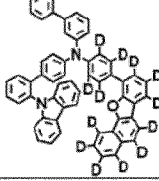

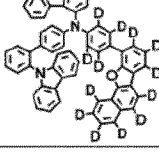
[228]

화합물1-997			5.03	58	99.99	868.41
화합물1-998			4.51	52	99.99	868.41
화합물1-999			4.25	49	99.96	868.41
화합물1-1000			4.40	53	99.97	832.41
화합물1-1001			4.99	60	99.97	832.41
화합물1-1002			4.39	61	99.95	721.38


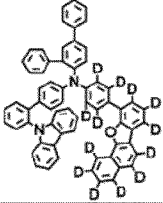
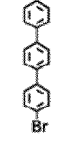
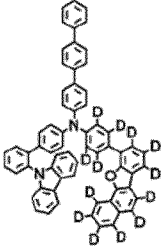
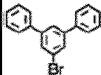
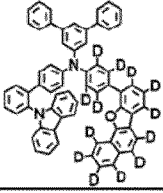

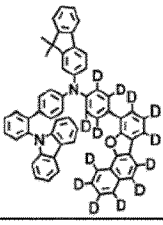

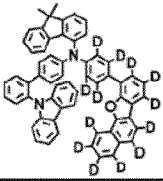

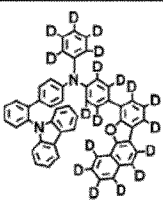
[229]

화합물 1-1003				4.64	58	99.97	801.44
화합물 1-1004				4.69	55	99.91	853.47

[230]

화합물 2-200		 J-36		3.57	50	99.89	716.35
화합물 2-201				4.67	59	99.92	792.37
화합물 2- 202				4.54	54	99.91	842.41
화합물 2- 203				4.71	56	99.90	842.40
화합물 2- 204				5.08	57	99.91	892.41
화합물 2- 205				4.67	59	99.90	792.38
화합물 2- 206				4.91	62	99.92	792.38

[231]

화합물 2-207			5.20	60	99.95	868.41
화합물 2-208			5.03	58	99.96	868.41
화합물 2-209			4.77	55	99.94	868.42
화합물 2-210			4.32	52	99.95	832.41
화합물 2-211			4.40	53	99.86	832.41
화합물 2-212			3.52	49	99.89	721.38

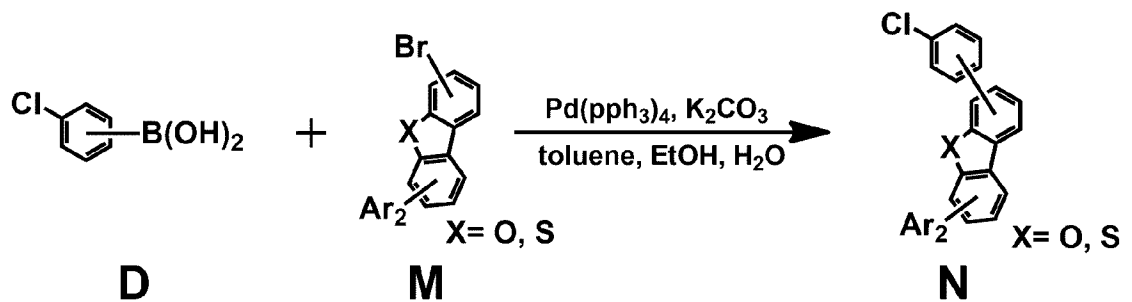
[232]

화합물 2-207			5.20	60	99.95	868.41
화합물 2-208			5.03	58	99.96	868.41
화합물 2-209			4.77	55	99.94	868.42
화합물 2-210			4.32	52	99.95	832.41
화합물 2-211			4.40	53	99.86	832.41
화합물 2-212			3.52	49	99.89	721.38

[233]

[234] 중간체 그룹 N의 합성

[235]



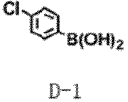
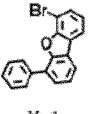
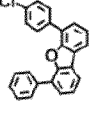
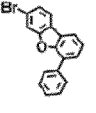
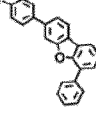
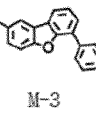
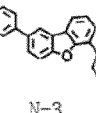
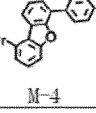
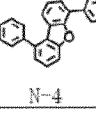
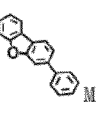
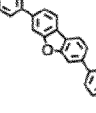
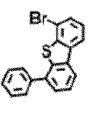
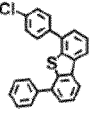
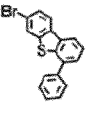
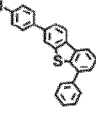
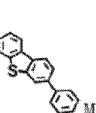
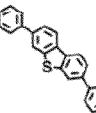
[236]

질소 기류하에서 둥근바닥플라스크에 반응물D(17.2g, 110 mmol), 반응물M(100 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.31 g, 2.0 mmol), K₂CO₃ (27.6 g, 200 mmol)와 톨루엔(150 mL),

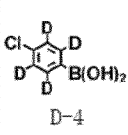
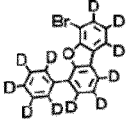
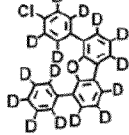
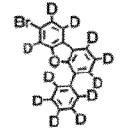
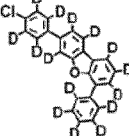
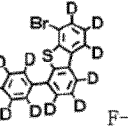
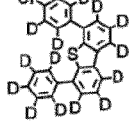
물(80 mL), 에탄올(50 mL)을 넣은 후에 100°C에서 교반 하며 반응을 진행하였다. 반응이 완료되면 유기 층 분리 후 수분제거 하여 필터 한 뒤 실리카겔 컬럼(silica gel column) 및 재결정 방법으로 정제하여 중간체 그룹 N을 제조하였다.

[237] 결과는 하기 표 7과 같다.

[238] [표7]

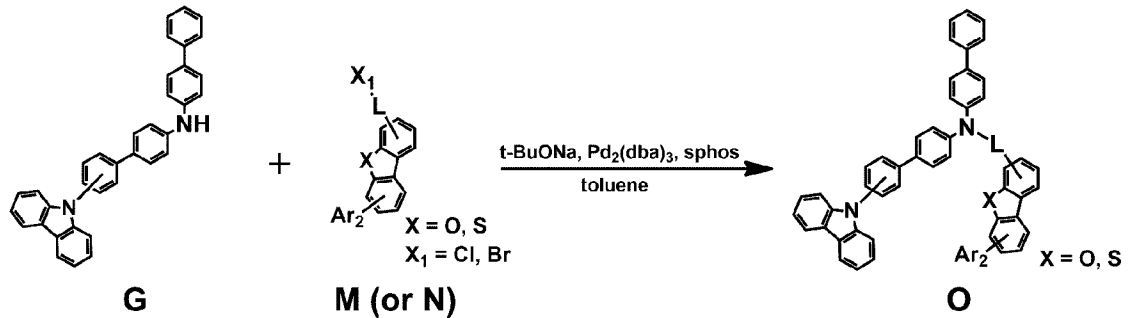
구분	반응물D	반응물M	중간체 그룹N	수득량 (g)	수율 (%)	순도 (%)
N-1	 D-1	 M-1	 N-1	27.9	79	99.1
N-2		 M-2	 N-2	26.5	75	99.2
N-3		 M-3	 N-3	28.6	81	99.1
N-4		 M-4	 N-4	25.1	71	98.9
N-5		 M-5	 N-5	23.7	67	98.2
N-6		 M-6	 N-6	27.0	73	98.7
N-7		 M-7	 N-7	25.5	69	98.6
N-8		 M-8	 N-8	20.3	55	97.5

[239]

F-9	 D-4	 F-9	 N-9	21.7	59	98.5
F-10		 F-10	 N-10	22.8	62	97.9
F-11		 F-11	 N-11	20.0	52	98.5

[240] 화합물 그룹 O의 합성

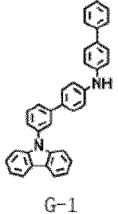
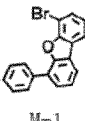
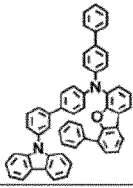
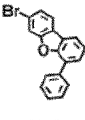
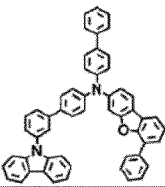
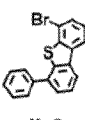
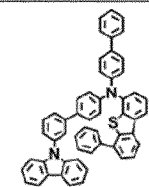
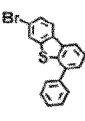
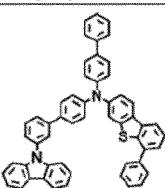
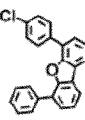
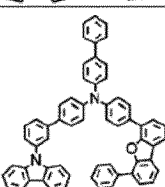
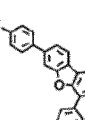
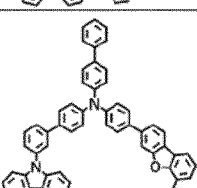
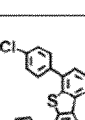
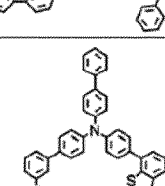
[241]



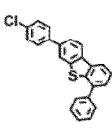
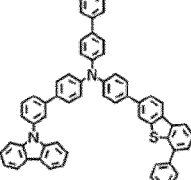
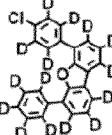
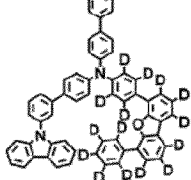
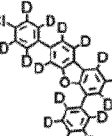
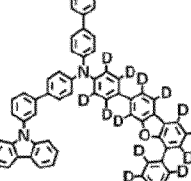
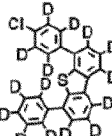
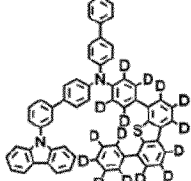
[242] 질소 기류 하에서 둥근바닥플라스크에 중간체 G (4.86 g, 10 mmol), 중간체 M(혹은 N) (11 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.183 g, 0.2 mmol), t-BuONa (1.92 g, 20 mmol), SPhos (0.164 g, 0.4 mmol)와 톨루엔 (60 mL)을 넣은 후에 100°C에서 교반하며 반응을 진행하였다. 반응이 완료되면 메탄올에 넣어 침전시킨 후 침전물을 필터한 뒤 실리카겔 컬럼(silicagel column) 및 재결정 방법으로 정제하여 화합물 그룹O를 제조하였다.

[243] 결과는 하기 표 8과 같다.

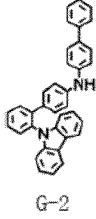
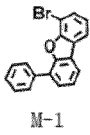
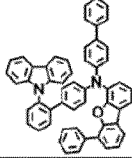
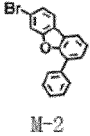
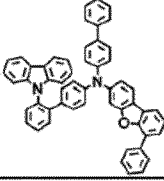
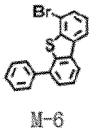
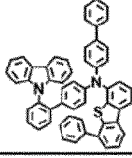
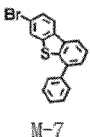
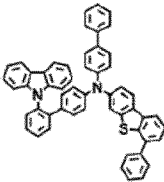
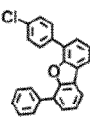
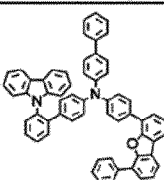
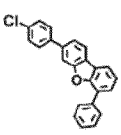
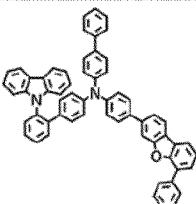
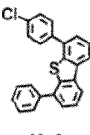
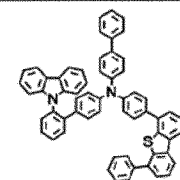
[244] [표8]

구분	중간체 G	중간체 그룹 M, N	화합물 그룹O	수득량 (g)	수율 (%)	순도 (%)	MS[M+ H] ⁺
화합물 1-1008	 G-1	 M-1		4.73	65	99.94	729.29
화합물 1-1009		 M-2		4.95	68	99.97	729.29
화합물1- 1010		 M-6		4.39	59	99.93	745.26
화합물1- 1011		 M-7		5.13	69	99.94	745.27
화합물1- 1012		 N-1		5.79	72	99.95	805.32
화합물1- 1013		 N-2		5.63	70	99.93	805.32
화합물1- 1014		 N-6		5.25	64	99.92	821.29

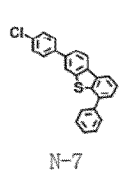
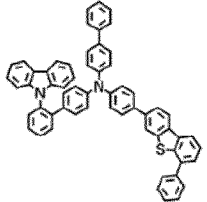
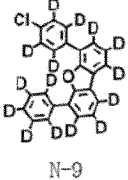
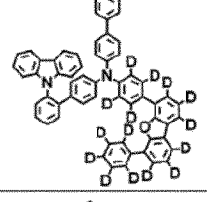
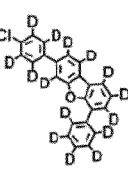
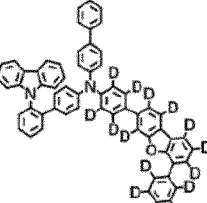
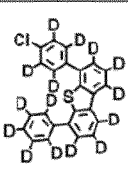
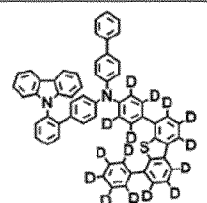
[245]

화합물 1-1015	 N-7		4.84	59	99.91	821.29
화합물 1-1016	 N-9		5.74	70	99.96	820.41
화합물 1-1017	 N-10		4.26	52	99.95	820.41
화합물 1-1018	 N-11		5.43	65	99.90	836.39

[246]

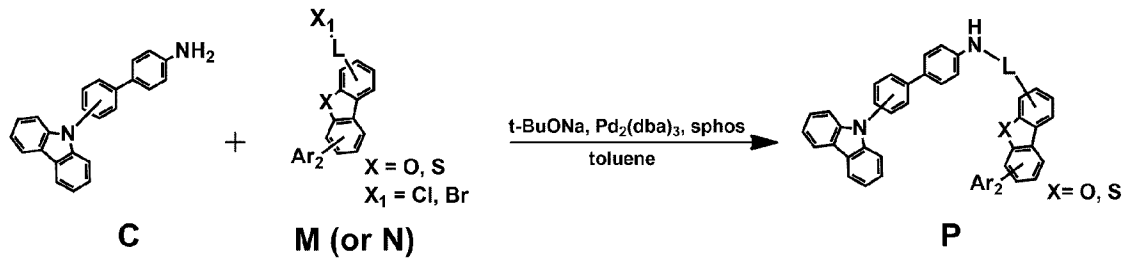
화합물 2-215	 G-2	 M-1		5.46	75	99.95	729.29
화합물 2-216		 M-2		5.54	76	99.96	729.28
화합물2- 217		 M-6		4.54	61	99.93	745.27
화합물2- 218		 M-7		5.80	78	99.97	745.26
화합물2- 219		 N-1		5.79	72	99.96	805.32
화합물2- 220		 N-2		5.23	65	99.93	805.32
화합물2- 221		 N-6		5.00	61	99.91	821.29

[247]

화합물2-222	 N-7		4.93	60	99.94	821.30
화합물2-223	 N-9		5.65	69	99.96	820.42
화합물2-224	 N-10		5.41	66	99.92	820.41
화합물2-225	 N-11		5.68	68	99.90	836.39

[248] 중간체 그룹 P의 합성

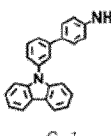
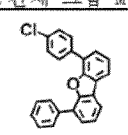
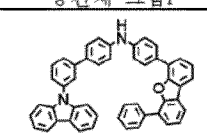
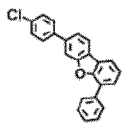
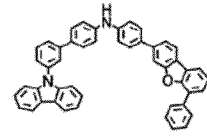
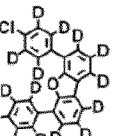
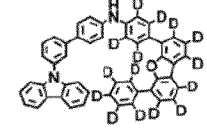
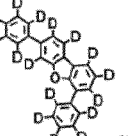
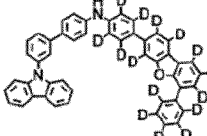
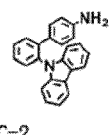
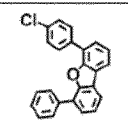
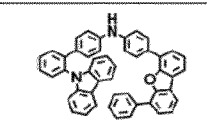
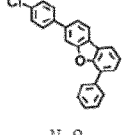
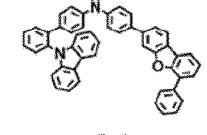
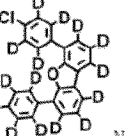
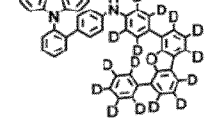
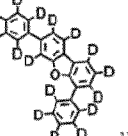
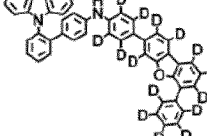
[249]



[250] 질소 기류 하에서 둥근바닥플라스크에 중간체 C (33.4 g, 100 mmol), 중간체 M(혹은 N) (110 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.83 g, 2.0 mmol), t-BuONa (19.2 g, 200 mmol), SPhos (1.64 g, 4.0 mmol)와 톨루엔 (560 mL)을 넣은 후에 100°C에서 교반하며 반응을 진행하였다. 반응이 완료되면 메탄올에 넣어 침전시킨 후 침전물을 필터한 뒤 실리카겔 컬럼(silicagel column) 및 재결정 방법으로 정제하여 중간체 그룹 P를 제조하였다.

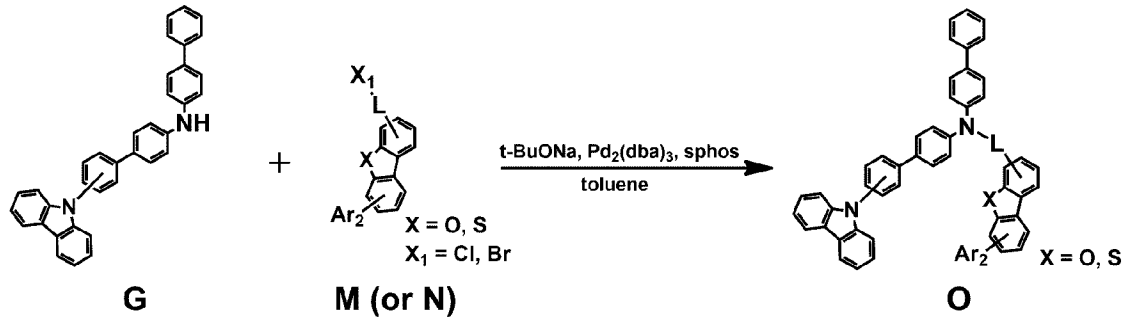
[251] 결과는 하기 표 9와 같다.

[252] [표9]

구분	중간체 그룹C	중간체 그룹 M,N	중간체 그룹P	수득량(g)	수율(%)	순도(%)
P-1	 C-1	 N-1	 P-1	41.7	64	98.3
P-2		 N-2	 P-2	46.2	71	98.2
P-3		 N-9	 P-3	39.3	59	98.8
P-4		 N-1 0	 P-4	48.0	72	98.4
P-5	 C-2	 N-1	 P-5	47.5	73	99.2
P-6		 N-2	 P-6	44.9	69	98.5
P-7		 N-9	 P-7	45.3	68	98.2
P-8		 N-1 0	 P-8	44.0	66	99.0

[253] 화합물 그룹Q의 합성


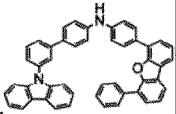
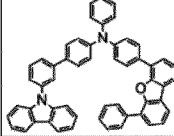
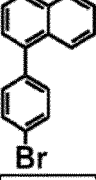
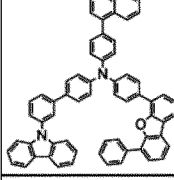
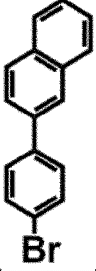
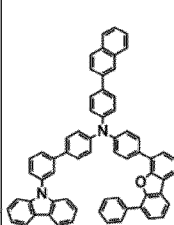
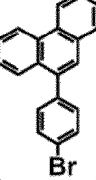
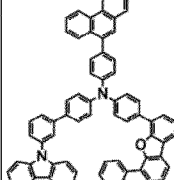
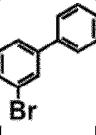
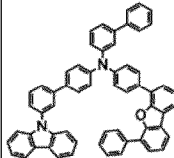
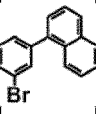
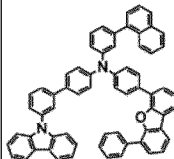
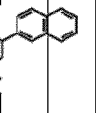
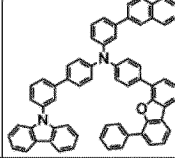
[254]



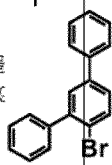
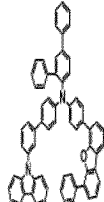
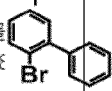
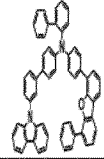
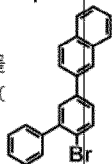


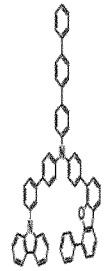
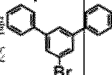
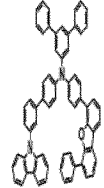
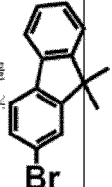
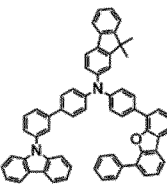
[255] 질소 기류 하에서 둥근바닥플라스크에 반응물 K (11 mmol), 중간체 P(10 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.183 g, 0.2 mmol), t-BuONa (1.92 g, 20 mmol), SPhos (0.164 g, 0.4 mmol)와 톨루엔 (60 mL)을 넣은 후에 100°C에서 교반하며 반응을 진행하였다. 반응이 완료되면 메탄올에 넣어 침전시킨 후 침전물을 필터 한 뒤 실리카겔 컬럼(silicagel column) 및 재결정 방법으로 정제하여 화합물 그룹Q를 제조하였다.

[256] 결과는 하기 표 10과 같다.


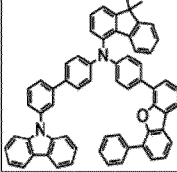

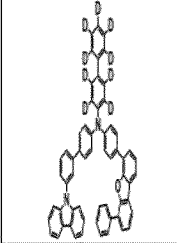
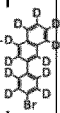
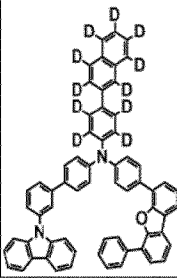
[257] [표10]

구분	반응물K	중간체 그룹P	화합물 그룹Q	수득량 (g)	수율 (%)	순도 (%)	MS[M+H] ⁺
화합물 1-1019		 P-1		3.78	52	99.95	729.29
화합물 1-1023				4.10	48	99.92	855.32
화합물1- 1024				4.78	56	99.95	855.33
화합물1- 1033				5.43	60	99.90	905.36
화합물1- 1025				4.26	53	99.96	805.32
화합물1- 1026				4.78	56	99.95	855.33
화합물 1027				4.61	54	99.90	855.33


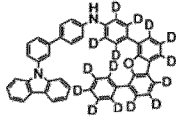
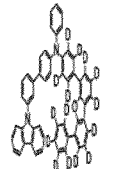
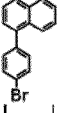
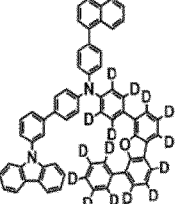
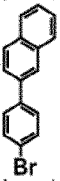
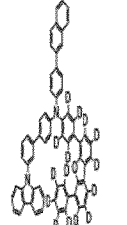
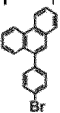
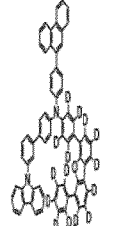

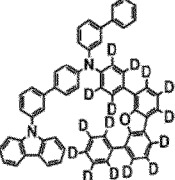

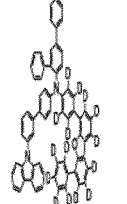
[258]

<p>화합물 102c</p> 			4.31	49	99.94	881.35
<p>화합물 102d</p> 			4.50	56	99.95	805.32
<p>화합물 103c</p> 			5.39	58	99.96	931.36
<p>화합물 1- 1031</p> 			5.02	57	99.98	881.35
<p>화합물 103e</p> 			4.93	56	99.92	881.36
<p>화합물 103f</p> 			4.81	57	99.92	845.35


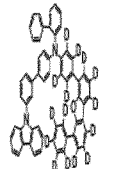
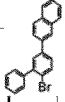
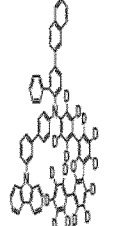

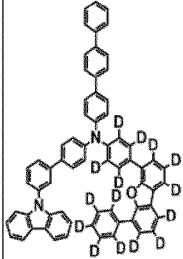

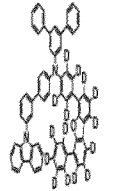
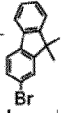
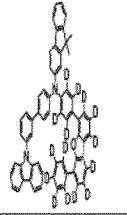

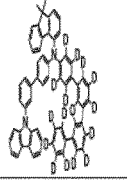
[259]

<p>화합물 1- 1035</p> 				5.40	64	99.90	845.35
<p>화합물 1- 1036</p> 				5.53	68	99.94	814.37
<p>화합물 1- 1037</p> 				4.33	50	99.94	866.40


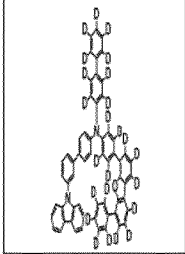
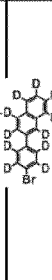
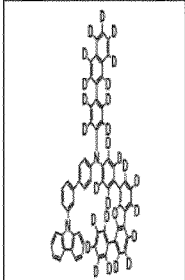
[260]

<p>화합물 1-1038</p> 	 <p>P-3</p>		4.31	58	99.92	744.38
<p>화합물 1-1039</p> 			5.82	67	99.97	870.43
<p>화합물1- 1040</p> 			5.13	59	99.96	870.43
<p>화합물1- 1041</p> 			4.87	53	99.95	920.44
<p>화합물1- 1042</p> 			5.08	62	99.90	820.40
<p>화합물1- 1043</p> 			4.83	54	99.96	896.44

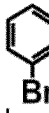
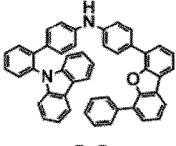
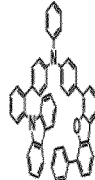

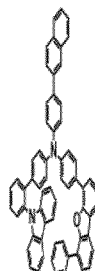

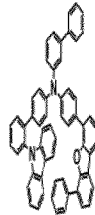

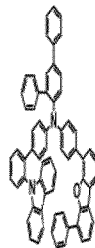

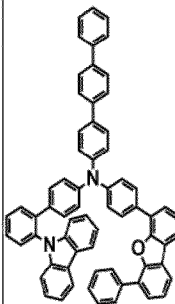
[261]

<p>화합물1- 1044</p> 		4.34	53	99.90	820.41
<p>화합물1- 1045</p> 		5.20	55	99.93	946.46
<p>화합물1- 1046</p> 		5.37	60	99.95	896.44
<p>화합물1- 1047</p> 		5.46	61	99.94	896.45
<p>화합물1- 1048</p> 		5.59	65	99.98	860.44
<p>화합물1- 1049</p> 		5.50	64	99.97	860.44

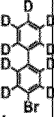
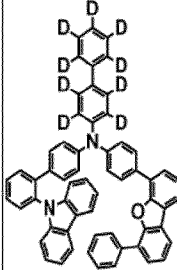
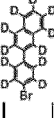
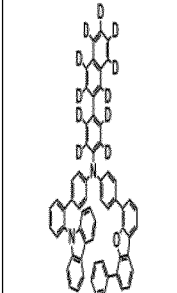
[262]

<p>化合物 1- 1050</p> 			4.89	59	99.92	829.47
<p>化合物 1- 1051</p> 			5.28	60	99.96	881.50


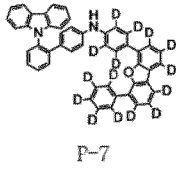
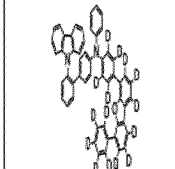
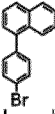
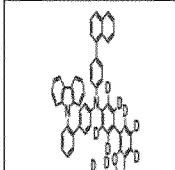
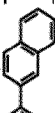
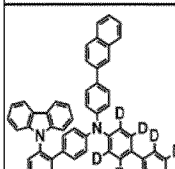
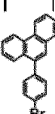
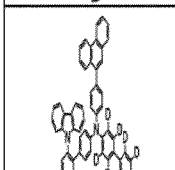
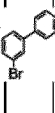
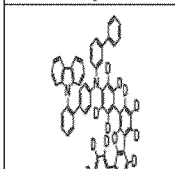

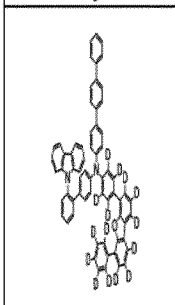
[263]

화합물 2-226 	 P-5		4.22	58	99.92	729.30
화합물 2-231 			5.81	68	99.95	855.33
화합물 2- 232 			4.66	58	99.90	805.32
화합물 2- 236 			4.84	55	99.95	881.35
화합물 2- 238 			4.75	54	99.94	881.35


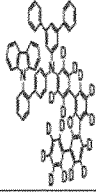
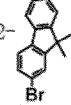
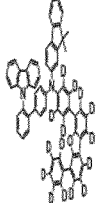
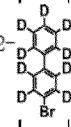

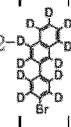
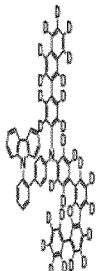
[264]

화합물 2-243 			4.23	52	99.97	814.37
화합물 2-244 			5.19	60	99.91	866.41

[265]

화합물 2-245 	 P-7		3.64	49	99.94	744.38
화합물 2-246 			4.87	56	99.91	870.43
화합물 2- 247 			4.69	54	99.96	870.44
화합물 2- 248 			5.98	65	99.92	920.44
화합물 2- 249 			5.00	61	99.93	820.41
화합물 2- 253 			5.01	56	99.95	896.44

[266]

<p>화합물2- 254</p> 		4.65	52	99.91	896.44
<p>화합물2- 255</p> 		4.30	50	99.98	860.45
<p>화합물2- 257</p> 		4.72	57	99.92	829.47
<p>화합물2- 258</p> 		5.37	61	99.95	881.50

[267] [실시예 1: 유기전계발광소자 제조 1]

[268] 반사층이 형성된 기판 위에 ITO로 양극을 형성하고, N₂ 플라즈마 또는 UV-오존으로 표면처리 하였다. 그 위에 정공주입층(HIL)으로 HAT-CN을 10nm의 두께로 증착시켰다. 이어서 N₄,N₄,N₄',N₄'-테트라([1,1'-비페닐]-4-일)-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민을 110nm 두께로 증착시켜 정공수송층(HTL)을 형성하였다.

[269] 상기 정공수송층 상부에 화합물 1-97을 15nm두께로 진공 증착하여 정공수송보조층을 형성하고, 상기 정공수송보조층 상부에 발광층(EML)으로 blue EML을 형성할 수 있는 9,10-비스(2-나프틸)안트라센(9,10-Bis(2-naphthyl)anthracene, ADN)을 25nm 증착시키면서 도펀트(dopant)로 N₁,N₁,N₆,N₆-테트라키스(4-(1-실릴)페닐)파이렌-1,6-디아민을 약 3wt%정도 도핑하였다.

[270] 그 위에 안트라센 유도체와 LiQ를 질량비 1:1로 혼합하여 30nm의 두께로 전자수송층(ETL)을 증착하였으며, 그 위에 전자주입층(EIL)으로 LiQ를 1nm 두께로 증착시켰다. 그 후, 음극으로 마그네슘과 은(Ag)을 9:1로 혼합한 혼합물을 15nm의 두께로 증착시켰으며, 상기 음극 위에 캡핑 층(capping layer)로

N4,N4'-비스[4-[비스(3-메틸페닐)아미노]페닐]-N4,N4'-디페닐-[1,1'-바이페닐]-4,4'-디아민(DNTPD)을 60nm 두께로 증착시켰다. 그 위에 UV 경화형 접착제로 흡습제가 함유된 셀 캡(seal cap)을 합착하여 대기중의 O₂나 수분으로부터 유기전계발광소자를 보호할 수 있게 하여 유기전계발광소자를 제조하였다.

[271] [실시에 2 내지 37]

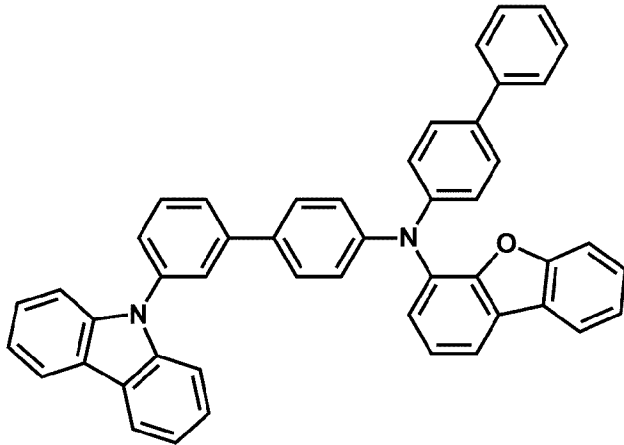
[272] 상기 실시에 1에서 정공수송보조층 화합물 1-97 대신에 하기 표 11에 기재된 화합물들을 사용한 것을 제외하고는 실시에 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.

[273] [비교예 1 내지 4]

[274] 상기 실시에 1에서 정공수송보조층으로 화합물 1-97 대신에 화합물 A 내지 화합물 D를 사용한 것을 제외하고는 실시에 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.

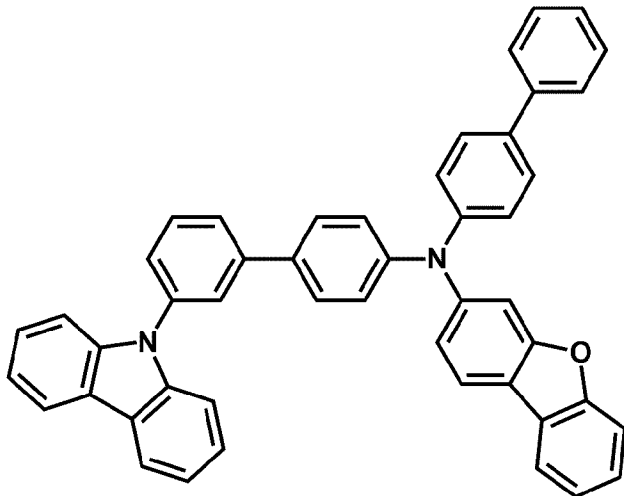
[275] [화합물 A]

[276]



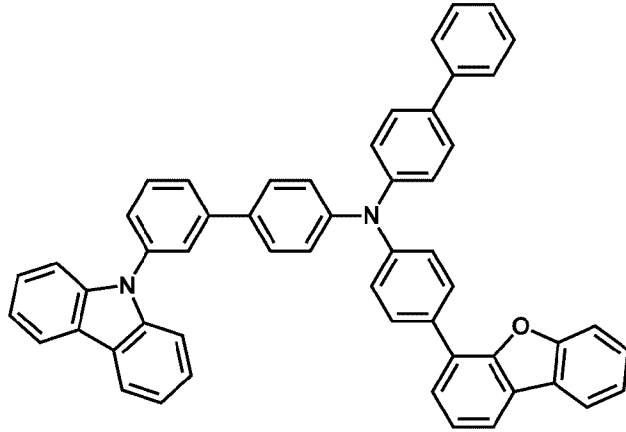
[277] [화합물 B]

[278]



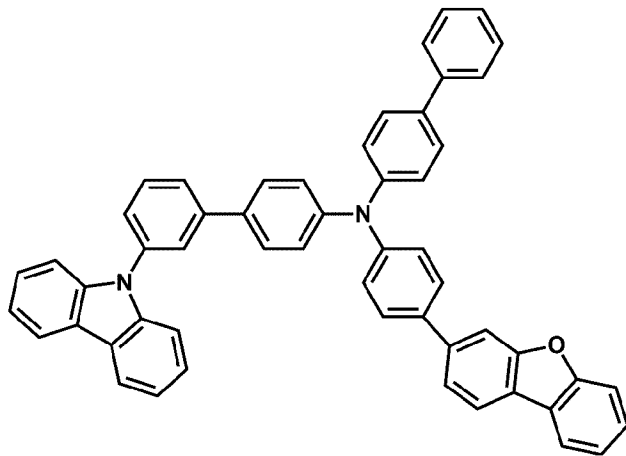
[279] [화합물 C]

[280]



[281] [화합물 D]

[282]



[283] [실험에 1: 소자 성능 분석]

[284] 상기에서 실시예 및 비교예에서 제조한 유기전계발광소자에 대해 정전류 10mA/cm²의 조건에서 소자의 전광특성을 분석하고 20mA/cm²의 구동조건에서 수명을 측정하였다.

[285] 실험 결과는 하기 표 11과 같다.

[286] [표11]

구분	정공수송 보조층	구동전압 (V)	효율		색		수명
			Cd/A	EQE	CIE _x	CIE _y	T95(hrs)
실시예 1	화합물 1-97	3.51	8.1	17.1	0.138	0.046	360
실시예 2	화합물 1-121	3.51	8.2	17.0	0.138	0.046	320
실시예 3	화합물 1-827	3.55	8.6	18.2	0.138	0.045	330
실시예 4	화합물 1-153	3.52	8.4	17.6	0.138	0.046	290
실시예 5	화합물 1-313	3.54	8.3	17.5	0.138	0.046	360
실시예 6	화합물 1-217	3.58	8.2	17.2	0.138	0.046	310
실시예 7	화합물 1-505	3.68	9.5	19.0	0.136	0.049	350
실시예 8	화합물 1-701	3.70	9.1	18.1	0.136	0.049	290
실시예 9	화합물 1-702	3.68	9.0	18.2	0.136	0.049	350
실시예 10	화합물 1-703	3.56	9.1	18.6	0.137	0.048	360
실시예 11	화합물 1-704	3.78	8.8	18.0	0.137	0.048	350
실시예 12	화합물 1-705	3.68	8.8	17.9	0.136	0.048	350
실시예 13	화합물 1-706	3.72	8.0	17.3	0.140	0.044	390
실시예 14	화합물 1-707	3.71	9.1	18.3	0.136	0.049	400
실시예 15	화합물 1-823	3.54	9.0	18.1	0.137	0.049	350

실시예 16	화합물 1-845	3.73	8.1	17.3	0.139	0.044	380
실시예 17	화합물 1-917	3.69	9.0	17.5	0.135	0.051	375
실시예 18	화합물 1-973	3.58	8.9	17.8	0.137	0.049	365
실시예 19	화합물 1-1003	3.64	9.3	19.1	0.137	0.048	405
실시예 20	화합물 1-127	3.55	8.4	17.6	0.138	0.046	340
실시예 21	화합물 1-129	3.51	8.9	17.9	0.137	0.047	320
실시예 22	화합물 1-487	3.51	8.8	17.8	0.136	0.049	310
실시예 23	화합물 1-709	3.53	8.0	17.1	0.138	0.045	330
실시예 24	화합물 1-712	3.57	9.1	18.4	0.137	0.049	355
실시예 25	화합물 1-714	3.61	9.7	18.5	0.134	0.053	325
실시예 26	화합물 1-135	3.59	9.3	18.7	0.137	0.049	345
실시예 27	화합물 1-229	3.58	9.3	18.2	0.135	0.051	330
실시예 28	화합물 1-414	3.59	8.6	17.9	0.137	0.047	315
실시예 29	화합물 1-147	3.59	8.7	18.0	0.138	0.047	325
실시예 30	화합물 1-169	3.60	8.7	18.3	0.138	0.046	335
실시예 31	화합물 1-1008	3.59	9.1	18.6	0.137	0.048	350
실시예 32	화합물 1-1009	3.56	8.9	18.3	0.137	0.048	360

실시예 33	화합물 1-1010	3.59	8.8	18.1	0.137	0.047	355
실시예 34	화합물 1-1016	3.45	9.5	19.2	0.137	0.049	395
실시예 35	화합물 1-1019	3.57	8.9	18.0	0.135	0.049	328
실시예 36	화합물 1-1024	3.51	8.9	17.9	0.136	0.049	343
실시예 37	화합물 1-1036	3.50	9.6	19.0	0.135	0.050	392
비교예 1	화합물 A	3.85	6.9	15.5	0.140	0.042	132
비교예 2	화합물 B	3.90	6.4	14.2	0.141	0.042	125
비교예 3	화합물 C	3.95	7.3	15.8	0.140	0.043	175
비교예 4	화합물 D	3.80	6.3	14.1	0.141	0.042	197

[287] 상기 표 11의 실험 결과에 의하면, 비교예에 비해, 본 발명의 화합물을 유기전계발광소자의 정공수송보조층 재료로 사용하는 경우, 구동 전압은 낮으며, 우수한 소자 효율 특성 및 장수명 특성을 나타내는 것을 확인하였다.

[288]

[289] [실시예 38: 유기전계발광소자 제조 2]

[290] 반사층이 형성된 기판 위에 ITO로 양극을 형성하고, N₂ 플라즈마 또는 UV-오존으로 표면처리 하였다. 그 위에 정공주입층(HIL)으로 HAT-CN을 10nm의 두께로 증착시켰다. 이어서 N4,N4,N4',N4'-테트라([1,1'-비페닐]-4-일)-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민을 110nm 두께로 증착시켜 정공수송층(HTL)을 형성하였다.

[291] 상기 정공수송층 상부에 화합물 2-25를 15nm두께로 진공 증착하여 정공수송보조층을 형성하고, 상기 정공수송보조층 상부에 발광층(EML)으로 blue EML을 형성할 수 있는 9,10-비스(2-나프틸)안트라센(9,10-Bis(2-naphthyl)anthracene, ADN)을 25nm 증착시키면서 도펀트(dopant)로 N1,N1,N6,N6-테트라키스(4-(1-실릴)페닐)파이렌-1,6-디아민을 약 3wt%정도 도핑하였다.

[292] 그 위에 안트라센 유도체와 LiQ를 질량비 1:1로 혼합하여 30nm의 두께로 전자수송층(ETL)을 증착하였으며, 그 위에 전자주입층(EIL)으로 LiQ를 1nm 두께로 증착시켰다. 그 후, 음극으로 마그네슘과 은(Ag)을 9:1로 혼합한 혼합물을 15nm의 두께로 증착시켰으며, 상기 음극 위에 캡핑층(capping layer)로 N4,N4'-비스[4-[비스(3-메틸페닐)아미노]페닐]-N4,N4'-디페닐-[1,1'-바이페닐]-4,4'-디아민(DNTPD)을 60nm 두께로 증착시켰다. 그 위에 UV 경화형 접착제로 흡습제가 함유된 셀 캡(seal cap)을 합착하여 대기중의 O₂나 수분으로부터 유기전계발광소자를 보호할 수 있게 하여 유기전계발광소자를 제조하였다.

[293] [실시에 39 내지 57]

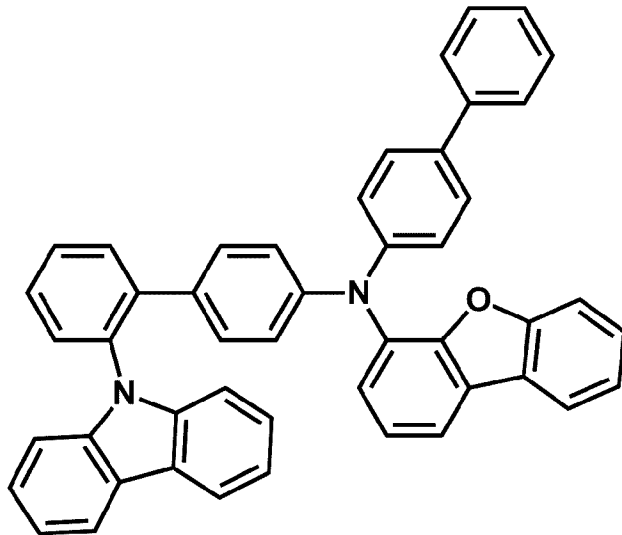
[294] 상기 실시에 38에서 정공수송보조층 화합물 2-25 대신에 하기 표 12에 기재된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실시에 38과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.

[295] [비교예 5 내지 8]

[296] 상기 실시에 38에서 정공수송보조층으로 화합물 2-25 대신에 화합물 E 내지 화합물 H를 사용한 것을 제외하고는 실시에 38과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.

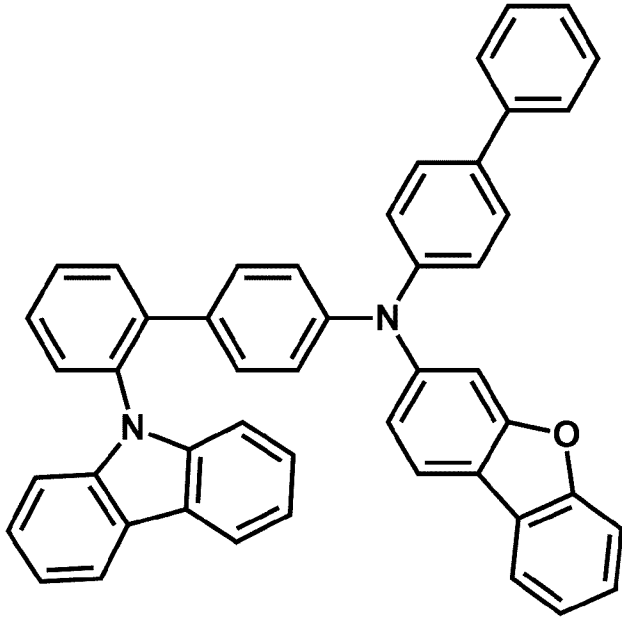
[297] [화합물 E]

[298]



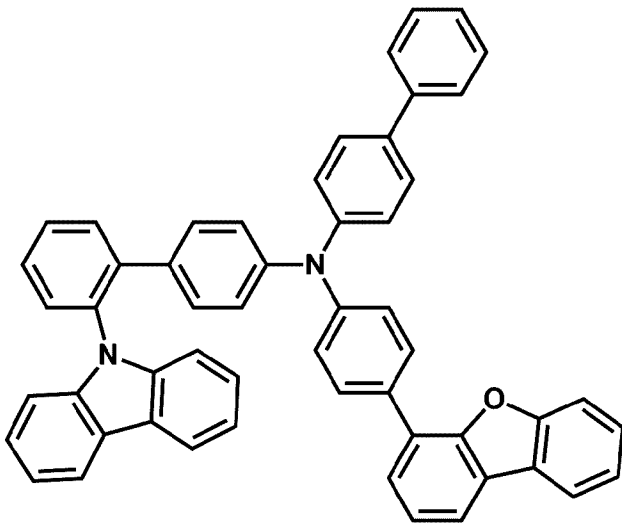
[299] [화합물 F]

[300]



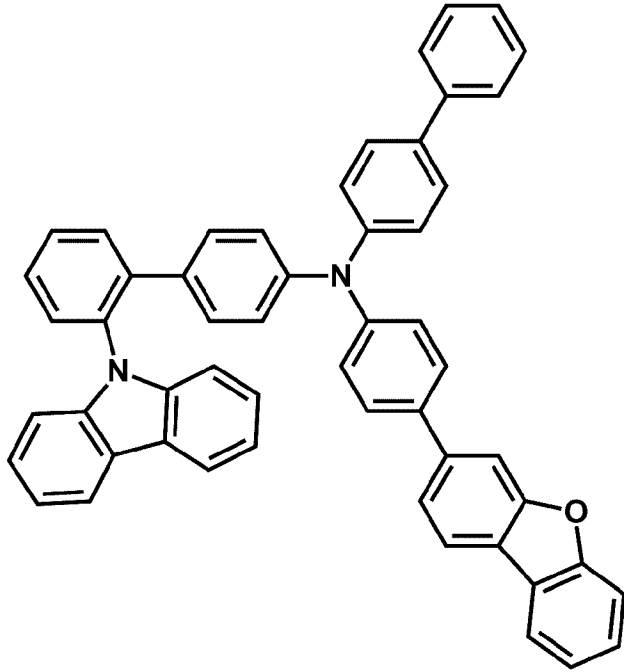
[301] [화합물 G]

[302]



[303] [화합물 H]

[304]



[305] [실험예 2: 소자 성능 분석]

[306] 상기에서 실시예 및 비교예에서 제조한 유기전계발광소자에 대해 정전류 10mA/cm²의 조건에서 소자의 전광특성을 분석하고 20mA/cm²의 구동조건에서 수명을 측정하였다.

[307] 실험 결과는 하기 표 12와 같다.

[308] [표12]

구분	정공수송 보조층	구동전압 (V)	효율		색		수명
			Cd/A	EQE	CIE _x	CIE _y	T95(hrs)
실시예 38	화합물 2-25	3.51	10.0	18.5	0.134	0.055	290
실시예 39	화합물 2-31	3.48	9.7	18.4	0.134	0.054	315
실시예 40	화합물 2-1	3.55	8.3	17.5	0.139	0.045	380
실시예4 1	화합물 2-27	3.53	8.8	17.9	0.137	0.048	297
실시예4 2	화합물 2-49	3.54	8.8	17.8	0.137	0.048	310
실시예4 3	화합물 2-170	3.59	8.7	17.8	0.137	0.048	295
실시예4 4	화합물 2-173	3.65	8.6	17.5	0.137	0.048	323
실시예4 5	화합물 2-37	3.62	9.0	17.9	0.136	0.050	312
실시예4 6	화합물 2-61	3.67	9.2	18.3	0.136	0.049	300
실시예4 7	화합물 2-182	3.56	9.3	18.5	0.136	0.050	360
실시예4 8	화합물 2-31	3.51	8.5	17.5	0.139	0.044	298
실시예4 9	화합물 2-33	3.53	8.9	18.2	0.137	0.048	314
실시예5 0	화합물 2-55	3.54	8.8	18.2	0.137	0.047	321
실시예5 1	화합물 2-214	3.58	9.3	18.7	0.137	0.049	380
실시예5 2	화합물 2-215	3.55	9.2	18.0	0.136	0.051	375

실시예5 3	화합물 2-217	3.57	9.5	18.3	0.135	0.052	390
실시예5 4	화합물 2-223	3.46	9.2	18.2	0.138	0.046	420
실시예5 5	화합물 2-225	3.49	9.6	18.9	0.137	0.048	430
실시예5 6	화합물 2-244	3.50	10.0	19.1	0.135	0.053	425
실시예5 7	화합물 2-257	3.56	97	18.5	0.134	0.053	452
비교예 5	화합물 E	3.82	7.4	16.0	0.139	0.045	185
비교예 6	화합물 F	3.80	7.3	16.4	0.138	0.045	196
비교예 7	화합물 G	3.89	7.6	16.5	0.139	0.045	187
비교예 8	화합물 H	3.77	7.7	16.6	0.139	0.045	198

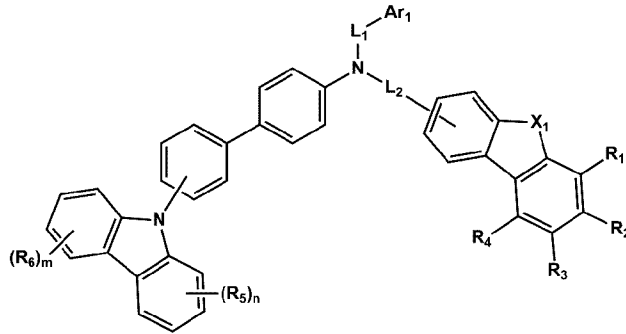
[309] 상기 표 12의 실험 결과에 의하면, 비교예에 비해, 본 발명의 화합물을 유기전계발광소자의 정공수송보조층 재료로 사용하는 경우, 구동 전압은 낮으며, 우수한 소자 효율 특성 및 장수명 특성을 나타내는 것을 확인하였다. 이상에서 본 발명의 바람직한 실시예에 대하여 상세하게 설명하였지만 본 발명의 권리범위는 이에 한정되는 것은 아니고 다음의 청구범위에서 정의하고 있는 본 발명의 기본 개념을 이용한 당업자의 여러 변형 및 개량 형태 또한 본 발명의 권리범위에 속하는 것이다.

산업상 이용가능성

[310] 본 발명은 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광 소자에 관한 것이다.

청구범위

- [청구항 1] 하기 화학식 1 로 표시되는
화합물:
[화학식 1]



여기서,

n 및 m 은 0 내지 4의 정수이며,

X_1 은 O, N(R_7), C(R_8)(R_9) 및 S로 이루어진 군으로부터 선택되며,

L_1 및 L_2 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 단일결합, 치환

또는 비치환의 탄소수 6 내지 30개의 아릴렌기, 치환 또는 비치환의

탄소수 1 내지 30개의 헤테로아릴렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지

10개의 알킬렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 10개의

시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 10개의 알케닐렌기,

치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 10개의 시클로알케닐렌기 치환 또는

비치환의 탄소수 1 내지 10개의 헤테로알킬렌기, 치환 또는 비치환의

탄소수 2 내지 10개의 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환의 탄소수

2 내지 10개의 헤테로알케닐렌기 및 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지

10개의 헤테로시클로알케닐렌기로 이루어진 군으로부터 선택되며,

Ar_1 은 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 30개의 아릴기, 치환 또는

비치환의 탄소수 1 내지 30개의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환의

탄소수 1 내지 20개의 알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지 20개의

시클로알킬기, 치환 또는 비치환의 탄소수 1 내지 20개의 헤테로알킬기,

치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 20개의 헤테로시클로알킬기, 치환

또는 비치환의 탄소수 6 내지 30개의 아르알킬기, 치환 또는 비치환의

탄소수 2 내지 20개의 알케닐기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 내지

20개의 시클로알케닐기 및 치환 또는 비치환의 탄소수 2 내지 20개의

헤테로알케닐기로 이루어진 군으로부터 선택되며,

R_1 내지 R_9 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소,

시아노기, 니트로기, 할로젠기, 히드록시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1

내지 4의 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기,

치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬기, 치환 또는

비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 24의 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 30의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 30의 아르알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 24의 헤테로아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있고,

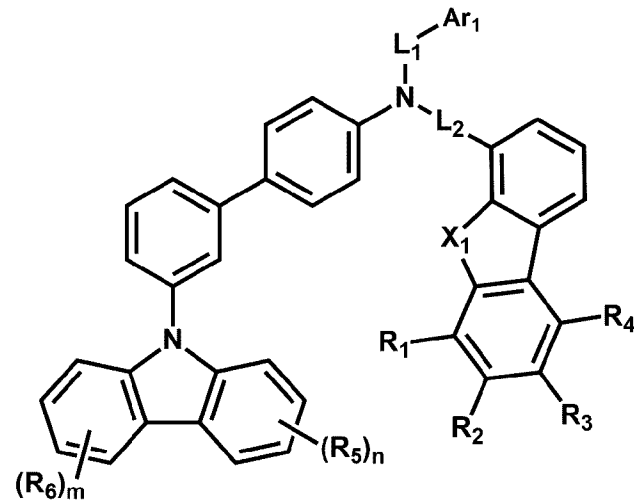
R_1 내지 R_4 중 어느 하나 이상은 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있다.

[청구항 2]

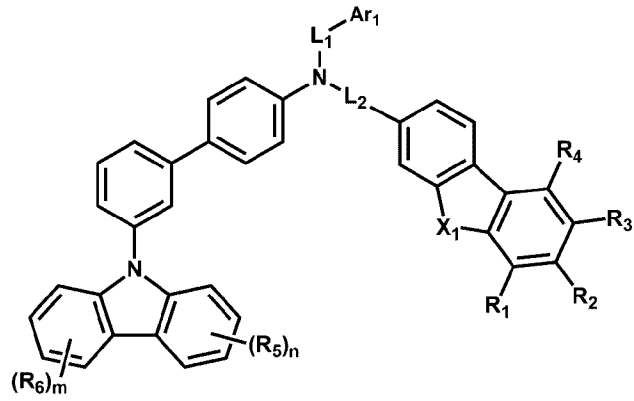
제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2 내지 7로 표시되는 화합물:

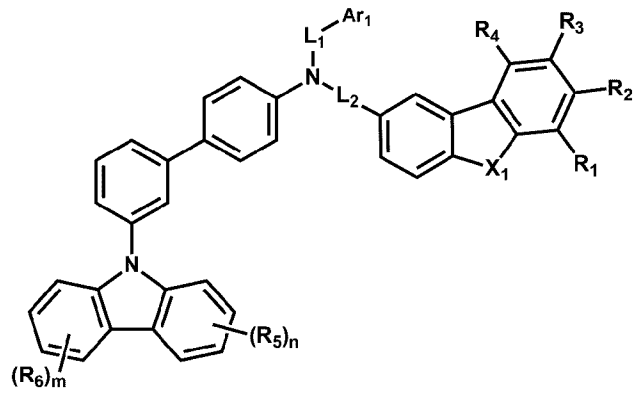
[화학식 2]



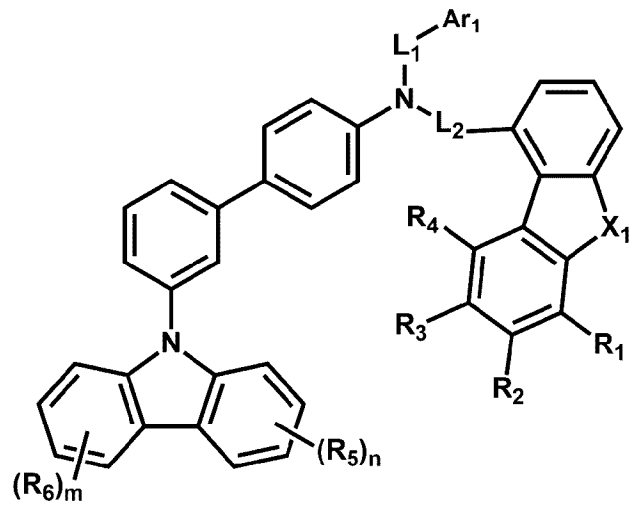
[화학식 3]



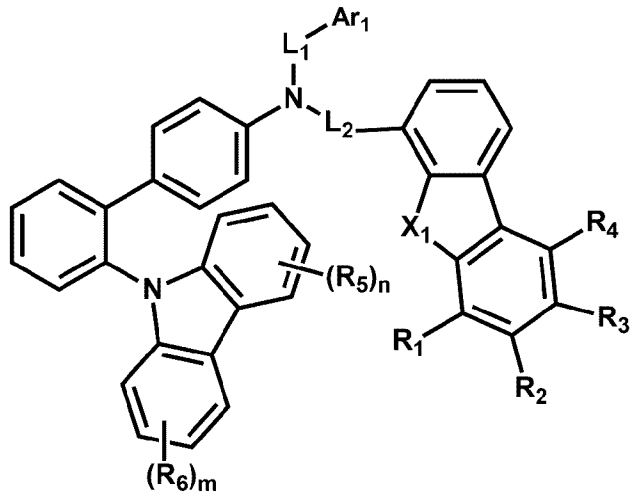
[화학식 4]



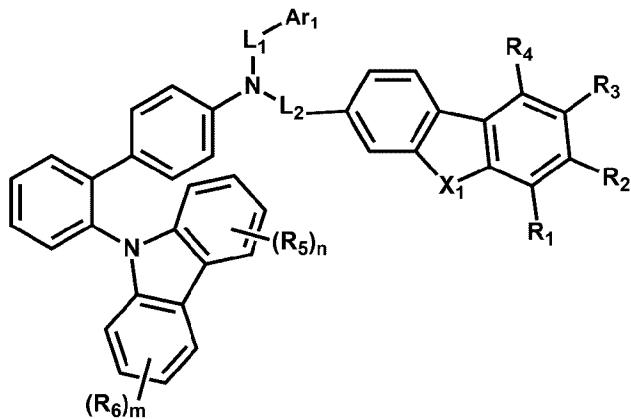
[화학식 5]



[화학식 6]



[화학식 7]



여기서,

n , m , L_1 , L_2 , Ar_1 , X_1 , R_1 내지 R_6 은 제1항에서 정의한 바와 같다.

[청구항 3]

제1항에 있어서,

상기 L_1 및 L_2 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 단일결합 또는 치환 또는 비치환의 탄소수 6 내지 30개의 아릴렌기인 화합물.

[청구항 4]

제1항에 있어서,

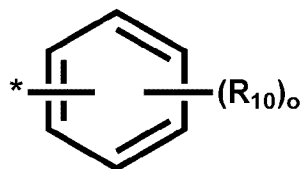
상기 X 는 O 또는 S인 화합물.

[청구항 5]

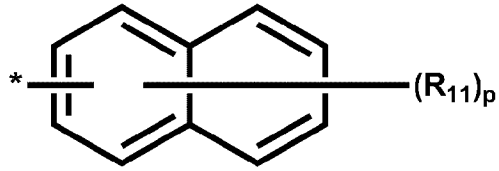
제1항에 있어서,

상기 Ar_1 은 하기 화학식 8 내지 12로 이루어진 군에서 선택되는 화합물:

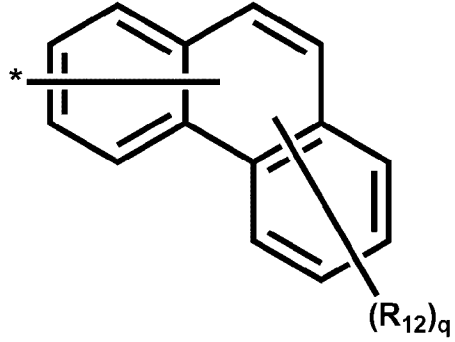
[화학식 8]



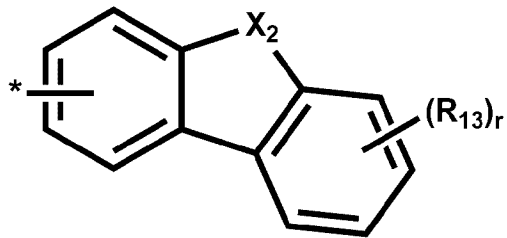
[화학식 9]



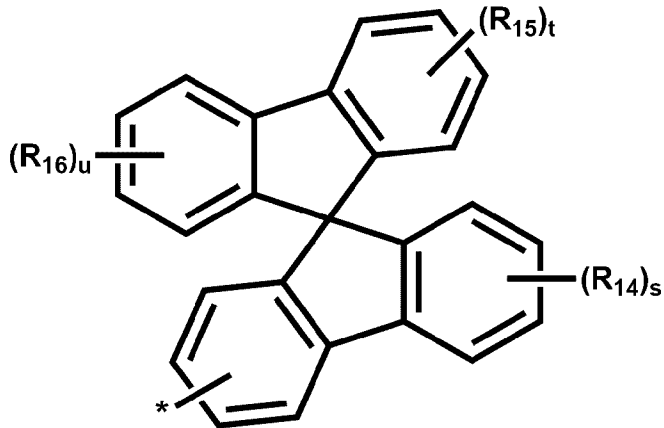
[화학식 10]



[화학식 11]



[화학식 12]



여기서,

*는 결합되는 부분이며,

o는 0 내지 5의 정수이며,

p는 0 내지 7의 정수이며,

q는 0 내지 6의 정수이며,

r, s, t 및 u는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며,

X_2 는 O, N(R_{17}), C(R_{18})(R_{19}) 및 S로 이루어진 군으로부터 선택되며, R_{10} 내지 R_{19} 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 시아노기, 니트로기, 할로젠기, 히드록시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 4의 알킬티오기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 24의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 30의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 7 내지 30의 아르알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 24의 헤테로 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 인접하는 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성할 수 있다.

- [청구항 6] 제1 전극; 상기 제1 전극에 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기전계발광소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중에서 적어도 하나는 제1항에 따른 화합물을 포함하는 것인 유기전계발광소자.
- [청구항 7] 제6항에 있어서, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 정공수송보조층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층으로 이루어진 군으로부터 선택되는 유기 전계 발광 소자.
- [청구항 8] 제6항에 있어서, 상기 유기물층은 정공수송보조층인 유기 전계 발광 소자.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2022/015930

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER C07D 405/12(2006.01)i; C07D 409/12(2006.01)i; H10K 99/00(2023.01)i		
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED		
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) C07D 405/12(2006.01); C07D 209/82(2006.01); C07D 403/10(2006.01); C07D 405/14(2006.01); C07D 409/12(2006.01); H01L 51/00(2006.01)		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Korean utility models and applications for utility models: IPC as above Japanese utility models and applications for utility models: IPC as above		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) eKOMPASS (KIPO internal), STN (Registry, Caplus), Google & keywords: 유기 발광소자(OLED, organic light emitting device, organic electroluminescence), 아릴아민(arylamine), 카바졸(carbazole), 비페닐렌(biphenylene), 정공수송보조층(hole transfer auxiliary layer)		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-2020-0100299 A (ELM CO., LTD.) 26 August 2020 (2020-08-26) See claims 1-8; and paragraphs [0351], [0352], [0454] and [0455].	1-8
X	CN 111732578 A (NANJING TOPTO MATERIALS CO., LTD.) 02 October 2020 (2020-10-02) See claims 1-9.	1-8
X	KR 10-2021-0103386 A (LG CHEM, LTD.) 23 August 2021 (2021-08-23) See claims 1-9; and paragraphs [0196], [0197] and [0219]-[0221].	1-8
X	KR 10-2014-0024734 A (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 03 March 2014 (2014-03-03) See claims 1-6; and paragraph [0063].	1,3-7
PX	CN 113527271 A (NANJING TOPTO MATERIALS CO., LTD.) 22 October 2021 (2021-10-22) See claims 1-10.	1-8
<input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "D" document cited by the applicant in the international application "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search 19 January 2023		Date of mailing of the international search report 20 January 2023
Name and mailing address of the ISA/KR Korean Intellectual Property Office Government Complex-Daejeon Building 4, 189 Cheongsaro, Seo-gu, Daejeon 35208 Facsimile No. +82-42-481-8578		Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2022/015930

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)			Publication date (day/month/year)
KR	10-2020-0100299	A	26 August 2020	WO	2020-171381	A2	27 August 2020
				WO	2020-171381	A3	22 October 2020
CN	111732578	A	02 October 2020	CN	111732578	B	08 December 2020
KR	10-2021-0103386	A	23 August 2021	CN	114728947	A	08 July 2022
				KR	10-2465242	B1	09 November 2022
				WO	2021-162227	A1	19 August 2021
KR	10-2014-0024734	A	03 March 2014	KR	10-2128702	B1	02 July 2020
				TW	201414724	A	16 April 2014
				WO	2014-030921	A1	27 February 2014
CN	113527271	A	22 October 2021	None			

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC)) C07D 405/12(2006.01)i; C07D 409/12(2006.01)i; H10K 99/00(2023.01)j		
B. 조사된 분야 조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재) C07D 405/12(2006.01); C07D 209/82(2006.01); C07D 403/10(2006.01); C07D 405/14(2006.01); C07D 409/12(2006.01); H01L 51/00(2006.01) 조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌 한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC 일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC 국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우)) eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템), STN(Registry, Caplus), 구글 & 키워드: 유기발광소자(OLED, organic light emitting device, organic electroluminescence), 아릴아민(arylamine), 카바졸(carbazole), 비페닐렌(biphenylene), 정공수송보조층(hole transfer auxiliary layer)		
C. 관련 문헌		
카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2020-0100299 A (주식회사 이엔엔) 2020.08.26 청구항 1-8; 단락 [0351], [0352], [0454], [0455]	1-8
X	CN 111732578 A (NANJING TOPTO MATERIALS CO., LTD.) 2020.10.02 청구항 1-9	1-8
X	KR 10-2021-0103386 A (주식회사 엔지화학) 2021.08.23 청구항 1-9; 단락 [0196], [0197], [0219]-[0221]	1-8
X	KR 10-2014-0024734 A (룸엔드하스전자재료코리아유한회사) 2014.03.03 청구항 1-6; 단락 [0063]	1,3-7
PX	CN 113527271 A (NANJING TOPTO MATERIALS CO., LTD.) 2021.10.22 청구항 1-10	1-8
<input type="checkbox"/> 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. <input checked="" type="checkbox"/> 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.		
* 인용된 문헌의 특별 카테고리: “A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌 “D” 본 국제출원에서 출원인이 인용한 문헌 “E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌 “L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌 “O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌 “P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌 “T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌 “X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다. “Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다. “&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌		
국제조사의 실제 완료일	국제조사보고서 발송일	
2023년01월19일 (19.01.2023)	2023년01월20일 (20.01.2023)	
ISA/KR의 명칭 및 우편주소	심사관	
대한민국 특허청 (35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사)	허주형	
팩스 번호 +82-42-481-8578	전화번호 +82-42-481-5373	

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2020-0100299 A	2020/08/26	WO 2020-171381 A2	2020/08/27
		WO 2020-171381 A3	2020/10/22
CN 111732578 A	2020/10/02	CN 111732578 B	2020/12/08
KR 10-2021-0103386 A	2021/08/23	CN 114728947 A	2022/07/08
		KR 10-2465242 B1	2022/11/09
		WO 2021-162227 A1	2021/08/19
KR 10-2014-0024734 A	2014/03/03	KR 10-2128702 B1	2020/07/02
		TW 201414724 A	2014/04/16
		WO 2014-030921 A1	2014/02/27
CN 113527271 A	2021/10/22	없음	