

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2016년 12월 29일 (29.12.2016)



(10) 국제공개번호
WO 2016/208865 A1

- (51) 국제특허분류:
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
C07D 251/12 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2016/004610
- (22) 국제출원일: 2016년 5월 2일 (02.05.2016)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2015-0091331 2015년 6월 26일 (26.06.2015) KR
- (71) 출원인: 삼성에스디아이 주식회사 (SAMSUNG SDI CO., LTD.) [KR/KR]; 17084 경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20, Gyeonggi-do (KR).
- (72) 발명자: 정호국 (JUNG, Ho Kuk); 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 강기욱 (KANG, Giwook); 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 강의수 (KANG, Eui Su); 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 김병구 (KIM, Byungku); 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 김영권 (KIM, Youngkwon); 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 김훈 (KIM, Hun); 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 유은선 (YU, Eun Sun); 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 이상진 (LEE, Sangshin); 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 정성현 (JUNG,

Sung-Hyun); 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 조평석 (CHO, Pyeongseok); 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR).

(74) 대리인: 팬코리아특허법인 (PANKOREA PATENT AND LAW FIRM); 06234 서울시 강남구 논현로 85길 70, 13층, Seoul (KR).

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

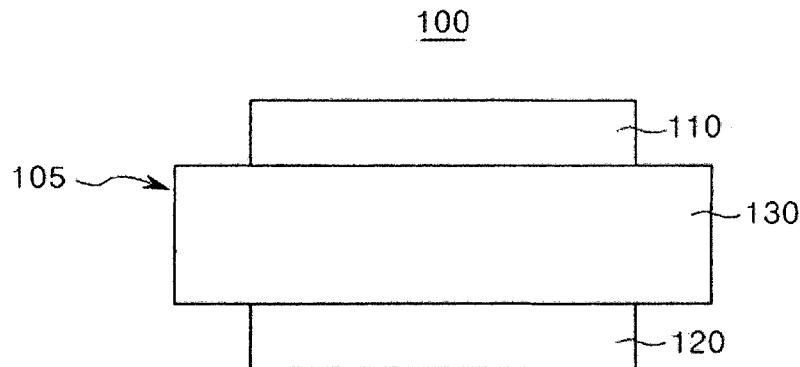
(84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS,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

[다음 쪽 계속]

(54) Title: COMPOSITION FOR ORGANIC OPTOELECTRONIC ELEMENT, ORGANIC OPTOELECTRONIC ELEMENT, AND DISPLAY DEVICE

(54) 발명의 명칭: 유기 광전자 소자용 조성물, 유기 광전자 소자 및 표시 장치

[Fig. 1]



(57) Abstract: The present invention relates to: a composition for an organic optoelectronic element, containing at least one first compound represented by chemical formula 1, at least one second compound among compounds represented by chemical formula 2 and compounds composed of combinations of moieties represented by chemical formula 3 and moieties represented by chemical formula 4, and at least one third compound represented by chemical formula 5; an organic optoelectronic element comprising the same; and a display device comprising the organic optoelectronic element. Chemical formulas 1 to 5 are as described in the specification.

(57) 요약서: 화학식 1로 표현되는 적어도 1종의 제 1 화합물, 화학식 2로 표현되는 화합물, 및 화학식 3으로 표현되는 모이어티와 화학식 4로 표현되는 모이어티의 조합으로 이루어진 화합물 중 적어도 1종의 제 2 화합물, 및 화학식 5로 표현되는 적어도 1종의 제 3 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자용 조성물, 이를 포함하는 유기 광전자 소자 및 상기 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치에 관한 것이다. 화학식 1 내지 5는 명세서에 기재한 바와 같다.



WO 2016/208865 A1

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

【명세서】**【발명의 명칭】**

유기 광전자 소자용 조성물, 유기 광전자 소자 및 표시 장치

【기술분야】

5 유기 광전자 소자 및 표시 장치에 관한 것이다.

【배경기술】

유기 광전자 소자(organic optoelectric diode)는 전기 에너지와 광 에너지를 상호 전환할 수 있는 소자이다.

유기 광전자 소자는 동작 원리에 따라 크게 두 가지로 나눌 수 있다.

10 하나는 광 에너지에 의해 형성된 엑시톤(exciton)이 전자와 정공으로 분리되고 상기 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되면서 전기 에너지를 발생하는 광전 소자이고, 다른 하나는 전극에 전압 또는 전류를 공급하여 전기 에너지로부터 광 에너지를 발생하는 발광 소자이다.

유기 광전자 소자의 예로는 유기 광전 소자, 유기 발광 소자, 유기 태양
15 전지 및 유기 감광체 드럼(organic photo conductor drum) 등을 들 수 있다.

이 중, 유기 발광 소자(organic light emitting diode, OLED)는 근래 평판 표시 장치(flat panel display device)의 수요 증가에 따라 크게 주목 받고 있다. 상기 유기 발광 소자는 유기 발광 재료에 전류를 가하여 전기 에너지를 빛으로 전환시키는 소자로서, 통상 양극(anode)과 음극(cathode) 사이에 유기 층이 삽입된 구조로
20 이루어져 있다.

장수명 풀 칼라 디스플레이의 가장 큰 문제가 되고 있는 요소 중의 하나는 발광 소자의 효율을 높이는 것이다. 따라서 인광 재료를 이용한 고효율 유기 발광 소자의 개발을 위해 많은 연구가 진행되고 있는 중이다. 본 발명에서는 이러한 문제점을 해결하기 위해 고효율 인광 재료를 이용한 유기 발광 소자를
25 제공하고자 한다.

【발명의 상세한 설명】**【기술적 과제】**

일 구현예는 고효율 및 장수명 특성을 구현할 수 있는 유기 광전자 소자용 조성물을 제공한다.

30 다른 구현예는 상기 유기 광전자 소자용 조성물을 포함하는 유기 광전자

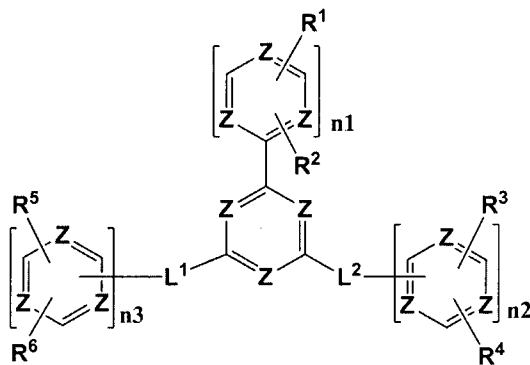
소자를 제공한다.

또 다른 구현예는 상기 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치를 제공한다.

【기술적 해결방법】

- 5 일 구현예에 따르면, 하기 화학식 1로 표현되는 적어도 1종의 제1 화합물, 하기 화학식 2로 표현되는 화합물, 및 하기 화학식 3으로 표현되는 모이어티와 하기 화학식 4로 표현되는 모이어티의 조합으로 이루어진 화합물 중 적어도 1종의 제2 화합물, 및 하기 화학식 5로 표현되는 적어도 1종의 제 3화합물을 포함하는 유기 광전자 소자용 조성물을 제공한다.

10 [화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Z는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^a이고,

Z 중 적어도 하나는 N이고,

- 15 R¹ 내지 R⁶, 및 R^a는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

R¹ 내지 R⁶, 및 R^a는 각각 독립적으로 존재하거나, 인접한 기는 서로 연결되어 고리를 형성하고,

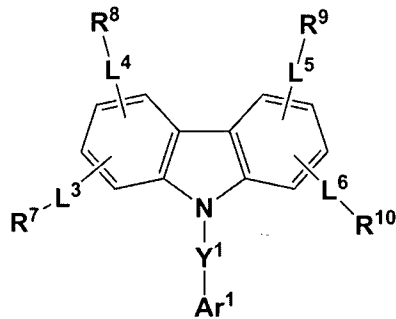
- 20 L¹ 및 L²는 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

n1은 1이고,

n2 및 n3은 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고,

- 25 1 ≤ n2 + n3 ≤ 2이고;

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

L³ 내지 L⁶, 및 Y¹은 각각 독립적으로, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6
 5 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기, 또는
 이들의 조합이고,

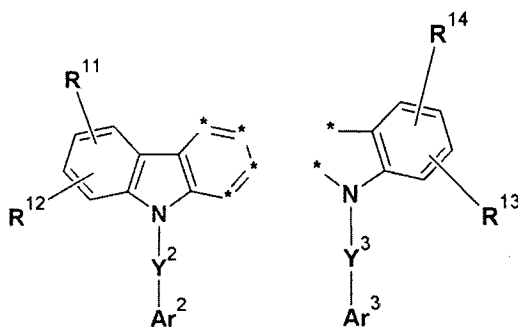
Ar¹은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2
 내지 C30 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

R⁷ 내지 R¹⁰는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지
 10 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2
 내지 C50 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

R⁷ 내지 R¹⁰, 및 Ar¹ 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기
 또는 치환 또는 비치환된 카바졸기를 포함하고,

[화학식 3]

[화학식 4]



상기 화학식 3 및 4에서,

Y² 및 Y³는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30
 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의
 조합이고,

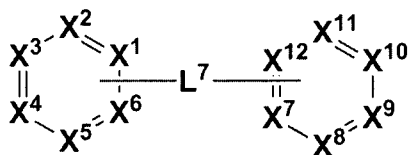
Ar² 및 Ar³는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기,
 20 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고,

R^{11} 내지 R^{14} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C50 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고,

- 상기 화학식 3의 인접한 두 개의 *는 상기 화학식 4의 두 개의 *와
 5 연결되어 융합고리를 형성하고 상기 화학식 3에서 융합고리를 형성하지 않은 *는 각각 독립적으로 CR^e 이고,

R^e 는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C12 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고;

10 [화학식 5]



상기 화학식 5에서,

X^1 내지 X^{12} 는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^d 이고,

X^1 내지 X^6 중 적어도 하나는 N이고,

- 15 X^7 내지 X^{12} 중 적어도 하나는 N이고,

R^d 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 히드록시기, 티올기, 또는 이들의 조합이고,
 20 R^d 는 각각 독립적으로 존재하거나, 인접한 R^d 는 서로 연결되어 고리를 형성하고,

L^7 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

- 25 상기 화학식 1 내지 5의 "치환"은 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로고리기, C1 내지 C20 알콕시기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는

시아노기로 치환된 것을 의미한다.

다른 구현예에 따르면, 상기 유기 광전자 소자용 조성물을 포함하는 유기 광전자 소자를 제공한다.

또 다른 구현예에 따르면, 상기 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치를
5 제공한다.

【유리한 효과】

고효율 · 장수명의 유기 광전자 소자를 구현할 수 있다.

【도면의 간단한 설명】

도 1 및 도 2는 일 구현예에 따른 유기 광전자 소자를 개략적으로 도시한
10 단면도이다.

<부호의 설명>

100, 200: 유기발광소자

105: 유기층

110: 애노드

15 120: 캐소드

130: 발광층

140: 보조층

【발명을 실시를 위한 최선의 형태】

이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서
20 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할 청구범위의 범주에 의해 정의될 뿐이다.

본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, C1 내지 C30 아민기, 니트로기, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C30 알케닐기, C1 내지 C30 알키닐기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로고리기, C1 내지 C20 알콕시기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

또한 상기 치환된 C1 내지 C30 아민기, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30
30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30

헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 C1 내지 C20 알콕시기 중 인접한 두 개의 치환기가 연결되어 융합 고리를 형성할 수도 있다. 예를 들어, 상기 치환된 C6 내지 C30 아릴기는 인접한 또 다른 치환된 C6 내지 C30 아릴기와 연결되어 치환 또는 비치환된 플루오렌 고리를

5 형성할 수 있고, 상기 치환된 C6 내지 C30 아릴기는 인접한 C1 내지 C30 알케닐기 등과 연결되어 트리페닐렌 고리, 나프탈렌 고리, 피라진 고리, 퀴나졸린 고리, 퀴녹살린 고리, 페난트롤린 고리 등을 형성할 수 있다.

본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O, S, P 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고,

10 나머지는 탄소인 것을 의미한다.

본 명세서에서 "알킬(alkyl)기"란 별도의 정의가 없는 한, 지방족 탄화수소기를 의미한다. 알킬기는 어떠한 이중결합이나 삼중결합을 포함하고 있지 않은 "포화 알킬(saturated alkyl)기"일 수 있다.

상기 알킬기는 C1 내지 C30인 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로

15 알킬기는 C1 내지 C20 알킬기 또는 C1 내지 C10 알킬기일 수도 있다. 예를 들어, C1 내지 C4 알킬기는 알킬쇄에 1 내지 4 개의 탄소원자가 포함되는 것을 의미하며, 메틸, 에틸, 프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소-부틸, sec-부틸 및 t-부틸로 이루어진 군에서 선택됨을 나타낸다.

상기 알킬기는 구체적인 예를 들어 메틸기, 에틸기, 프로필기,

20 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등을 의미한다.

본 명세서에서 "아릴(aryl)기"는 탄화수소 방향족 모이어티를 하나 이상 갖는 그룹을 총괄하는 개념으로서,

탄화수소 방향족 모이어티의 모든 원소가 p-오비탈을 가지면서, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 형태, 예컨대 페닐기, 나프틸기 등을

25 포함하고,

2 이상의 탄화수소 방향족 모이어티들이 시그마 결합을 통하여 연결된 형태, 예컨대 바이페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기 등을 포함하며,

2 이상의 탄화수소 방향족 모이어티들이 직접 또는 간접적으로 융합된

30 비방향족 융합 고리도 포함할 수 있다. 예컨대, 플루오레닐기 등을 들 수 있다.

아릴기는 모노시클릭, 폴리시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.

본 명세서에서 "헤테로고리기(heterocyclic group)"는 헤테로아릴기를 포함하는 상위 개념으로서, 아릴기, 시클로알킬기, 이들의 융합고리 또는 이들의
5 조합과 같은 고리 화합물 내에 탄소 (C) 대신 N, O, S, P 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 적어도 한 개를 함유하는 것을 의미한다. 상기 헤테로고리기가 융합고리인 경우, 상기 헤테로고리기 전체 또는 각각의 고리마다 헤테로 원자를 한 개 이상 포함할 수 있다.

일 예로 "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 탄소 (C) 대신 N, O, S, P
10 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 적어도 한 개 함유하는 것을 의미한다. 2 이상의 헤테로아릴기는 시그마 결합을 통하여 직접 연결되거나, 상기 C2 내지 C60 헤테로아릴기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다. 상기 헤테로아릴기가 융합고리인 경우, 각각의 고리마다 상기 헤테로 원자를 1 내지 3개 포함할 수 있다.

15 상기 헤테로아릴기는 구체적인 예를 들어, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등을 포함할 수 있다.

보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 및/또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C50 헤테로고리기는, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된
20 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸릴기, 치환 또는
25 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된

30

- 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸닐기, 치환 또는 비치환된 인돌닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된
- 5 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈옥사진닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진닐기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페나진닐기, 치환 또는 비치환된 페노티아진닐기, 치환 또는 비치환된 페녹사진닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란닐기, 또는 치환 또는 비치환된
- 10 디벤조티오펜닐기, 또는 이들의 조합일 수 있으나, 이에 제한되지는 않는다.

본 명세서에서, 단일 결합이란 탄소 또는 탄소 이외의 헤테로 원자를 경유하지 않고 직접 연결되는 결합을 의미하는 것으로, 구체적으로 L이 단일 결합이라는 의미는 L과 연결되는 치환기가 중심 코어에 직접 연결되는 것을 의미한다. 즉, 본 명세서에서 단일 결합이란 탄소를 경유하는 메틸렌 등을

15 의미하는 것이 아니다.

본 명세서에서, 정공 특성이란, 전기장(electric field)을 가했을 때 전자를 공여하여 정공을 형성할 수 있는 특성을 말하는 것으로, HOMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 양극에서 형성된 정공의 발광층으로의 주입, 발광층에서 형성된 정공의 양극으로의 이동 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다.

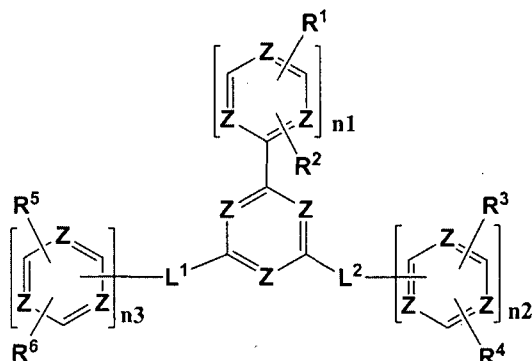
20 또한 전자 특성이란, 전기장을 가했을 때 전자를 받을 수 있는 특성을 말하는 것으로, LUMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 음극에서 형성된 전자의 발광층으로의 주입, 발광층에서 형성된 전자의 음극으로의 이동 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다.

25 이하 일 구현예에 따른 유기 광전자 소자용 조성물에 대하여 설명한다.

일 구현예에 따른 유기 광전자 소자용 조성물은 하기 화학식 1로 표현되는 적어도 1종의 제1 화합물, 하기 화학식 2로 표현되는 화합물, 및 하기 화학식 3으로 표현되는 모이어티와 하기 화학식 4로 표현되는 모이어티의 조합으로 이루어진 화합물 중 적어도 1종의 제2 화합물, 및 하기 화학식 5로

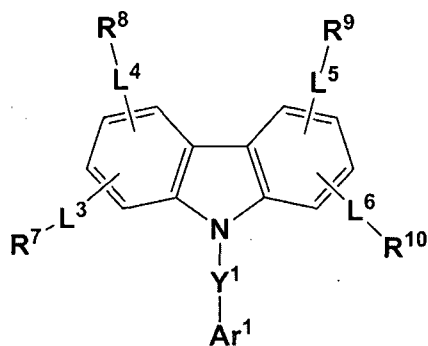
30 표현되는 적어도 1종의 제3 화합물을 포함할 수 있다.

[화학식 1]



- 상기 화학식 1에서, Z는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^a이고, Z 중 적어도 하나는 N이고, R¹ 내지 R⁶, 및 R^a는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 또는 이들의 조합이고, R¹ 내지 R⁶, 및 R^a는 각각 독립적으로 존재하거나, 인접한 기는 서로 연결되어 고리를 형성하고, L¹ 및 L²는 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고, n1은 1 이고, n2 및 n3은 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고, 1 ≤ n2 + n3 ≤ 2이고;

[화학식 2]

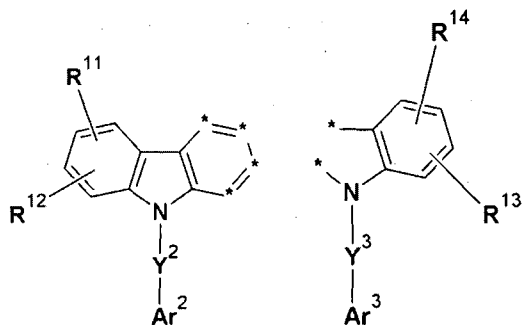


- 상기 화학식 2에서, L³ 내지 L⁶, 및 Y¹은 각각 독립적으로, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고, Ar¹은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고, R⁷ 내지 R¹⁰는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C50 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고, R⁷ 내지 R¹⁰ 및 Ar¹ 중 적어도 하나는

치환 또는 비치환된 트리페닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 카바졸기를 포함하고,

[화학식 3]

[화학식 4]



상기 화학식 3 및 4에서, Y² 및 Y³는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환

5 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30

헤테로아릴렌기, 또는 이들의 조합이고, Ar² 및 Ar³는 각각 독립적으로 치환 또는

비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기,

또는 이들의 조합이고, R¹¹ 내지 R¹⁴는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는

비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C50 아릴기, 치환

10 또는 비치환된 C2 내지 C50 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고, 상기 화학식

3의 인접한 두 개의 *는 상기 화학식 4의 두 개의 *와 연결되어 융합고리를

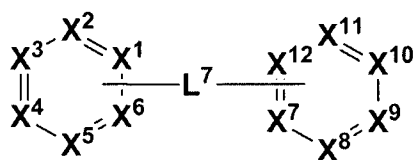
형성하고 상기 화학식 3에서 융합고리를 형성하지 않은 *는 각각 독립적으로

CR^c이고, R^c는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는

비치환된 C6 내지 C12 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C12 헤테로고리기,

15 또는 이들의 조합이고;

[화학식 5]



상기 화학식 5에서, X¹ 내지 X¹²는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^d이고, X¹

내지 X⁶ 중 적어도 하나는 N이고, X⁷ 내지 X¹² 중 적어도 하나는 N이고, R^d는

20 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환

또는 비치환된 C1 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30

알키닐기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지

C30 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴티오기, 치환 또는

비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 히드록시기, 티올기, 또는 이들의 조합이고, R^d 는 각각 독립적으로 존재하거나, 인접한 R^d 는 서로 연결되어 고리를 형성하고, L^7 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

5 상기 화학식 1 내지 5의 "치환"은 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로고리기, C1 내지 C20 알콕시기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

10 상기 제 1 화합물은 적어도 하나의 질소를 함유하는 고리를 포함함으로써, 전기장 인가 시 전자를 받기 쉬운 구조가 되어 전자 주입량이 증가되어 전자 특성이 상대적으로 강한 바이폴라(bipolar) 특성을 가질 수 있다. 상기 제2 화합물은 카바졸 모이어티를 포함함으로써 정공 특성이 상대적으로 강한 바이폴라(bipolar) 특성을 가질 수 있다.

15 상기 제1 화합물과 상기 제2 화합물을 함께 발광층에 사용하는 경우, 전하의 이동성을 높이고 안정성을 높임으로써 발광 효율 및 수명 특성을 개선할 수 있는 장점이 있다.

 반면, 도펀트와 호스트 간 HOMO 에너지 레벨 차이로 인한 트랩 현상으로 인하여 전자 수송 능력이 급격히 감소하면서 유기 광전자 소자의 구동 전압을
20 증가시키는 문제가 있었다.

 이에, 전자 주입 및 전자 수송 능력이 우수한 상기 제3 화합물을 추가하여 도펀트와 호스트 간 트랩 현상을 감소시키거나 최소화하고, 이로부터 구동 전압을 획기적으로 낮추면서도 효율 및 수명이 우수한 유기 광전자 소자를 제작하고자 하였다.

25 전자 주입 및 전자 수송 능력이 우수한 상기 제3 화합물을 추가함으로써, 제1 화합물과 제2 화합물만 포함할 경우에 나타날 수 있는 구동 전압 상승의 문제점을 해결할 수 있고, 이로 인해 소자의 전력 효율 성능을 효과적으로 개선할 수 있다.

 본 발명의 일 구현예에 따른 화학식 1의 L^1 및 L^2 는 전술한 바와 같이
30 각각 독립적으로, 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환

또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기일 수 있고,

구체적으로는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기일 수 있다.

예컨대, 단일결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된

바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 쿼터페닐렌기,

5 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 또는 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기일 수 있다.

상기 연결기에 대한 구체 구조식은 본 명세서 내 그룹 2에 기재한 바와 같다.

본 발명의 일 구현예에 따른 화학식 1의 R^1 및 R^2 는 전술한 바와 같이,
10 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합일 수 있고,

구체적으로는 수소, 중수소, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기일 수 있다. 예컨대, R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는
15 비치환된 페닐기, 또는 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 또는 이들의 조합에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

본 발명의 일 구현예에 따른 화학식 1의 R^3 내지 R^6 은 전술한 바와 같이, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의
20 조합일 수 있고, R^3 내지 R^6 은 각각 독립적으로 존재하거나 인접한 기가 서로 연결되어 고리를 형성하는 융합된 형태일 수 있다,

구체적으로는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있고,

상기 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기의 예로서, 치환 또는
25 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 쿼터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 또는 이들의 조합을 들 수 있고,

상기 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기의 예로서, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된
30 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된

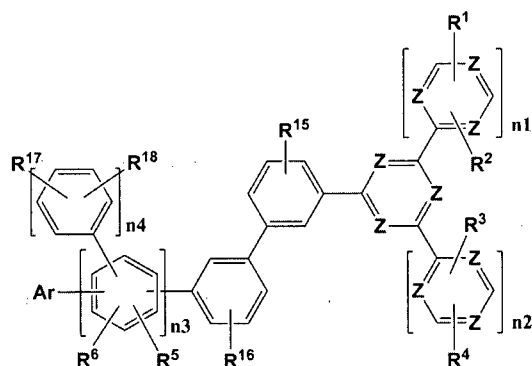
퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 또는 이들의 조합을 들 수 있다.

R^3 내지 R^6 은 인접한 기가 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기 등을 형성할 수 있다.

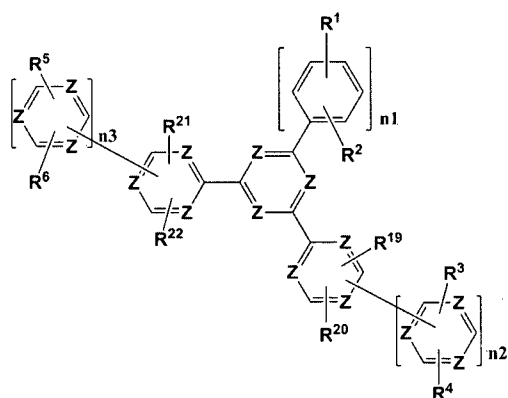
상기 R^3 내지 R^6 의 가장 구체적인 예는, 수소, 또는 하기 그룹 1에 나열된 치환기에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

예컨대 상기 제1 화합물은 하기 화학식 1-I 내지 화학식 1-III 중 어느 하나로 표현될 수 있다.

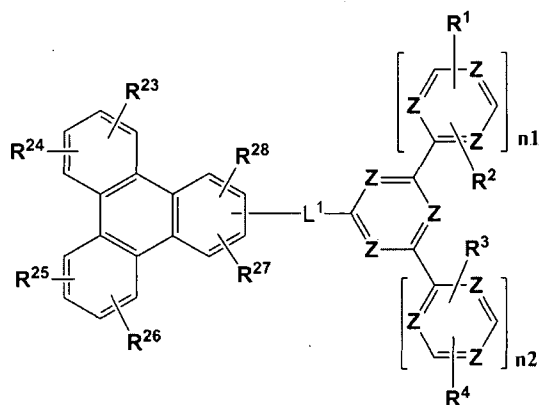
[화학식 1-I]



[화학식 1-II]



[화학식 1-III]



상기 화학식 1-I 내지 1-III에서, Z, R¹ 내지 R⁶, L¹, 및 n1 내지 n3는
상기에서 정의한 바와 같고,

- 5 R¹⁵ 내지 R²⁸은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1
내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴기, 치환 또는 비치환된
C2 내지 C30 헤테로아릴기, 또는 이들의 조합이고,

Ar은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2
내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고,

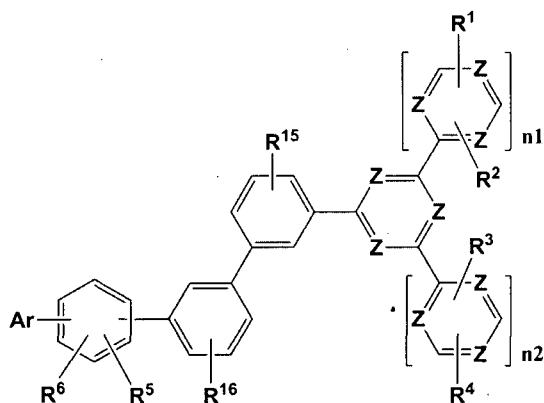
- 10 R¹ 내지 R⁶, R^a, 그리고 R¹⁷ 및 R¹⁸은 각각 독립적으로 존재하거나, 인접한
기는 서로 연결되어 고리를 형성하고,

n4는 0 내지 2의 정수이고,

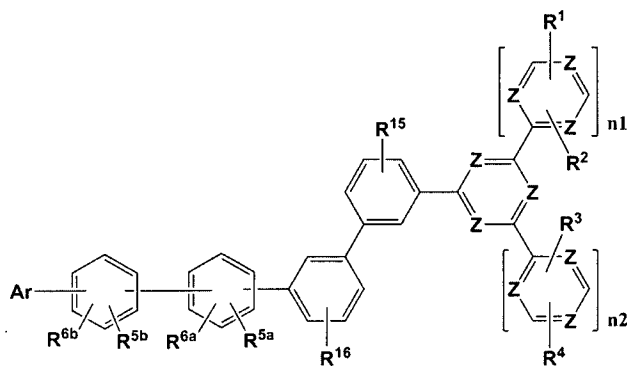
"치환"은 상기에서 정의한 바와 같다.

- 15 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1-I 은 하기 화학식 1-IA 내지 1-IC 중
어느 하나로 표현될 수 있다.

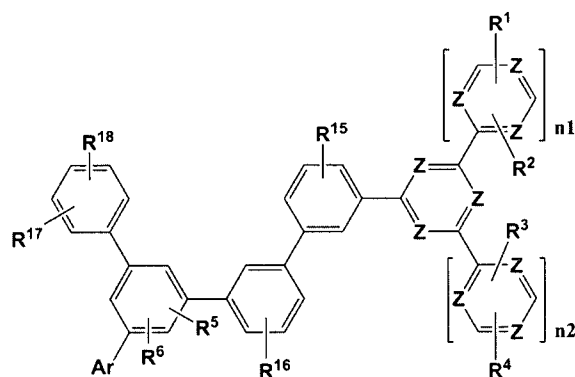
[화학식 1-IA]



[화학식 1-I B]



[화학식 1-I C]



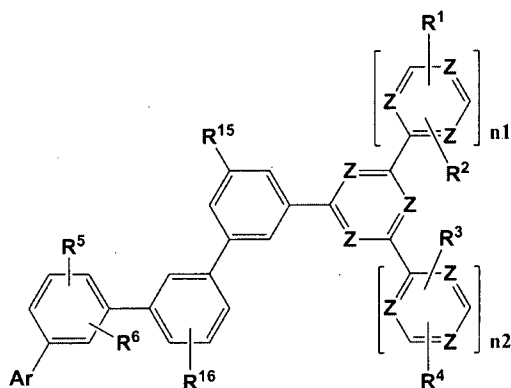
- 5 상기 화학식 1-I A 내지 1-I C에서, Z, R¹ 내지 R⁶, R¹⁵ 내지 R¹⁸, n1 및 n2는 전술한 바와 같고, R^{5a} 및 R^{5b}, R^{6a} 및 R^{6b}, 그리고 Ar은 상기 R⁵ 및 R⁶의 정의와 동일하고,

"치환"은 상기에서 정의한 바와 같다.

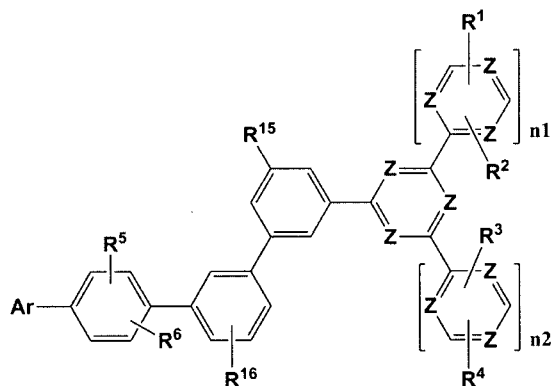
- 구체적으로, 여기서 Ar은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환
10 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이다.

구체적으로 상기 화학식 1-I A는 Ar의 치환 위치에 따라 하기 화학식 1-I-1a 또는 1-I-2a로 표현될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[화학식 1-I-1a]

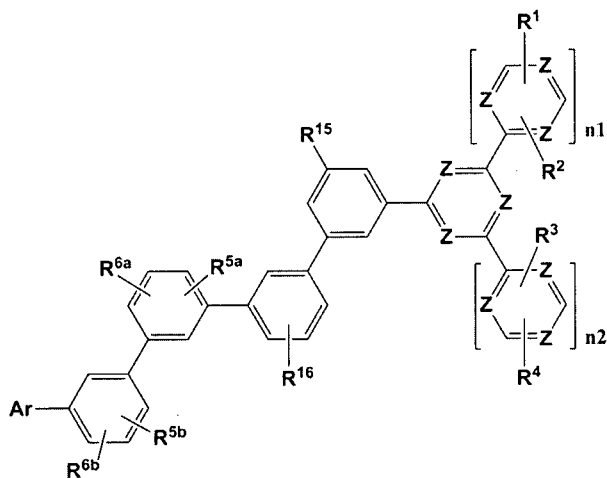


[화학식 1-I-2a]

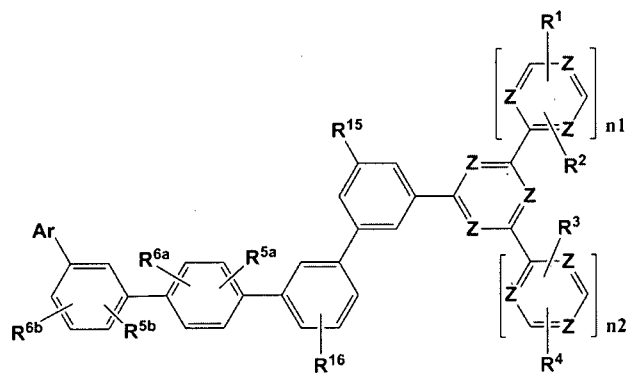


구체적으로 상기 화학식 1-I B는 아릴기 부분의 연결기 및 Ar의 치환
 위치에 따라 하기 화학식 1-I-1b 내지 1-I-7b 중 어느 하나로 표현될 수 있으나,
 5 이에 한정되는 것은 아니다.

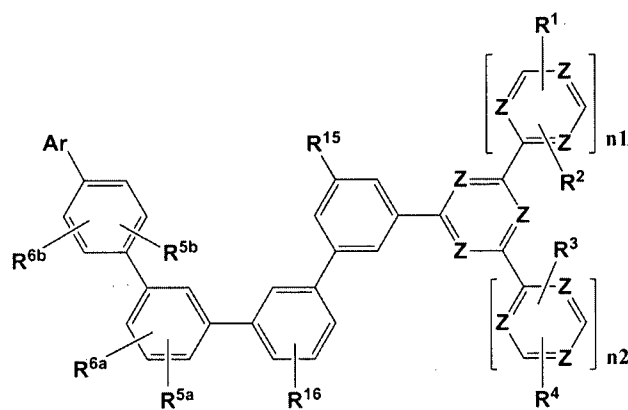
[화학식 1-I-1b]



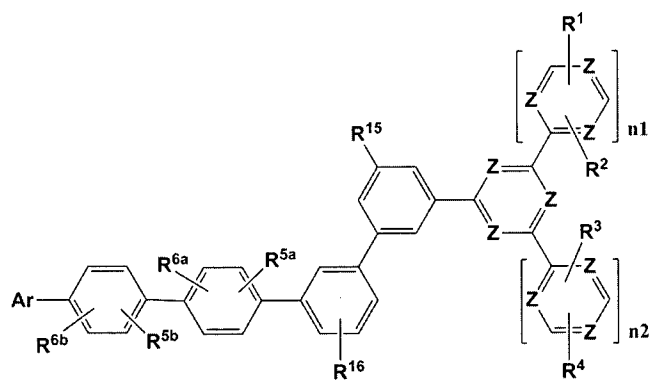
[화학식 1-I-2b]



[화학식 1-I-3b]

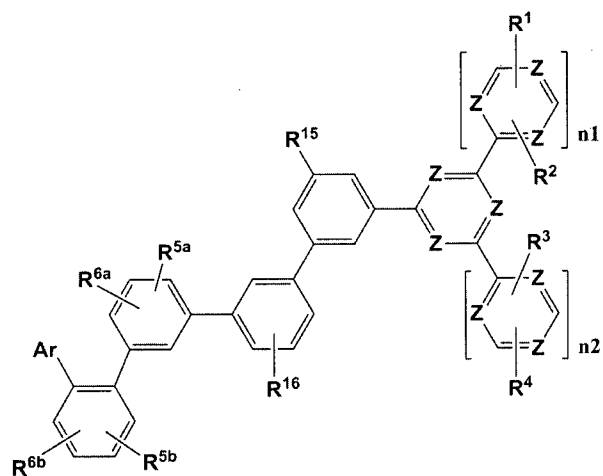


[화학식 1-I-4b]

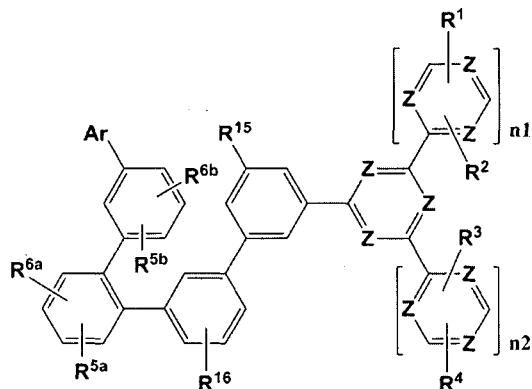


5

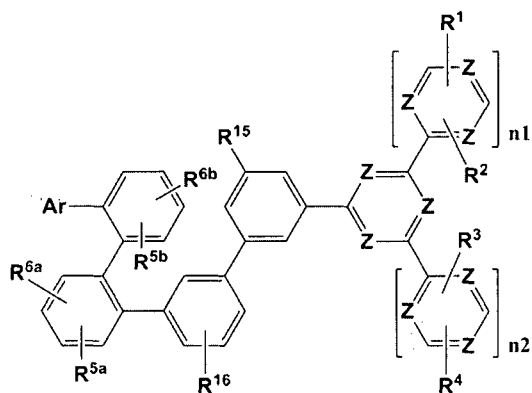
[화학식 1-I-5b]



[화학식 1-I-6b]

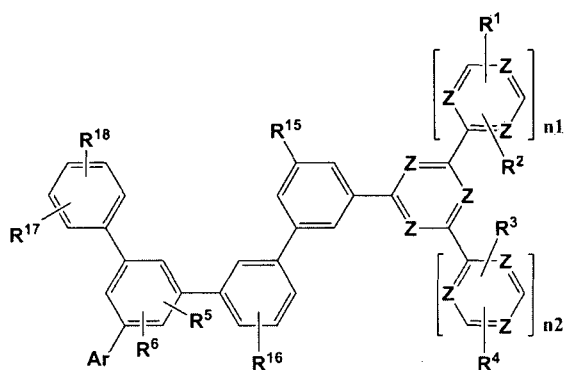


[화학식 1-I-7b]



- 5 구체적으로 상기 화학식 1-I C는 R¹⁵의 연결 위치가 특정되어 하기 화학식 1-I-1c로 표현될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

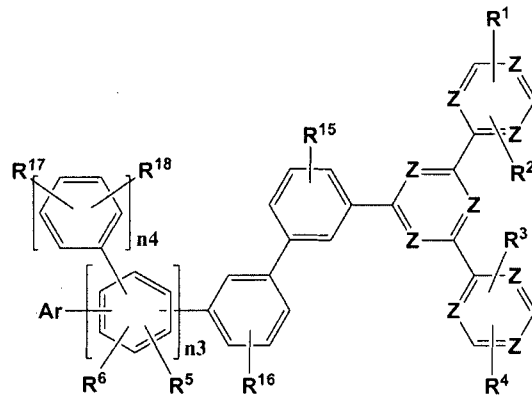
[화학식 1-I-1c]



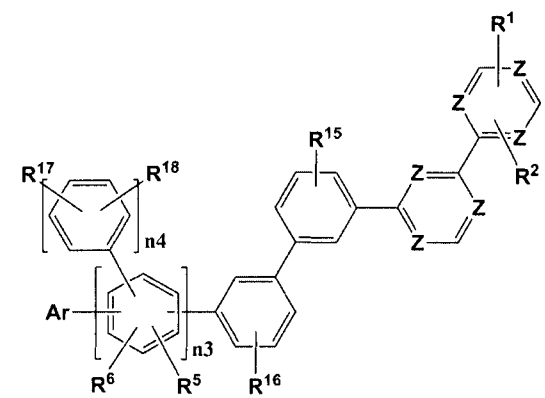
- 상기 화학식 1-I-1a 내지 1-I-2a, 1-I-1b 내지 1-I-7b, 및 1-I-1c에서, Z,
10 R¹ 내지 R⁶, R^{5a}, R^{5b}, R^{6a}, R^{6b}, R¹⁵ 내지 R¹⁸, n1, n2, 및 Ar은 전술한 바와 같다.

한편, 상기 화학식 1-I의 n1은 예컨대 n1은 1의 정수이고, n2는 1의 정수로서 하기 화학식 1-I-c 또는 1-I-d로 표현될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[화학식 1- I -c]



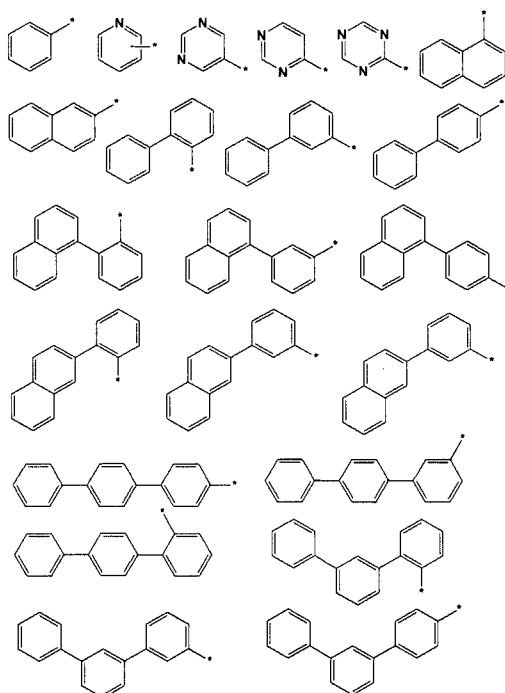
[화학식 1- I -d]

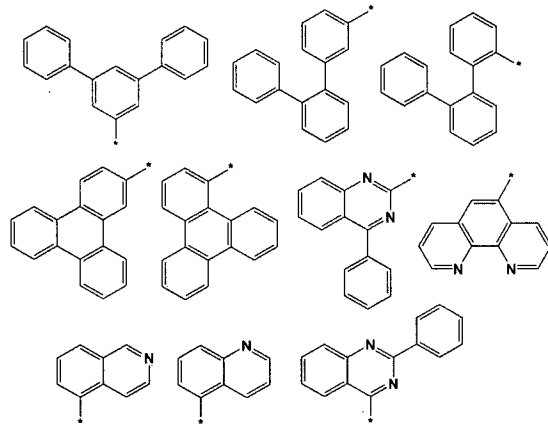


상기 Ar은 예컨대, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 또는 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기일 수 있다.

더욱 구체적으로 상기 Ar은 하기 그룹 1에 나열된 치환 또는 비치환된 기에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[그룹 1]





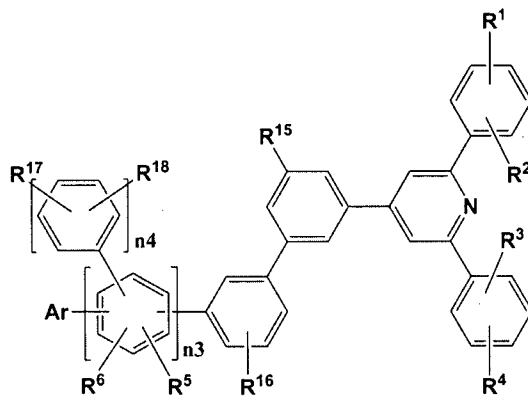
상기 그룹 1에서, *은 연결 지점이다.

상기 화학식 1-I은 질소의 위치 및 개수에 따라 예컨대 하기 화학식 1-I-e 내지 1-I-m 중 어느 하나로 표현될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

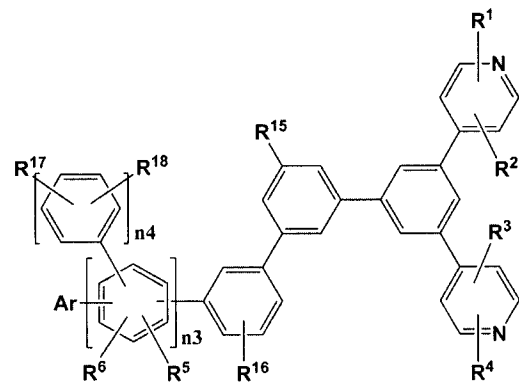
5

[화학식 1-I-e]

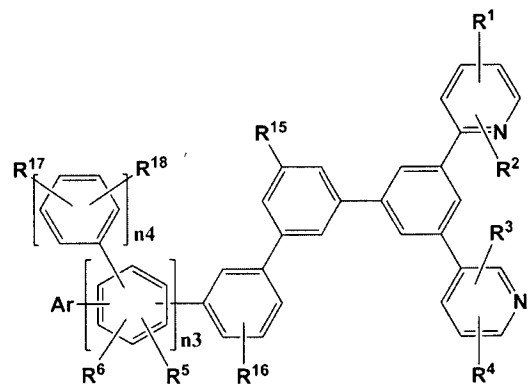
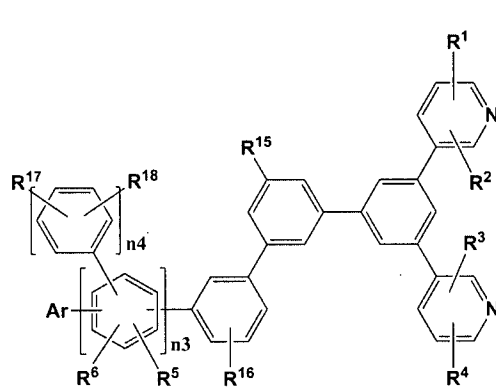
[화학식 1-I-f]



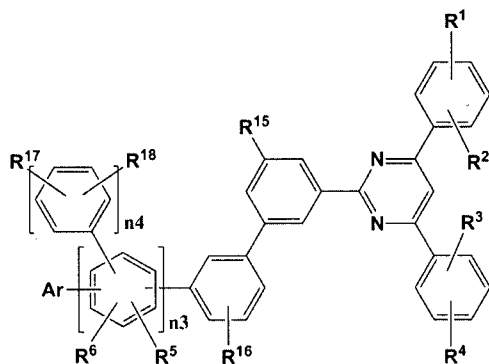
[화학식 1-I-g]



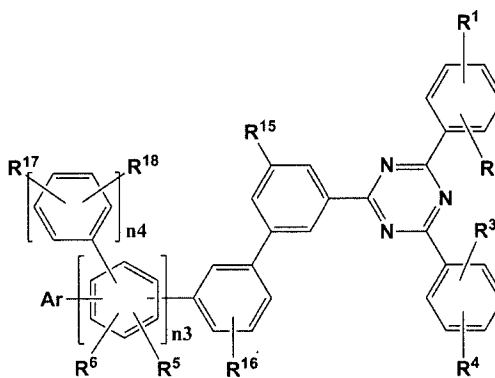
[화학식 1-I-h]



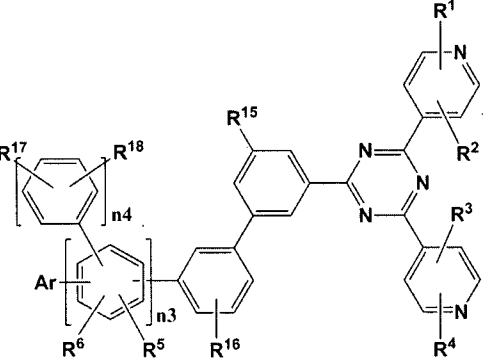
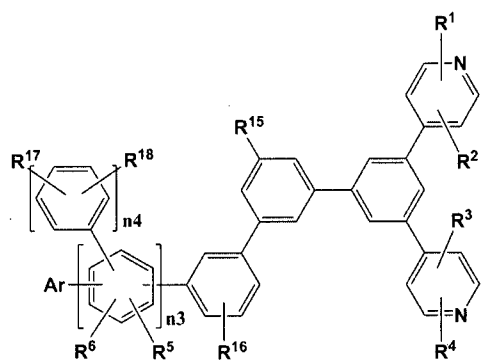
[화학식 1-I-i]



[화학식 1-I-j]



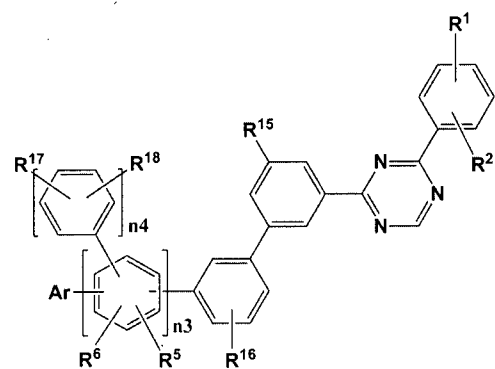
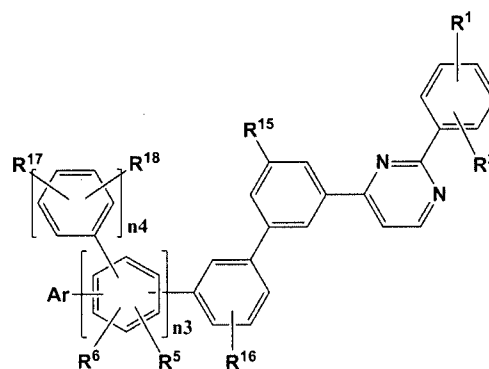
[화학식 1-I-k]



5

[화학식 1-I-l]

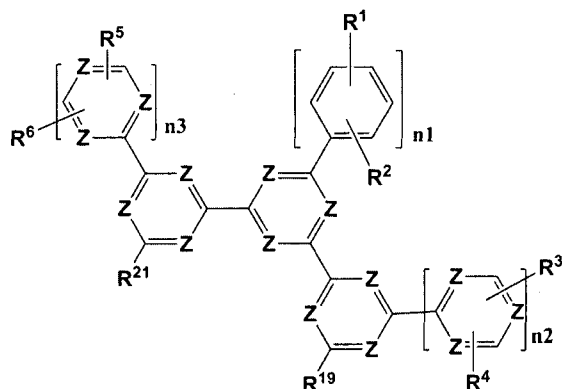
[화학식 1-I-m]



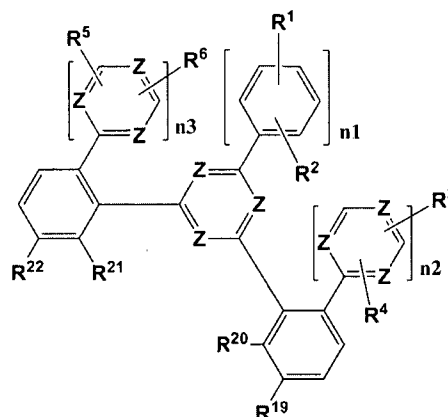
상기 화학식 1-I-e 내지 1-I-m에서, R^1 내지 R^6 , R^{15} 내지 R^{18} , Ar, $n1$ 내지 $n4$ 의 정의는 전술한 바와 같다.

일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1-I은 하기 화학식 1-IIA 또는 1-IIB로
10 표현될 수 있다.

[화학식 1-ⅡA]



[화학식 1-ⅡB]



상기 화학식 1-ⅡA 및 1-ⅡB에서, Z, R¹ 내지 R⁶, R¹⁹ 내지 R²², 및 n1 내지 n3는 전술한 바와 같고,

- 5 구체적으로, 상기 화학식 1-Ⅱ의 R¹ 및 R²는 수소, 중수소, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴기일 수 있다. 예컨대, 모두 수소일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

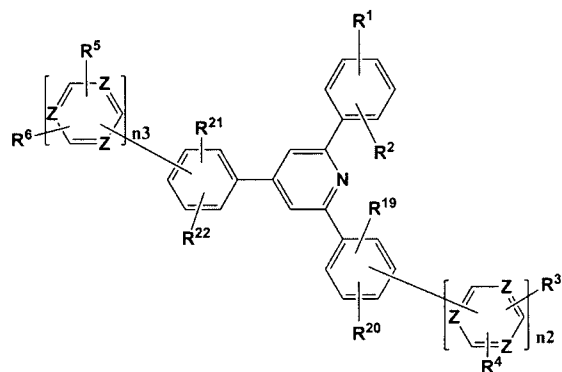
- 구체적으로, 상기 화학식 1-Ⅱ의 R³ 내지 R⁶는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 또는 치환 또는 비치환된 키나졸리닐기일 수 있다. 예컨대 상기 그룹 1에 나열된 치환 또는 비치환된 기에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- 15 구체적으로, 상기 화학식 1-Ⅱ의 R¹⁹ 내지 R²²는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 피리딜기일 수 있다. 예컨대, 상기 그룹 1에 나열된 치환 또는 비치환된 기 중에서 선택될 수 있다.

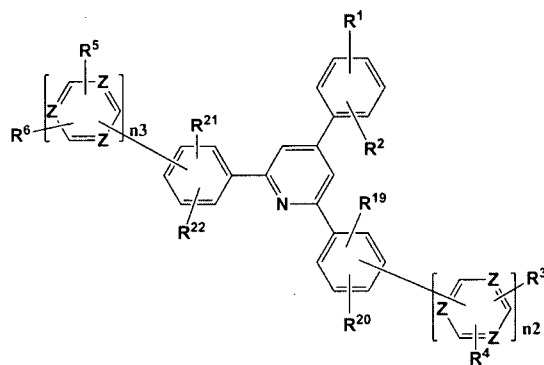
여기서, "치환"은 상기에서 정의한 바와 같다.

- 20 상기 화학식 1-Ⅱ은 질소의 위치 및 개수에 따라 예컨대 하기 화학식 1-Ⅱ-a 내지 1-Ⅱ-h 중 어느 하나로 표현될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

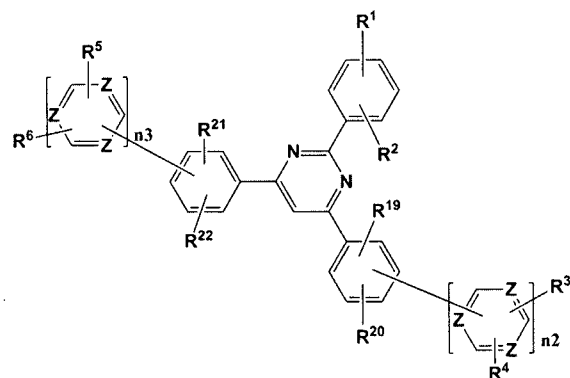
[화학식 1-II-a]



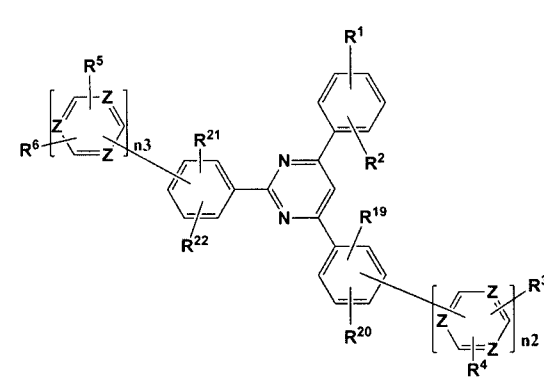
[화학식 1-II-b]



[화학식 1-II-c]

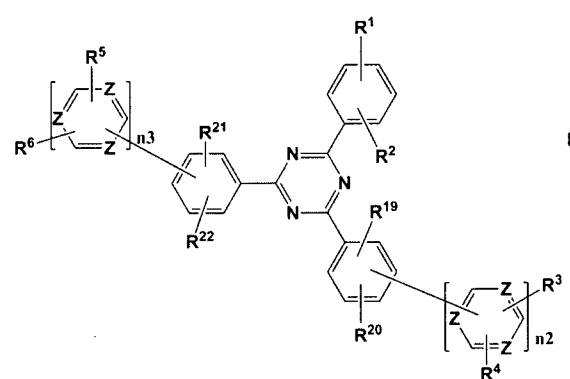


[화학식 1-II-d]

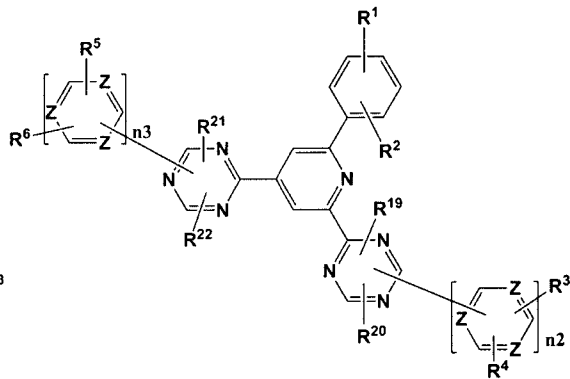


5

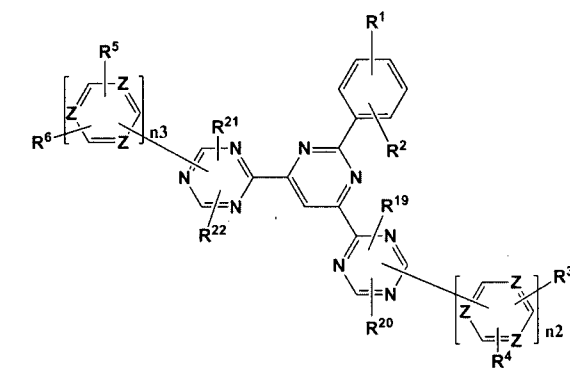
[화학식 1-II-e]



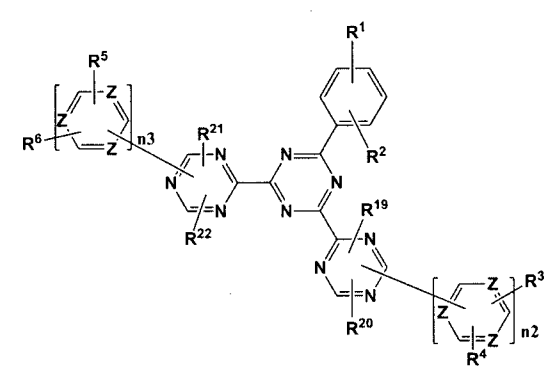
[화학식 1-II-f]



[화학식 1-II-g]



[화학식 1-II-h]



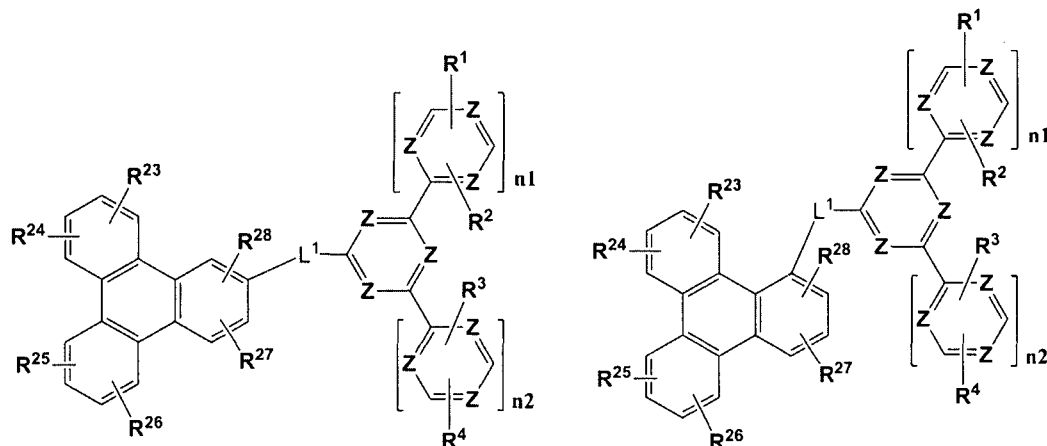
상기 화학식 1-II-a 내지 1-II-h에서, Z, R¹ 내지 R⁶, R¹⁹ 내지 R²², 및 n₂ 및

n3의 정의는 전술한 바와 같다.

일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1-Ⅲ은 트리페닐렌기의 결합 위치에 따라 하기 화학식 1-ⅢA 또는 1-ⅢB로 표현될 수 있다.

[화학식 1-ⅢA]

[화학식 1-ⅢB]



상기 화학식 1-ⅢA 및 1-ⅢB에서, Z, R¹ 내지 R⁴, R²³ 내지 R²⁸, L¹, n1 및 n2는 전술한 바와 같다.

구체적으로, 상기 화학식 1-Ⅲ의 R¹ 내지 R⁴, 및 R²³ 내지 R²⁸은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴기 또는 이들의 조합이고, L¹은 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 테르페닐렌기일 수 있다.

상기 트리페닐렌기에 치환된 6원환은 상기 트리페닐렌기에 직접 또는 간접적으로 연결된 모든 6원환을 말하는 것으로, 탄소 원자, 질소 원자 또는 이들의 조합으로 이루어진 6원환을 포함한다.

상기 화학식 1-Ⅲ에서, 트리페닐렌기에 치환된 6원환의 총 개수는 6개 이하일 수 있다.

상기 화학식 1-Ⅲ로 표현되는 제1화합물은 트리페닐렌기와 적어도 하나의 질소 함유 헤테로아릴기를 포함한다.

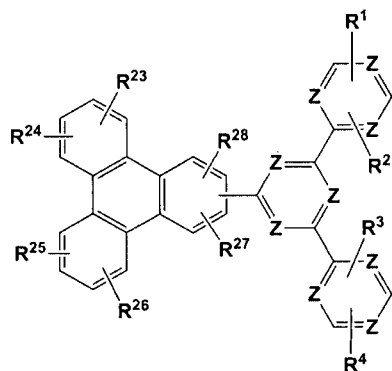
상기 제1 화합물은 적어도 하나의 질소를 함유하는 고리를 포함함으로써 전기장 인가시 전자를 받기 쉬운 구조가 될 수 있고, 이에 따라 상기 화합물을 적용한 유기 광전자 소자의 구동 전압을 낮출 수 있다.

또한 화학식 1-Ⅲ로 표현되는 제1 화합물은 정공을 받기 쉬운 트리페닐렌

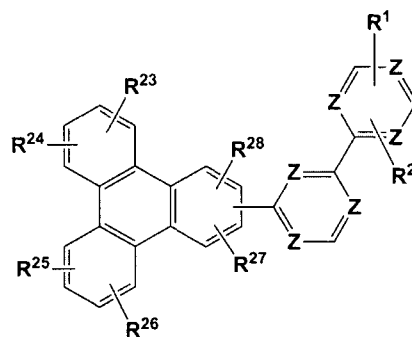
구조와 전자를 받기 쉬운 질소 함유 고리 부분을 함께 포함함으로써 바이폴라(bipolar) 구조를 형성하여 정공 및 전자의 흐름을 적절히 균형 맞출 수 있고, 이에 따라 상기 화합물을 적용한 유기 광전자 소자의 효율을 개선할 수 있다.

- 5 예컨대 상기 화학식 1-Ⅲ에서, 연결기(L¹)가 없는 구조에서는 예컨대 하기 화학식 1-Ⅲ-a 또는 1-Ⅲ-b로 표현될 수 있다.

[화학식 1-Ⅲ-a]



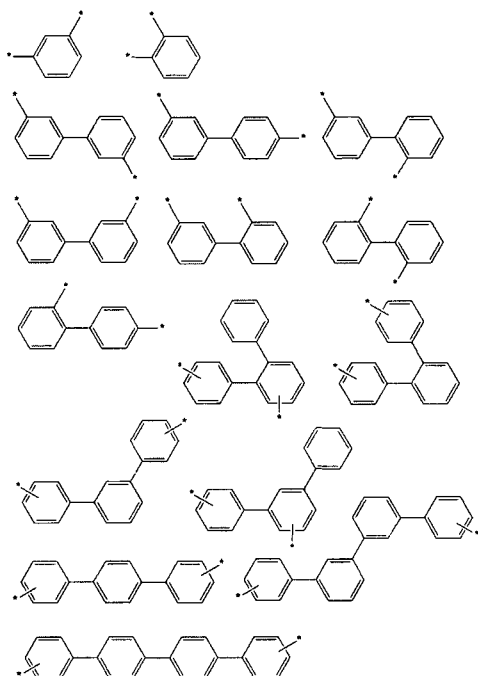
[화학식 1-Ⅲ-b]



- 상기 화학식 1-Ⅲ-a 및 1-Ⅲ-b에서, Z, R¹ 내지 R⁴, R²³ 내지 R²⁸은 전술한
10 바와 같다.

- 예컨대 상기 화학식 1-Ⅲ에서, 연결기(L¹)가 있는 구조에서는 예컨대 L¹은 치환 또는 비치환된 페닐렌기 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 쿼터페닐렌기 (quaterphenylene)일 수 있다. 상기 L¹은 예컨대 하기 그룹 2에 나열된 치환 또는 비치환된 기에서 선택된
15 하나일 수 있다.

[그림 2]



상기 그룹 2에서, *은 연결 지점이다.

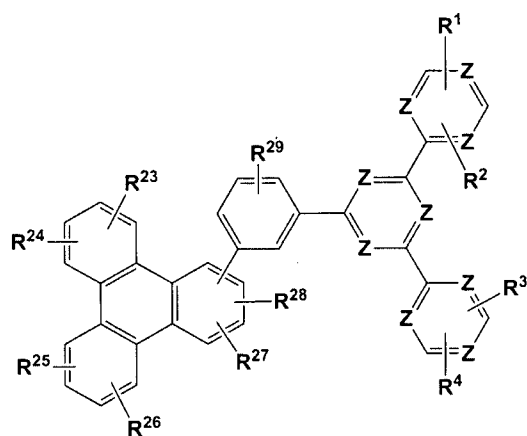
상기 화학식 1-Ⅲ로 표현되는 제1 화합물은 바람직하게는 적어도 두 개의
5 꺾임 구조를 가질 수 있으며, 예컨대 두 개 내지 네 개의 꺾임 구조를 가질 수
있다.

상기 화학식 1-Ⅲ로 표현되는 제1 화합물은 전술한 꺾임 구조를 가짐으로써 전술한 바이폴라 구조의 화합물 내에서 정공을 받기 쉬운 트리페닐렌 구조와 전자를 받기 쉬운 질소 함유 고리 부분을 적절히 구역화(localization)하고

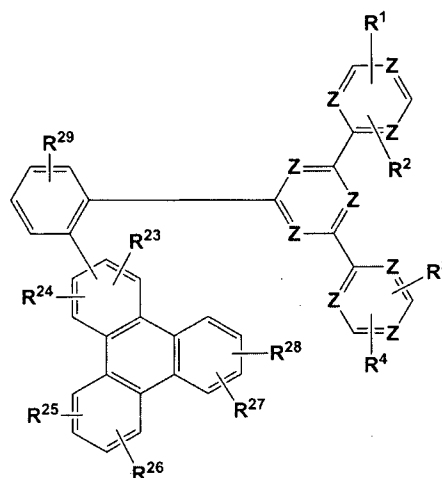
10 공액계의 흐름을 제어함으로써 우수한 바이폴라(bipolar) 특성을 나타낼 수 있다. 또한 상기 화학식 1-Ⅲ로 표현되는 제1 화합물은 상기 구조에 따라 유기 화합물들의 스택킹(stackings)을 효과적으로 방지하여 공정 안정성을 낮추는 동시에 증착 온도를 낮출 수 있다. 이러한 스택킹 방지 효과는 상기 화학식 1-Ⅲ로 표현되는 제1 화합물에서 연결기(L^1)를 포함하는 경우 더욱 높일 수 있다.

15 상기 1-Ⅲ로 표현되는 제1화합물에서, 연결기(L')가 있는 구조는 예컨대 하기 화학식 1-Ⅲ-c 내지 1-Ⅲ-t로 표현될 수 있다.

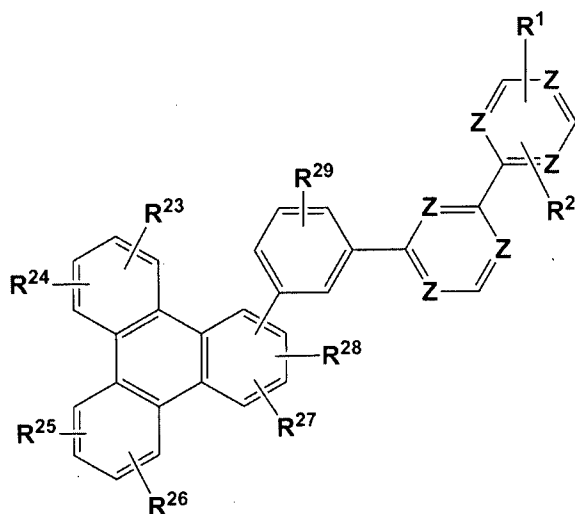
[화학식 1-III-c]



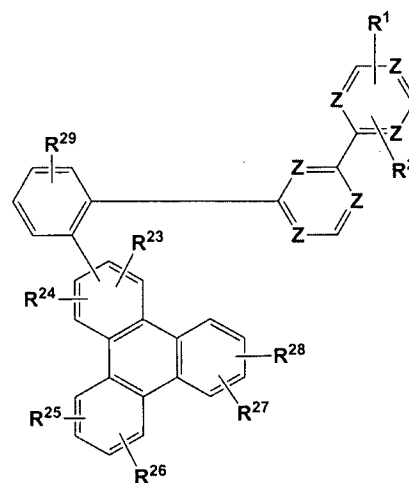
[화학식 1-III-d]



[화학식 1-III-e]

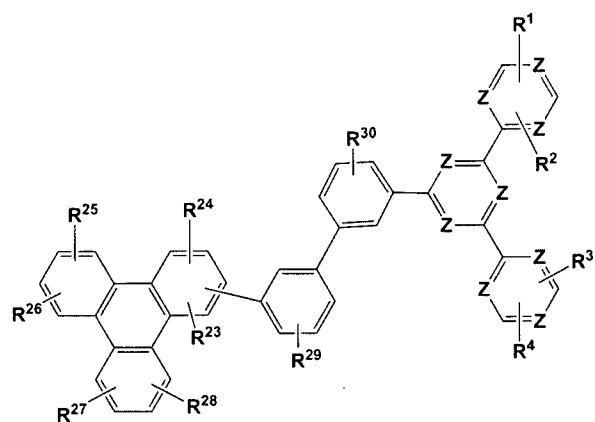


[화학식 1-III-f]

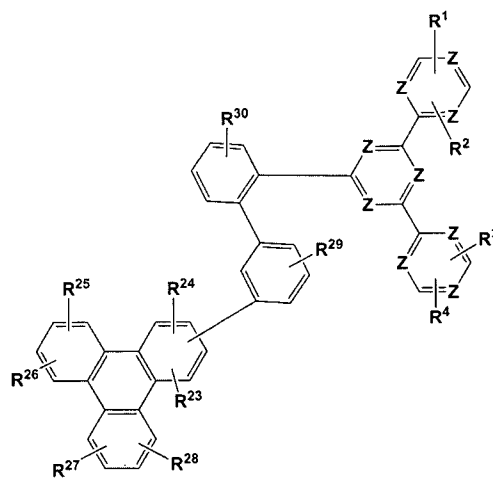


5

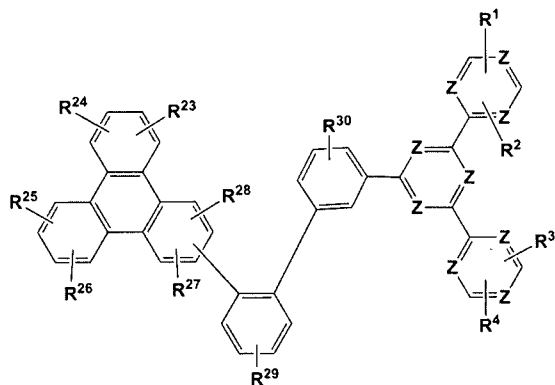
[화학식 1-III-g]



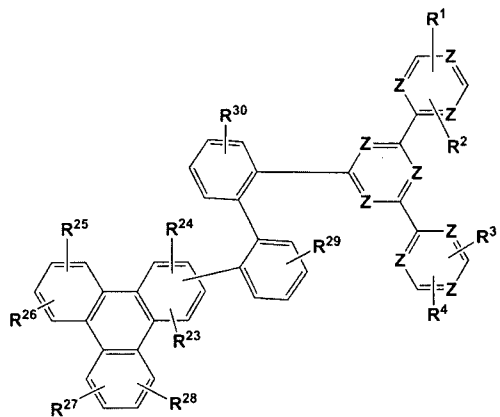
[화학식 1-III-h]



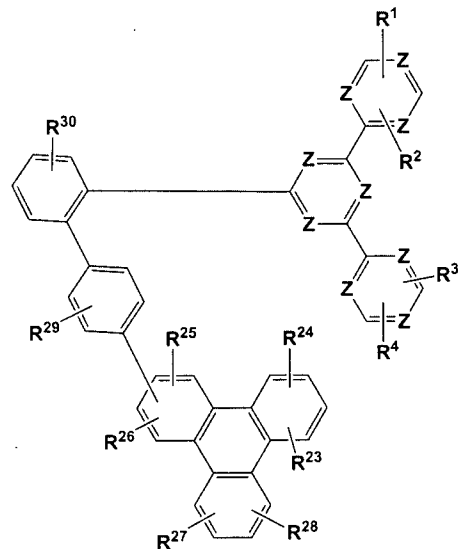
[화학식 1-III-i]



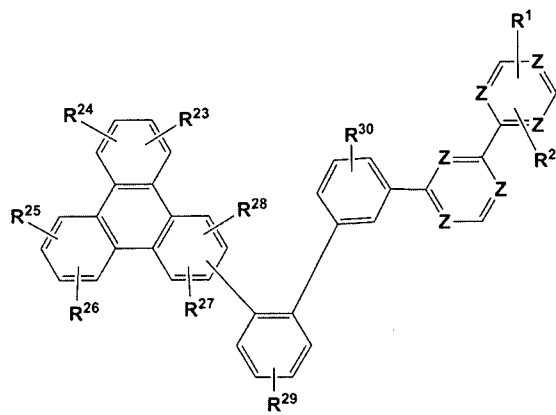
[화학식 1-III-j]



[화학식 1-III-k]

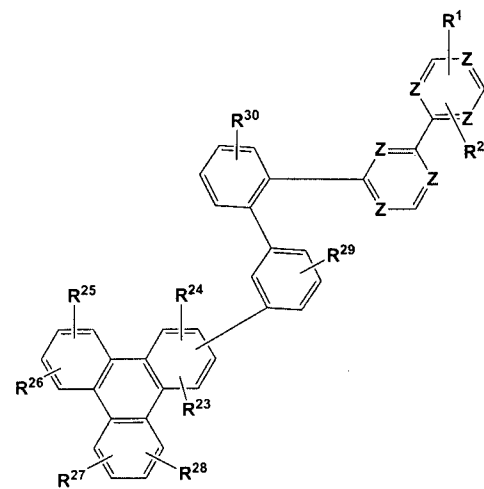


[화학식 1-III-l]

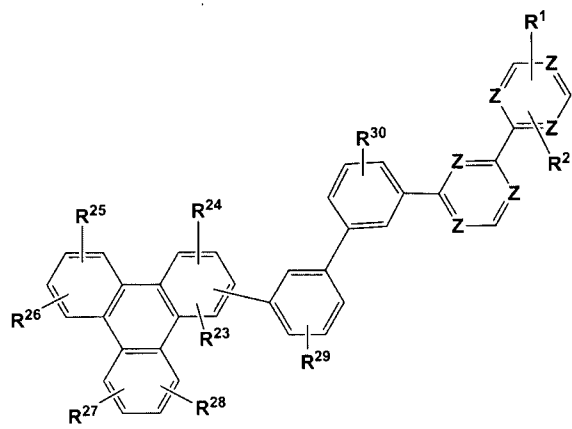


5

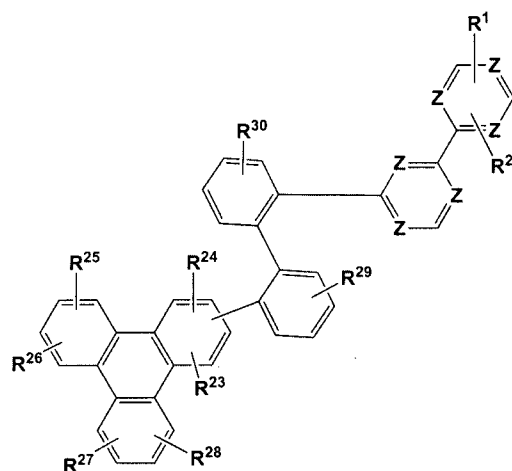
[화학식 1-III-m]



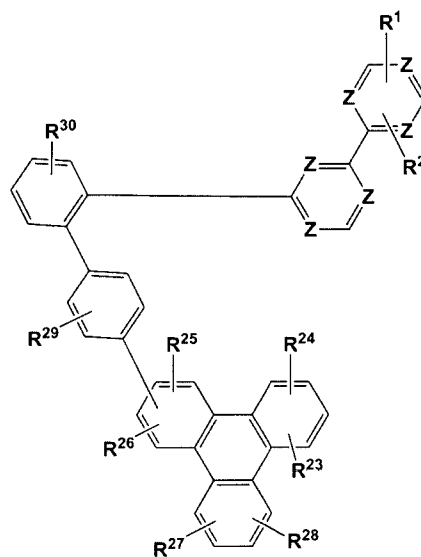
[화학식 1-III-n]



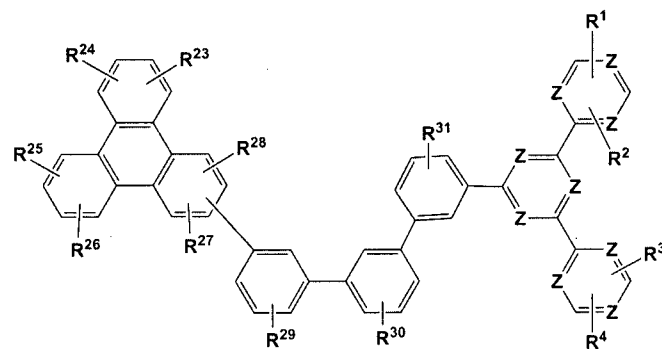
[화학식 1-III-o]



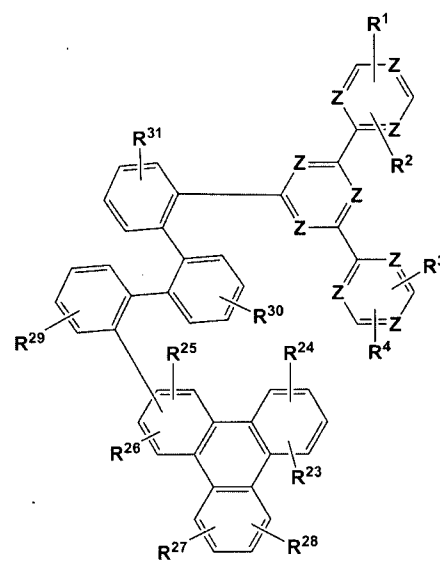
[화학식 1-III-p]



[화학식 1-III-q]

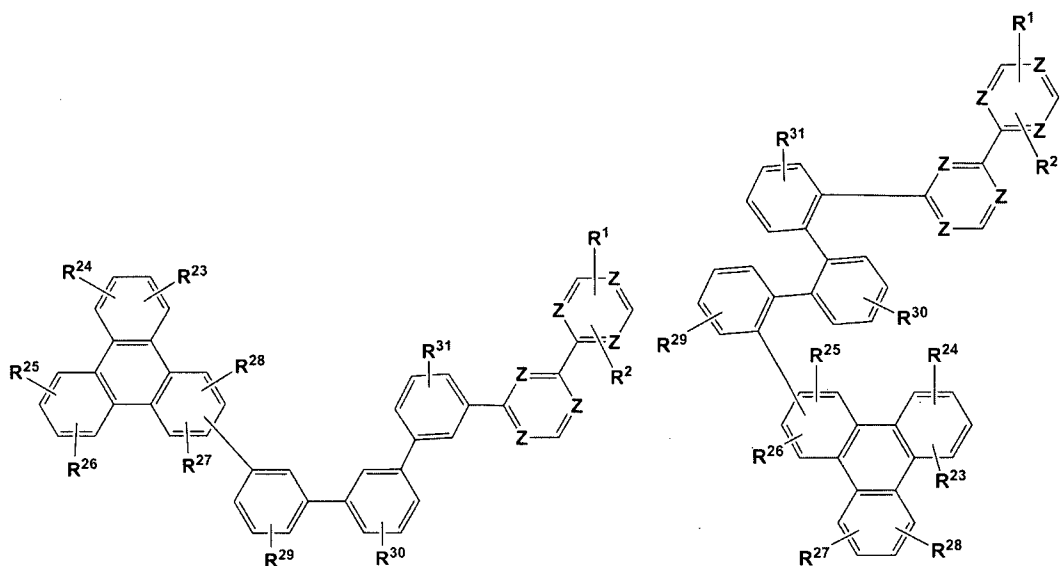


[화학식 1-III-r]



[화학식 1-III-s]

[화학식 1-III-t]

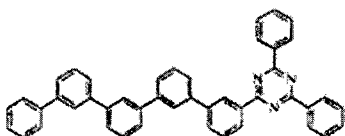


상기 화학식 1-III-c 내지 1-III-t에서, Z, R¹ 내지 R⁴, R²³ 내지 R²⁸은 전술한 바와 같고, R²⁹ 내지 R³¹은 R²³ 내지 R²⁸의 정의와 같다.

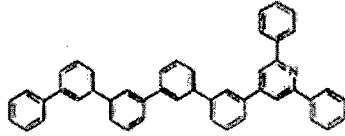
- 5 상기 화학식 1로 표현되는 제1화합물은 예컨대 하기 그룹 A에 나열된 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[그룹 A]

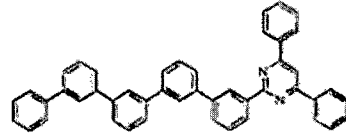
[A-1]



[A-2]

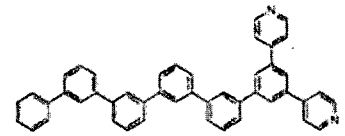


[A-3]

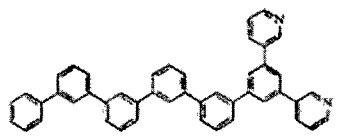


10

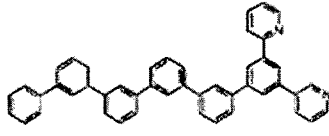
[A-4]



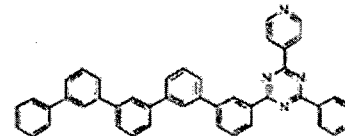
[A-5]



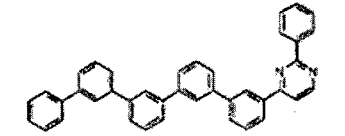
[A-6]



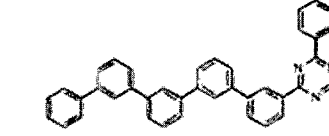
[A-7]



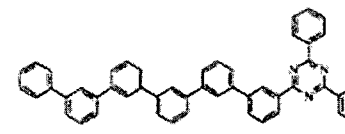
[A-8]



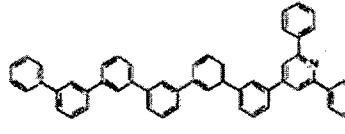
[A-9]



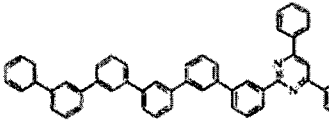
[A-10]



[A-11]

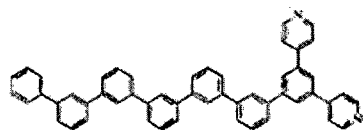


[A-12]

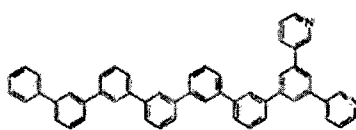


15

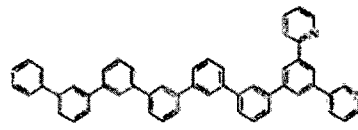
[A-13]



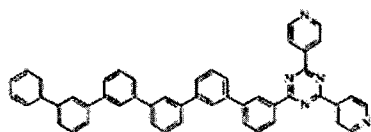
[A-14]



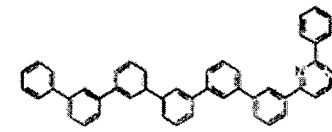
[A-15]



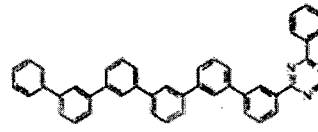
[A-16]



[A-17]

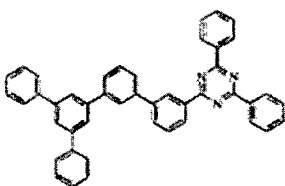


[A-18]

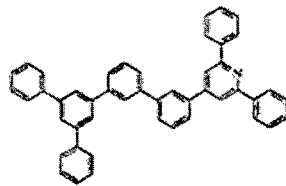


5

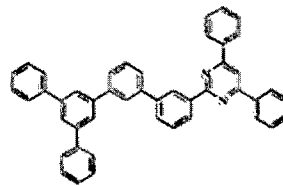
[A-19]



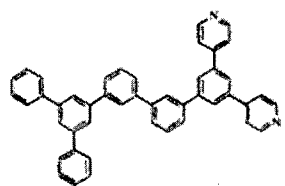
[A-20]



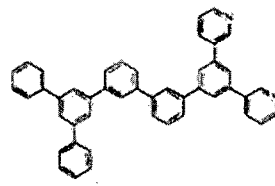
[A-21]



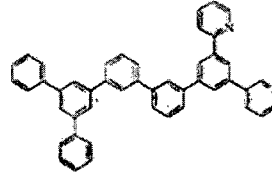
[A-22]



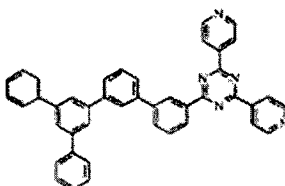
[A-23]



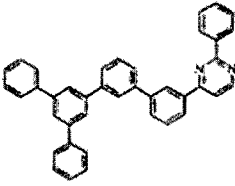
[A-24]



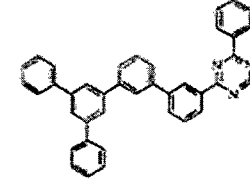
[A-25]



[A-26]

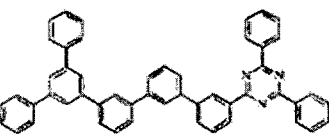


[A-27]

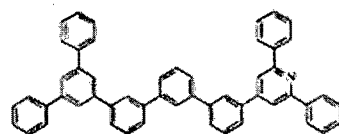


10

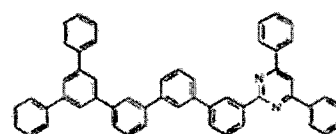
[A-28]



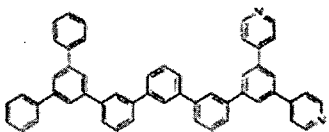
[A-29]



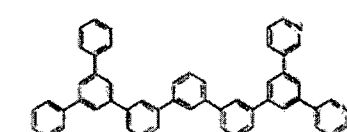
[A-30]



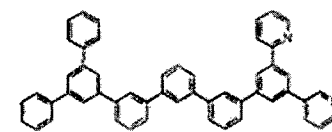
[A-31]



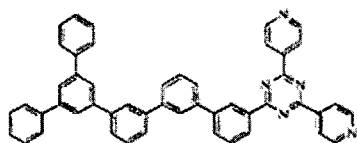
[A-32]



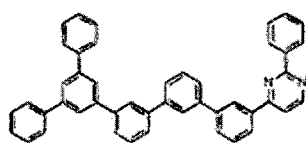
[A-33]



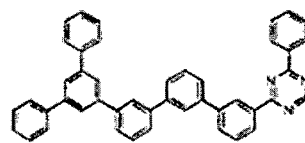
[A-34]



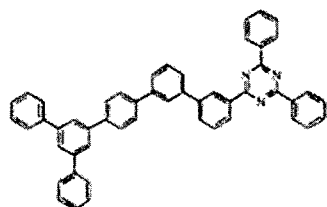
[A-35]



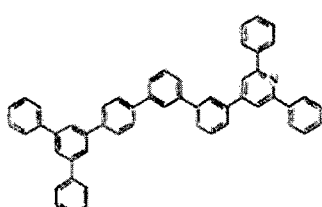
[A-36]



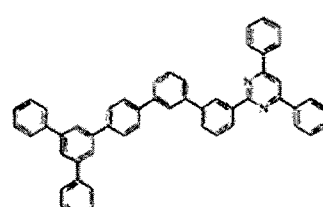
[A-37]



[A-38]

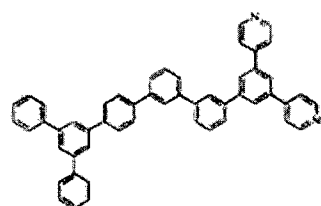


[A-39]

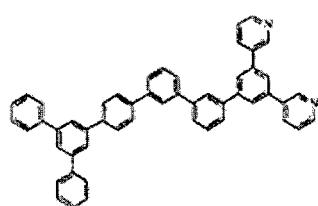


5

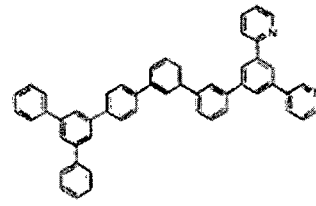
[A-40]



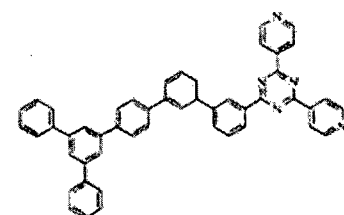
[A-41]



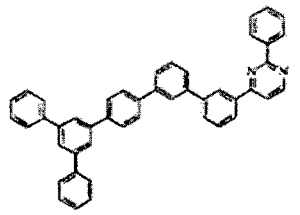
[A-42]



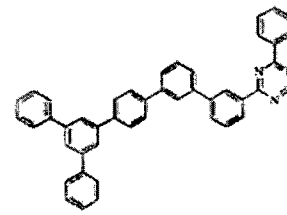
[A-43]



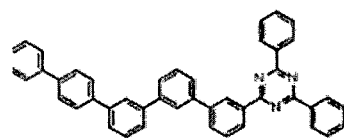
[A-44]



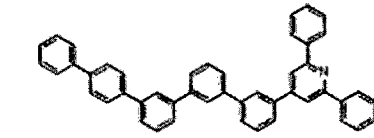
[A-45]



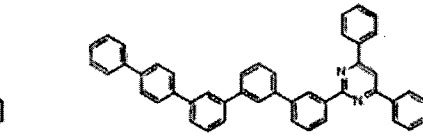
[A-46]



[A-47]

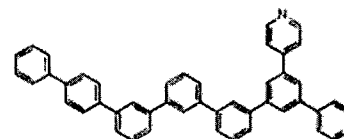


[A-48]

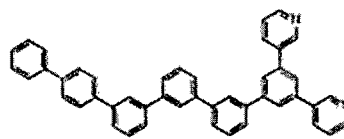


10

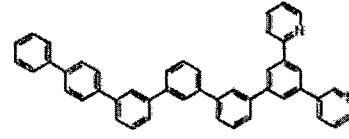
[A-49]



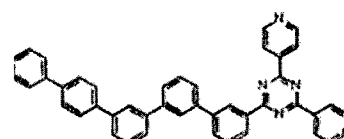
[A-50]



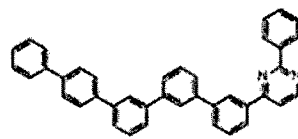
[A-51]



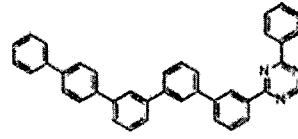
[A-52]



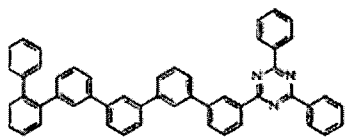
[A-53]



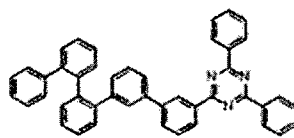
[A-54]



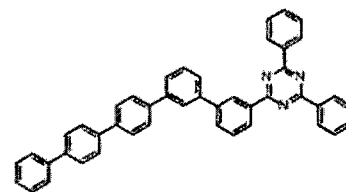
[A-55]



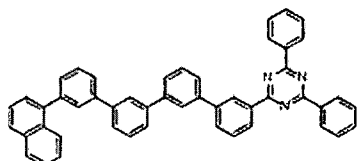
[A-56]



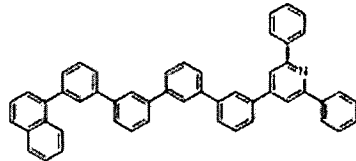
[A-57]



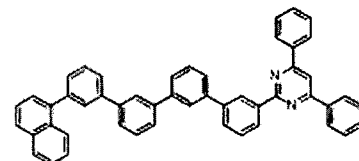
[A-58]



[A-59]

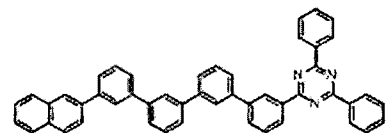


[A-60]

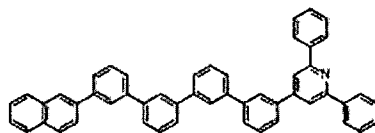


5

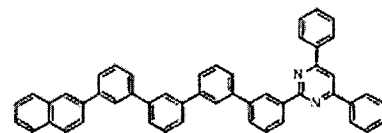
[A-61]



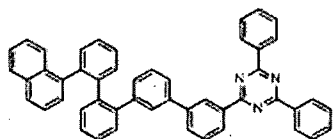
[A-62]



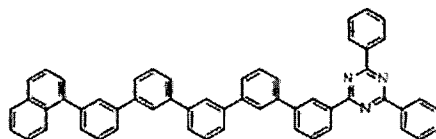
[A-63]



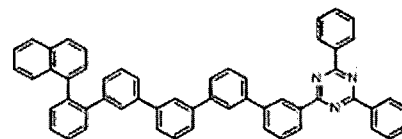
[A-64]



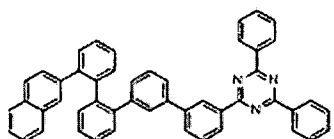
[A-65]



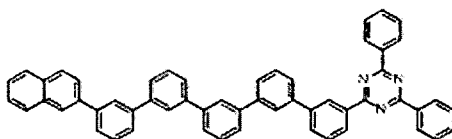
[A-66]



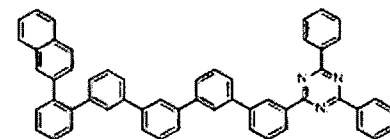
[A-67]



[A-68]

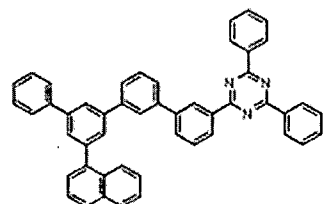


[A-69]

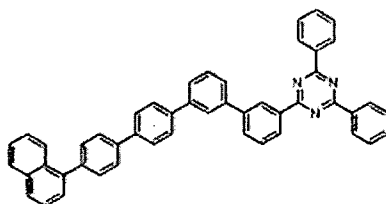


10

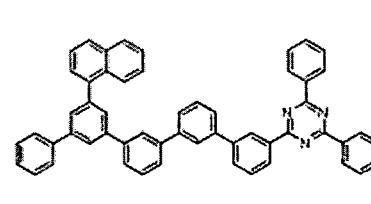
[A-70]



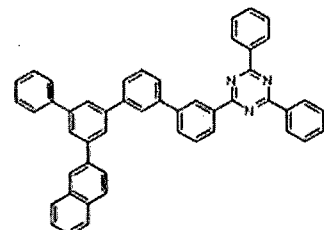
[A-71]



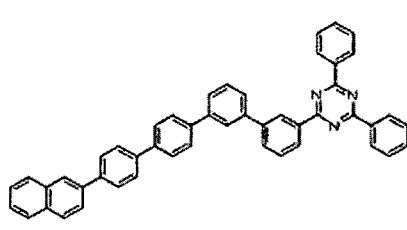
[A-72]



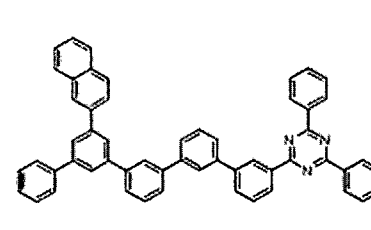
[A-73]



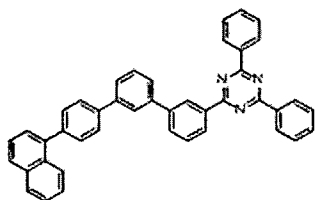
[A-74]



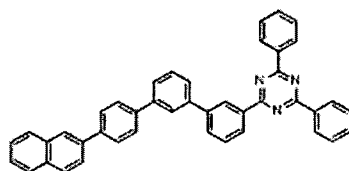
[A-75]



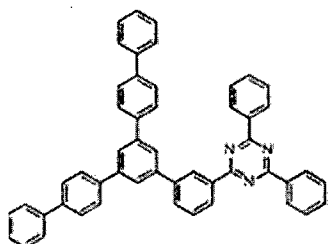
[A-76]



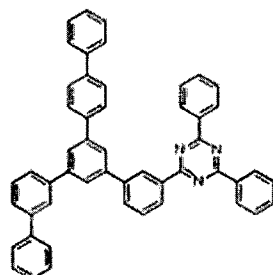
[A-77]



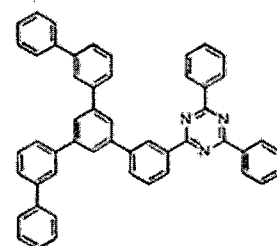
[A-78]



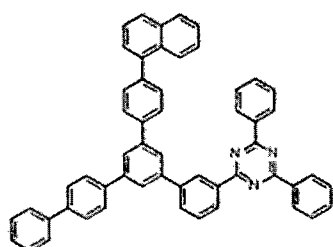
[A-79]



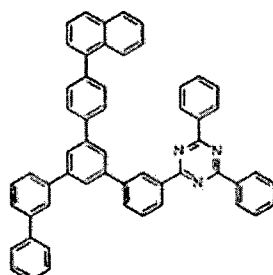
[A-80]



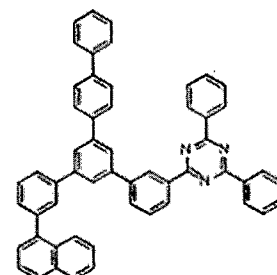
5 [A-81]



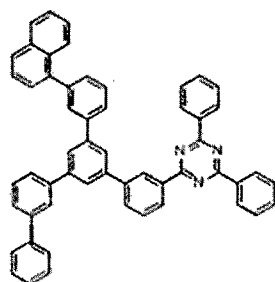
[A-82]



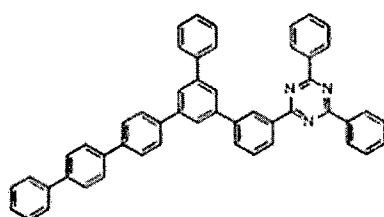
[A-83]



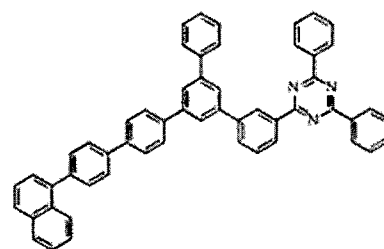
[A-84]



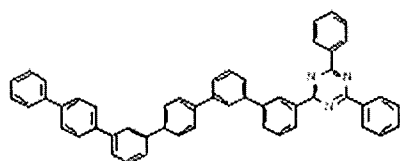
[A-85]



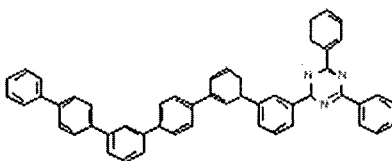
[A-86]

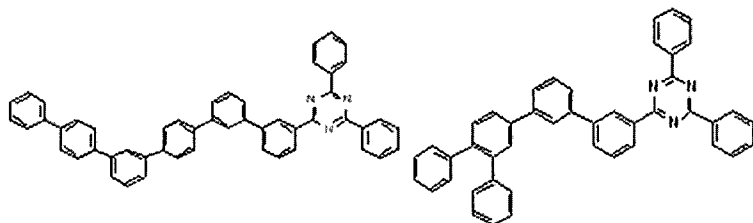


[A-87]



[A-88]

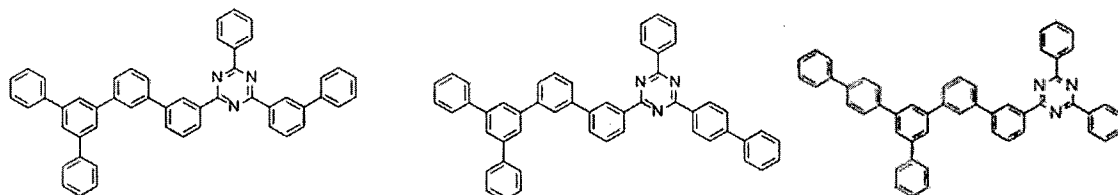




[A-91]

[A-92]

[A-93]

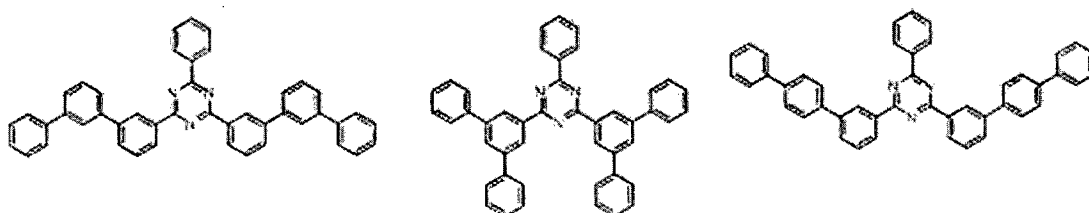


5

[A-94]

[A-95]

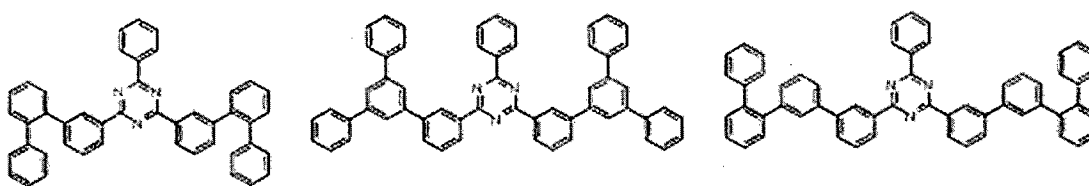
[A-96]



[A-97]

[A-98]

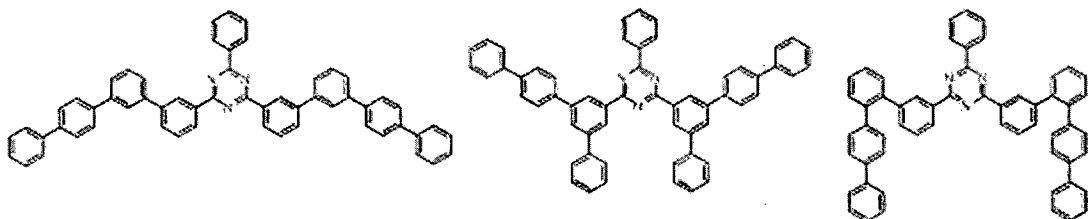
[A-99]



[A-100]

[A-101]

[A-102]

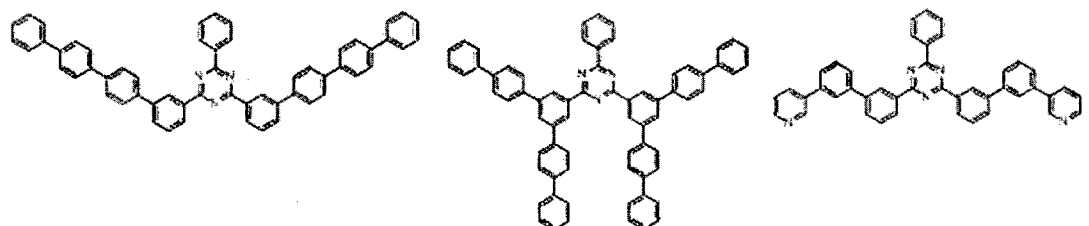


10

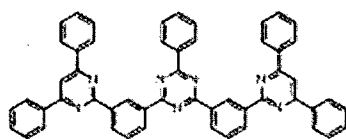
[A-103]

[A-104]

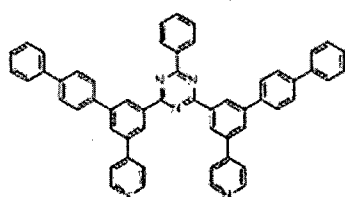
[A-105]



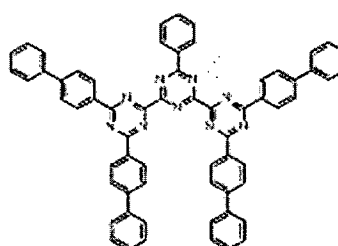
[A-106]



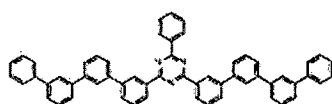
[A-107]



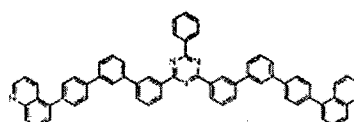
[A-108]



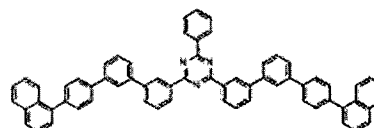
[A-109]



[A-110]

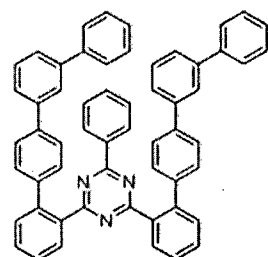


[A-111]

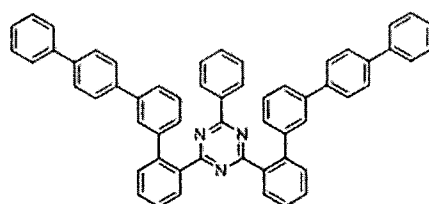


5

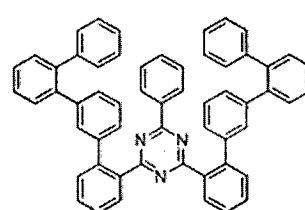
[A-112]



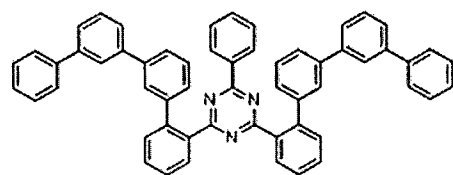
[A-113]



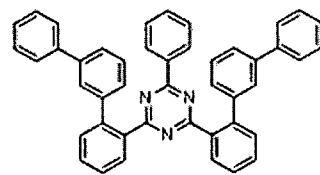
[A-114]



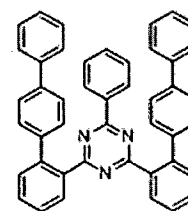
[A-115]



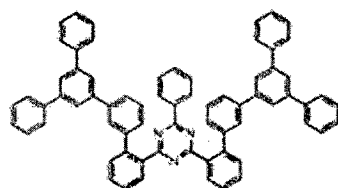
[A-116]



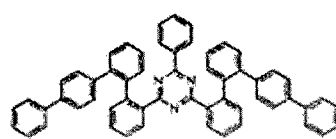
[A-117]



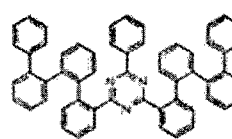
[A-118]



[A-119]

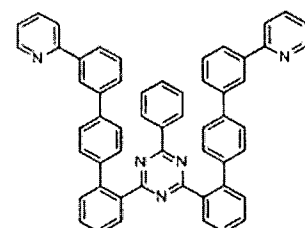


[A-120]

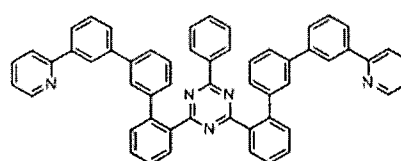


10

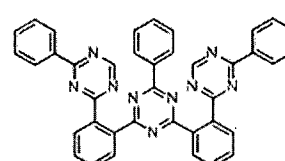
[A-121]



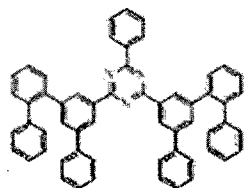
[A-122]



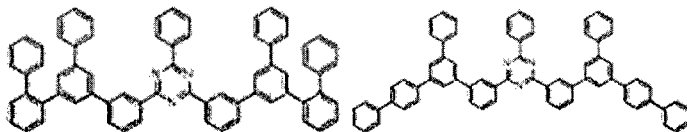
[A-123]



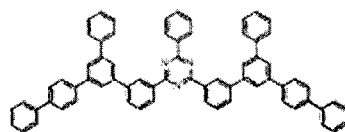
[A-124]



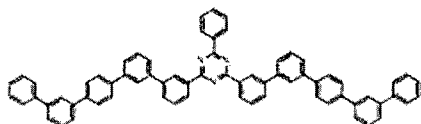
[A-125]



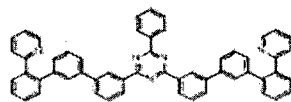
[A-126]



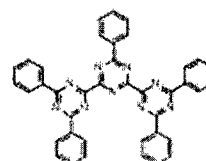
[A-127]



[A-128]

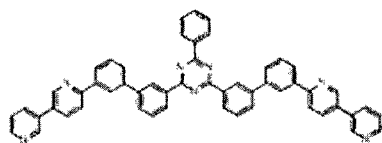


[A-129]

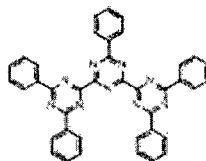


5

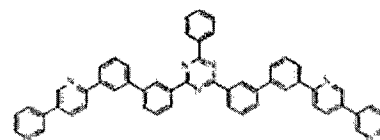
[A-130]



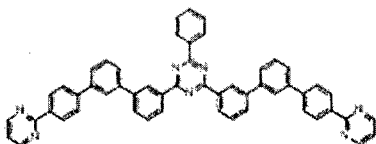
[A-131]



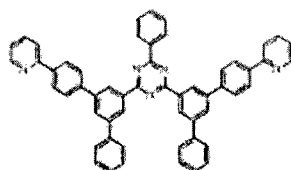
[A-132]



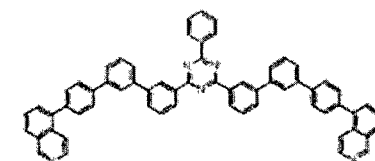
[A-133]



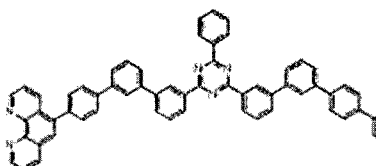
[A-134]



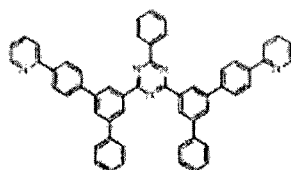
[A-135]



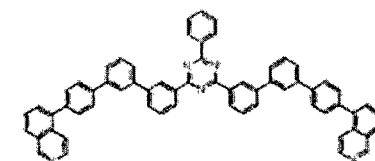
[A-136]



[A-137]

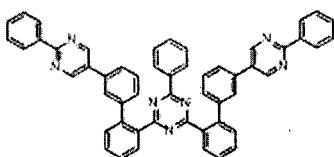


[A-138]

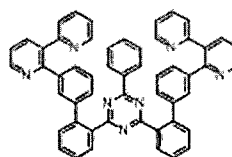


10

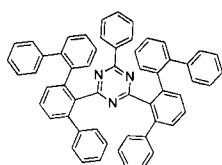
[A-139]



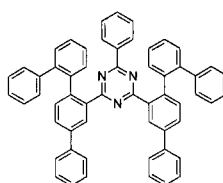
[A-140]



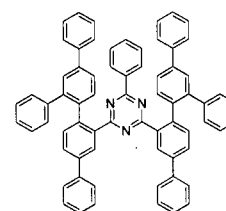
[A-141]



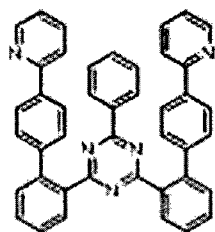
[A-142]



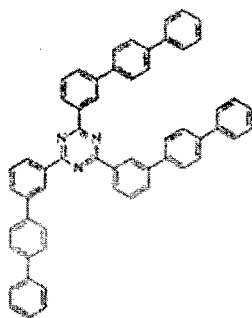
[A-143]



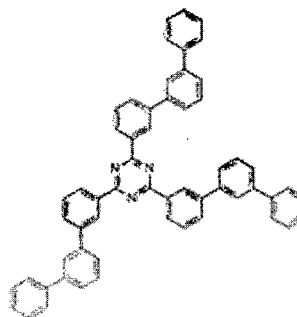
[A-144]



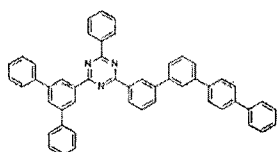
[A-145]



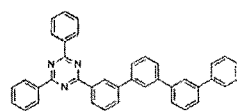
[A-146]



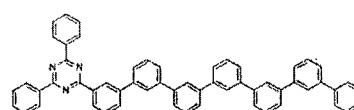
[A-147]



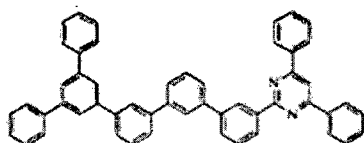
[A-148]



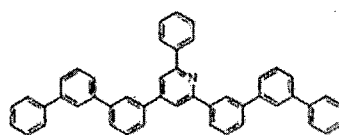
[A-149]



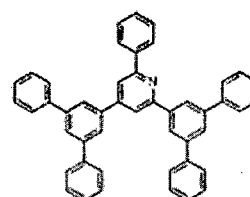
5 [A-150]



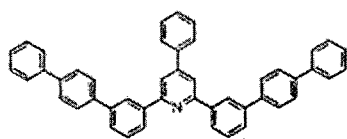
[A-151]



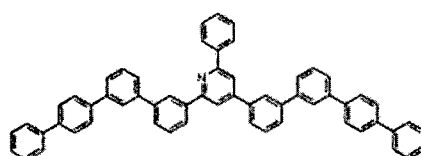
[A-152]



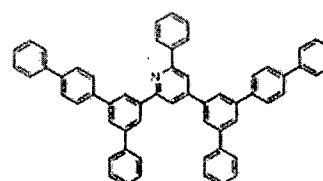
[A-153]



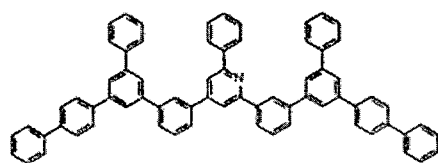
[A-154]



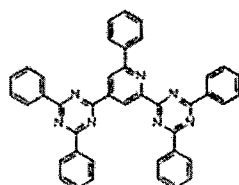
[A-155]



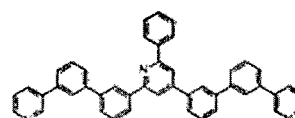
[A-156]



[A-157]

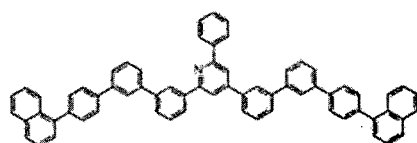


[A-158]

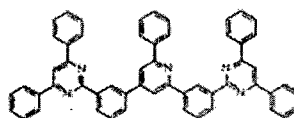


10

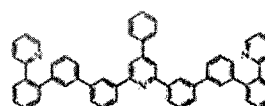
[A-159]



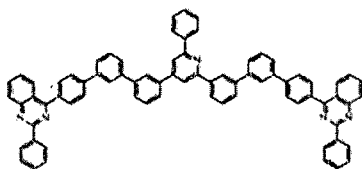
[A-160]



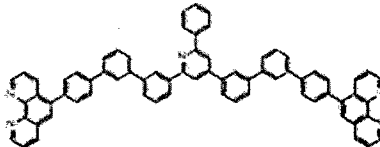
[A-161]



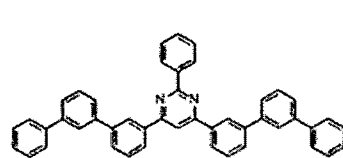
[A-162]



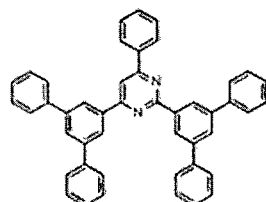
[A-163]



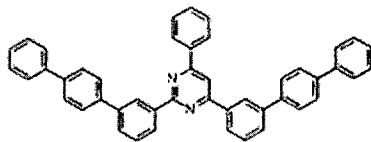
[A-164]



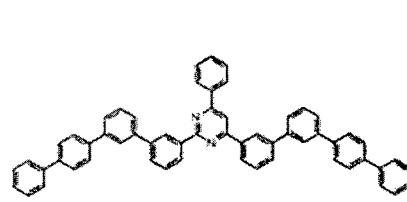
[A-165]



[A-166]

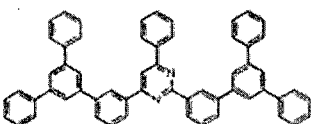


[A-167]

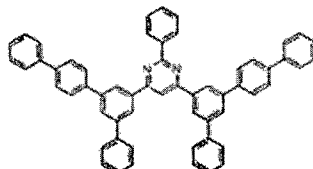


5

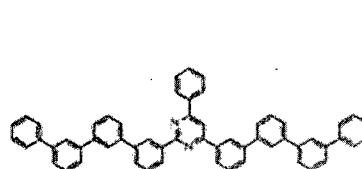
[A-168]



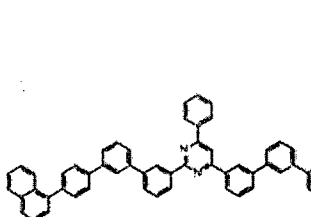
[A-169]



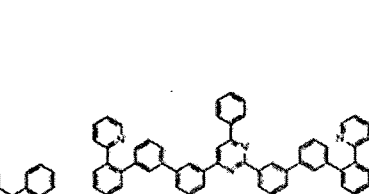
[A-170]



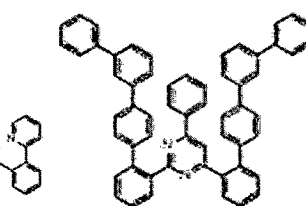
[A-171]



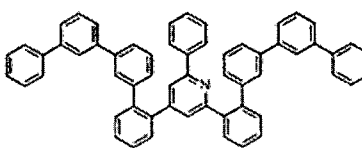
[A-172]



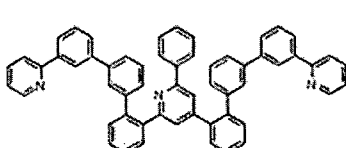
[A-173]



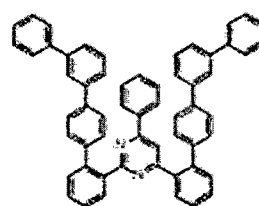
[A-174]



[A-175]

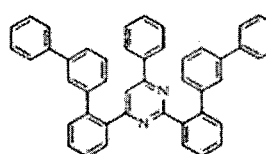


[A-176]

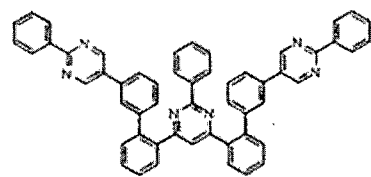


10

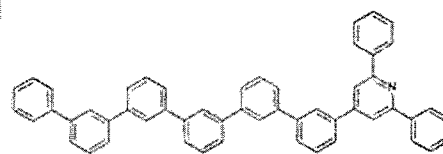
[A-177]



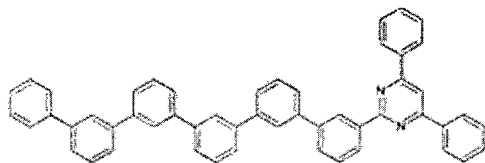
[A-178]



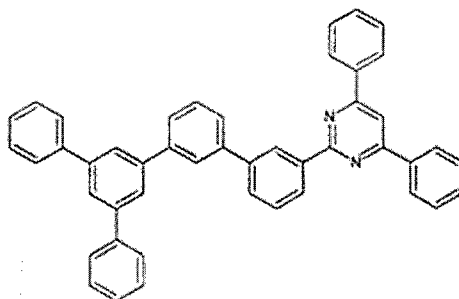
[A-179]



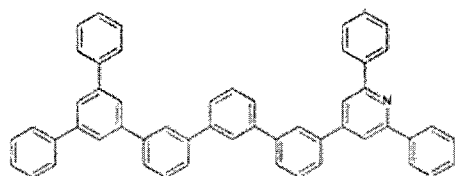
[A-180]



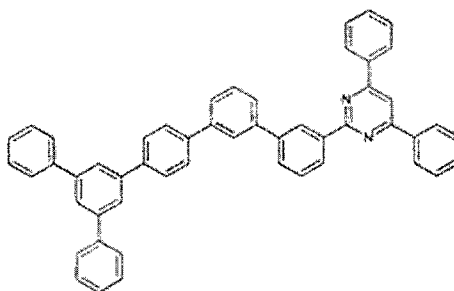
[A-181]



[A-182]

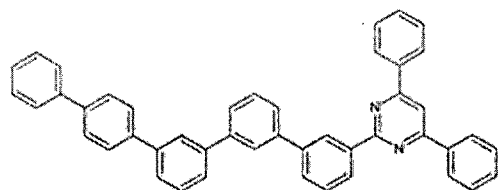


[A-183]

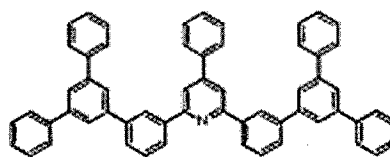


5

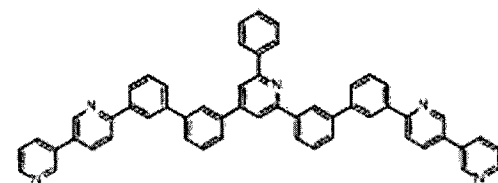
[A-184]



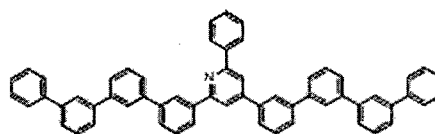
[A-185]



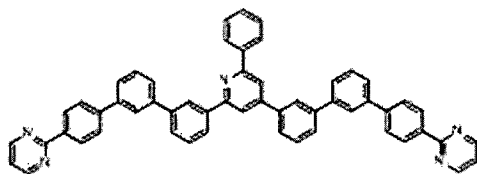
[A-186]



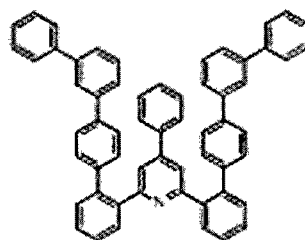
[A-187]



[A-188]

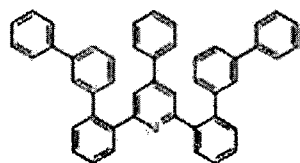


[A-189]

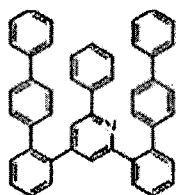


10

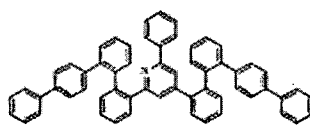
[A-190]



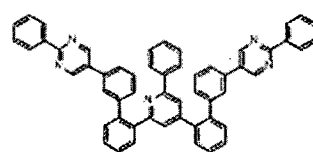
[A-191]



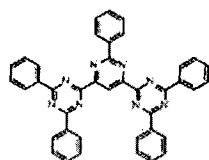
[A-192]



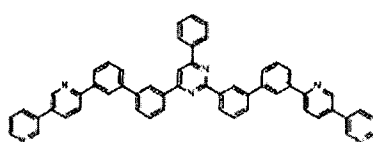
[A-193]



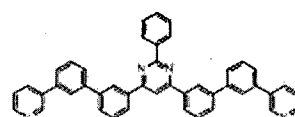
[A-194]



[A-195]

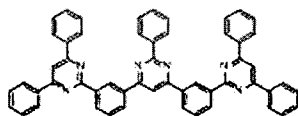


[A-196]

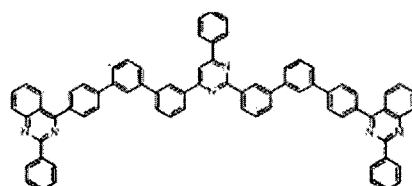


5

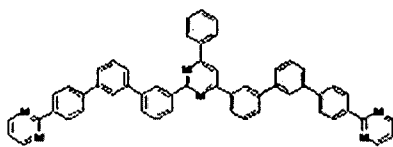
[A-197]



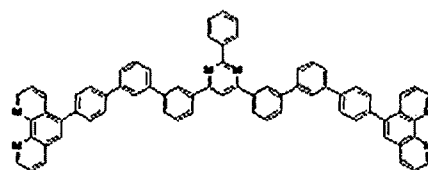
[A-198]



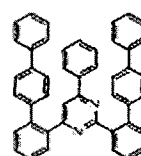
[A-199]



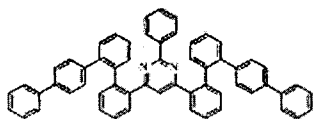
[A-200]



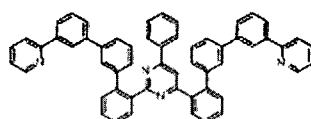
[A-201]



[A-202]

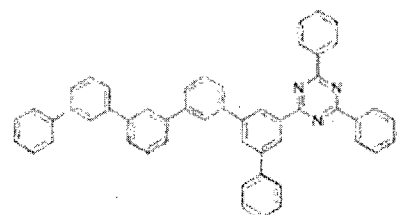


[A-203]

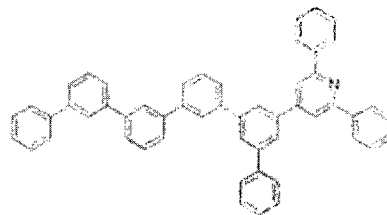


10

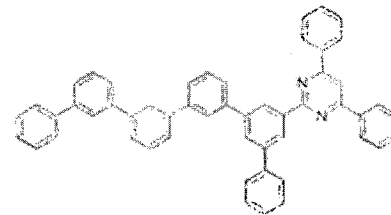
[A-204]



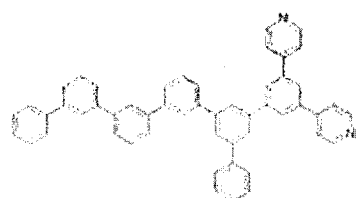
[A-205]



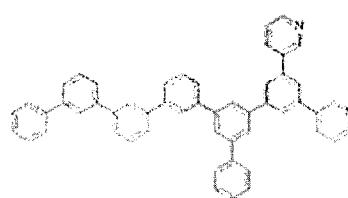
[A-206]



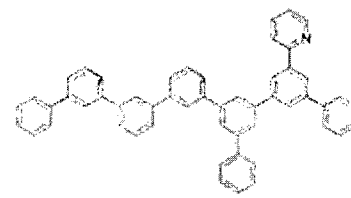
[A-207]



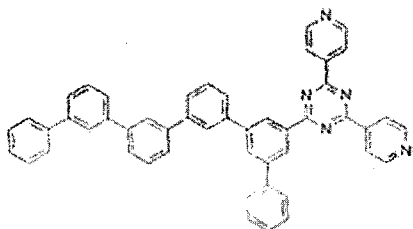
[A-208]



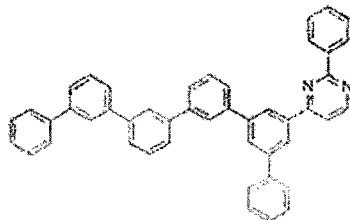
[A-209]



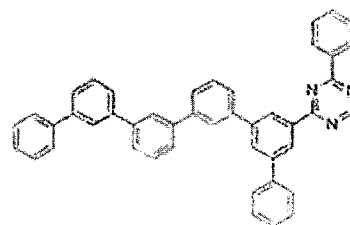
[A-210]



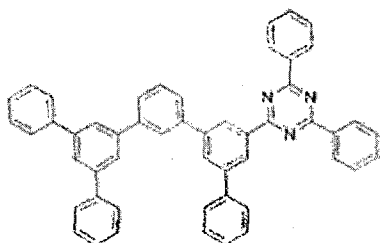
[A-211]



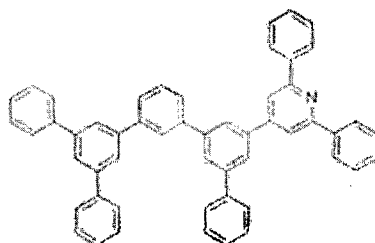
[A-212]



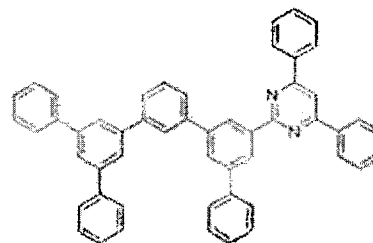
[A-213]



[A-214]

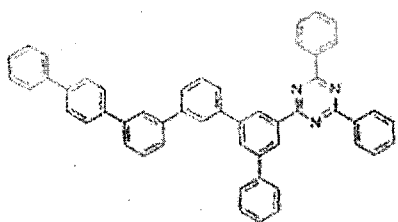


[A-215]

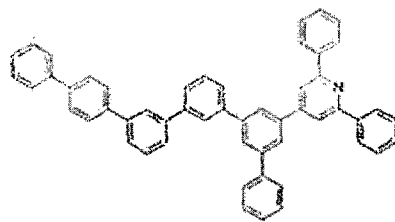


5

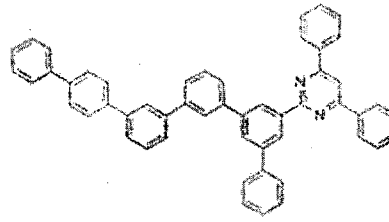
[A-216]



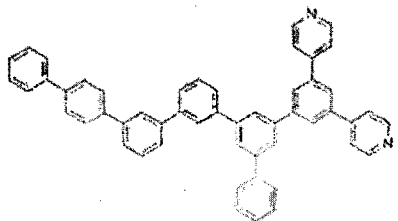
[A-217]



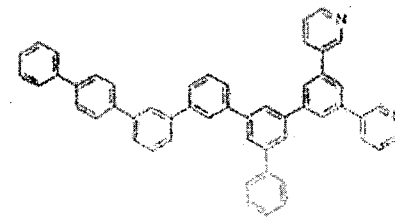
[A-218]



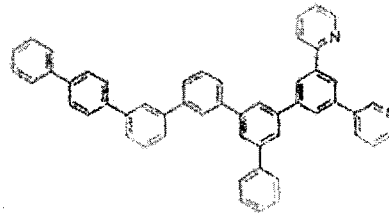
[A-219]



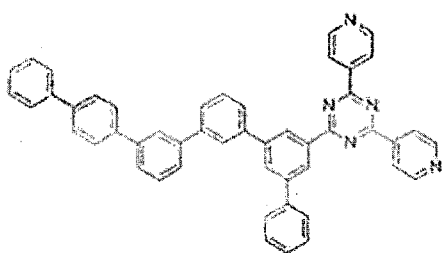
[A-220]



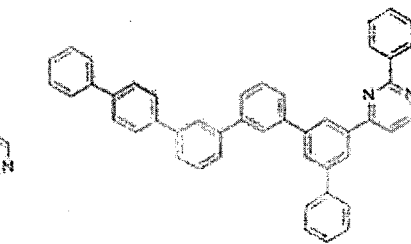
[A-221]



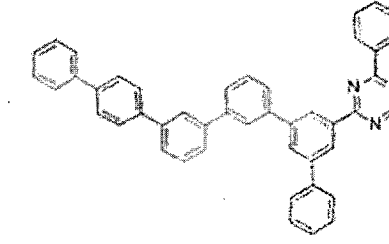
[A-222]



[A-223]

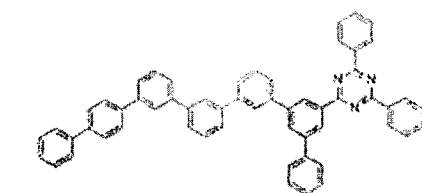


[A-224]

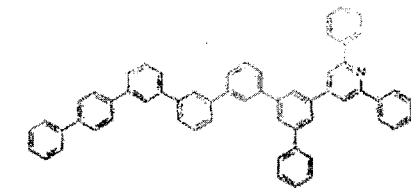


10

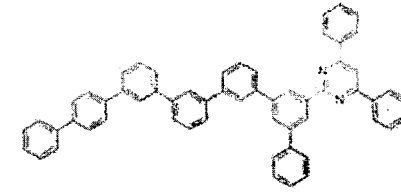
[A-225]



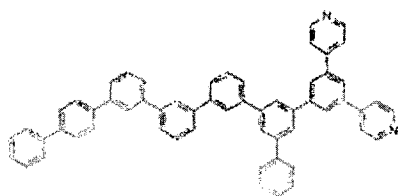
[A-226]



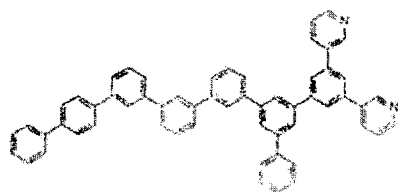
[A-227]



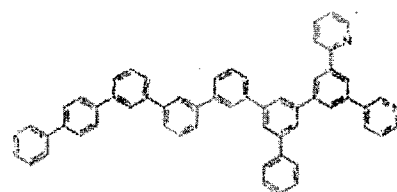
[A-228]



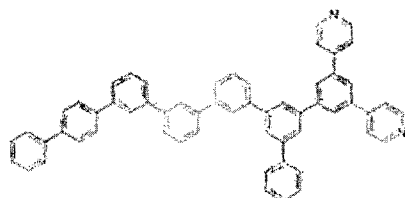
[A-229]



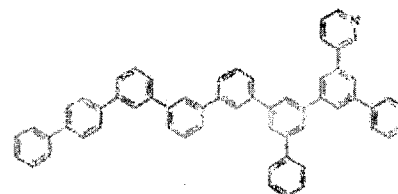
[A-230]



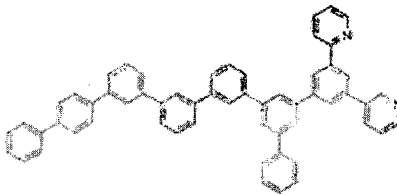
[A-231]



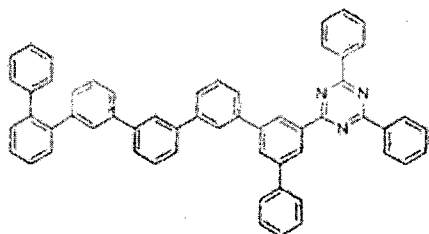
[A-232]



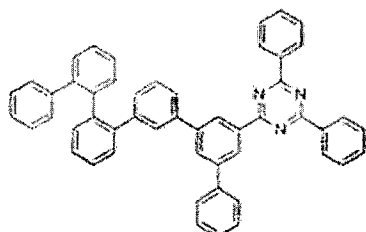
[A-233]



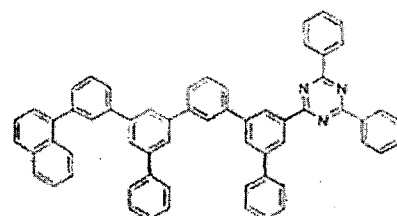
5 [A-234]



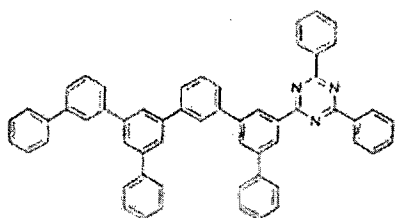
[A-235]



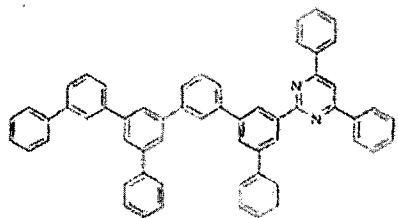
[A-236]



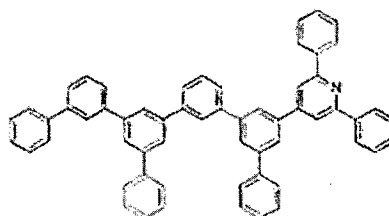
[A-237]



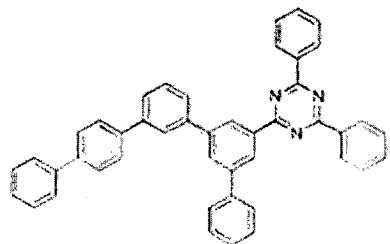
[A-238]



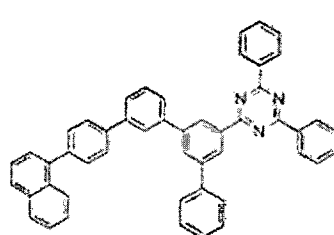
[A-239]



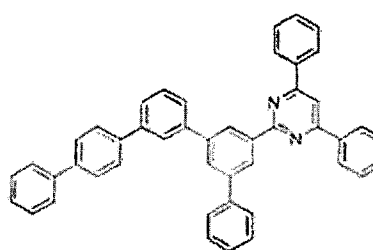
[A-240]



[A-241]

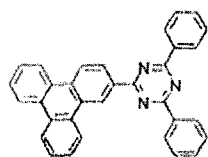


[A-242]

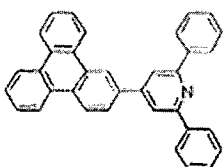


10

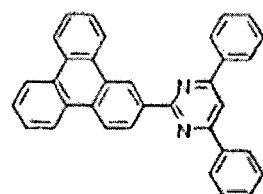
[A-243]



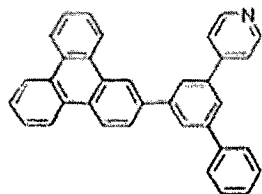
[A-244]



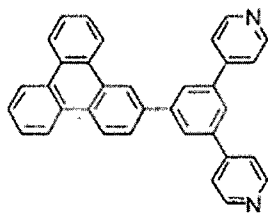
[A-245]



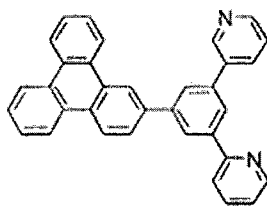
[A-246]



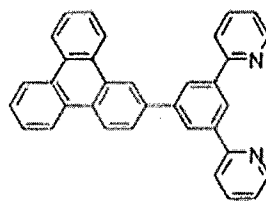
[A-247]



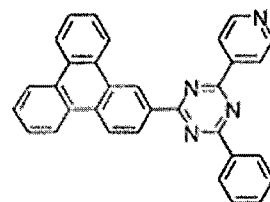
[A-248]



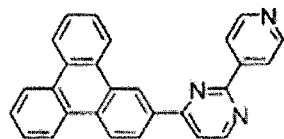
[A-249]



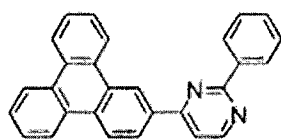
[A-250]



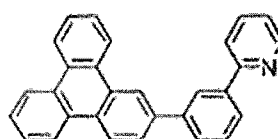
[A-251]



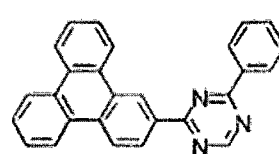
[A-252]



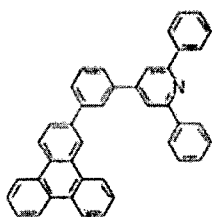
[A-253]



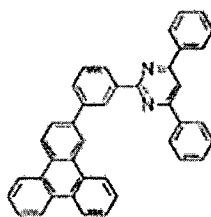
[A-254]



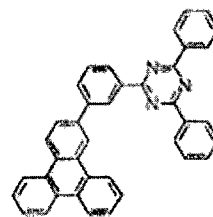
5 [A-255]



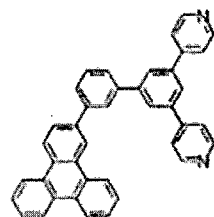
[A-256]



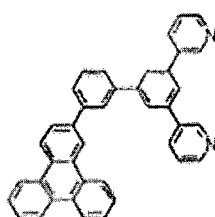
[A-257]



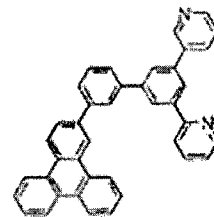
[A-258]



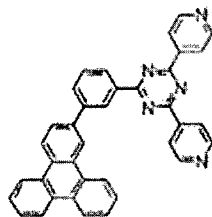
[A-259]



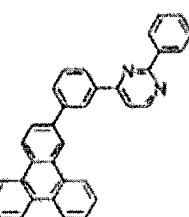
[A-260]



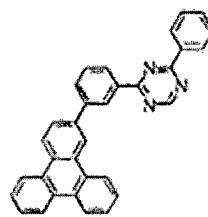
[A-261]



[A-262]

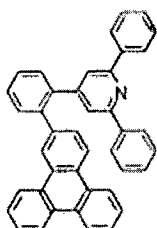


[A-263]

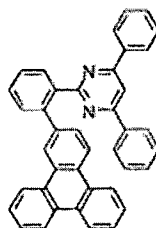


10

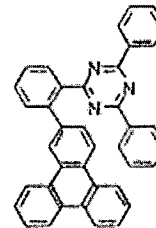
[A-264]



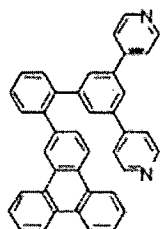
[A-265]



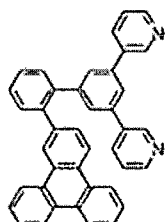
[A-266]



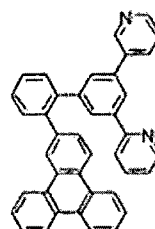
[A-267]



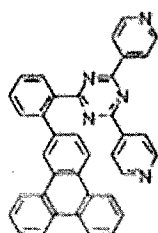
[A-268]



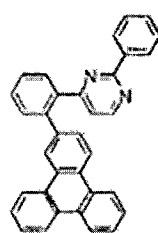
[A-269]



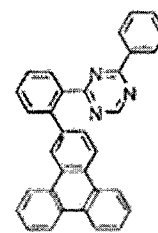
[A-270]



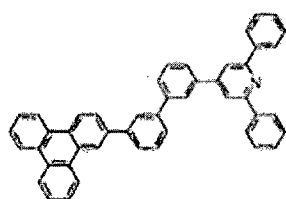
[A-271]



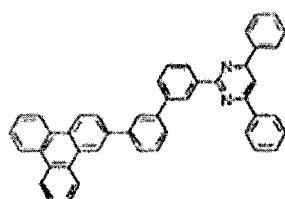
[A-272]



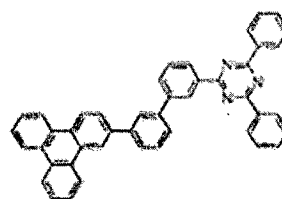
5 [A-273]



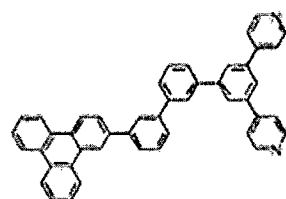
[A-274]



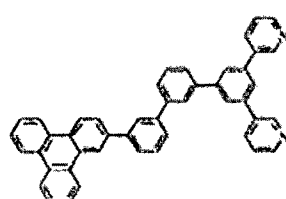
[A-275]



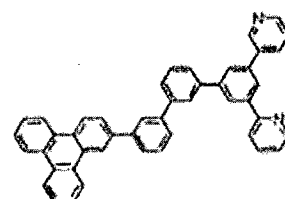
[A-276]



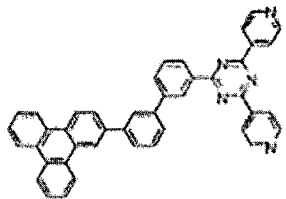
[A-277]



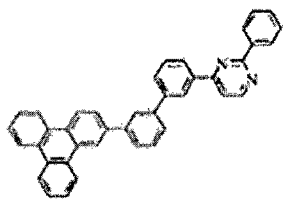
[A-278]



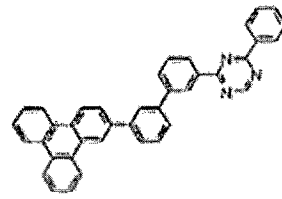
[A-279]



[A-280]

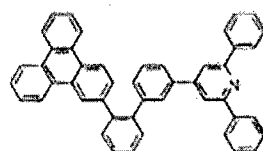


[A-281]

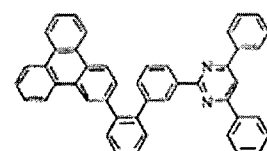


10

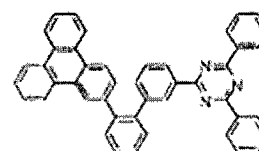
[A-282]



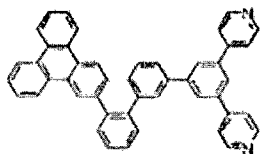
[A-283]



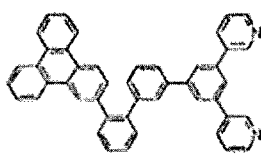
[A-284]



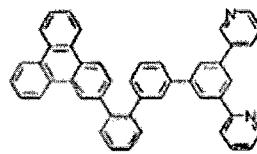
[A-285]



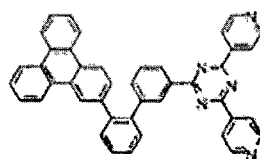
[A-286]



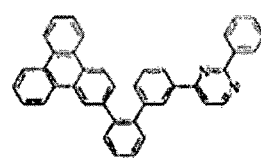
[A-287]



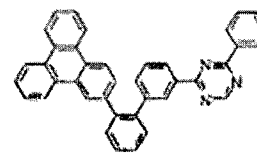
[A-288]



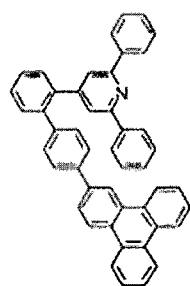
[A-289]



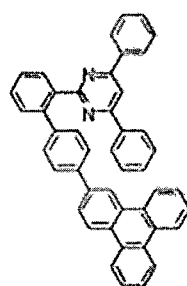
[A-290]



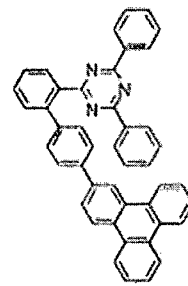
5 [A-291]



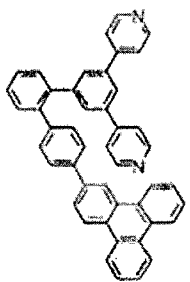
[A-292]



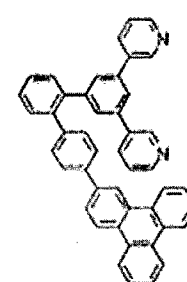
[A-293]



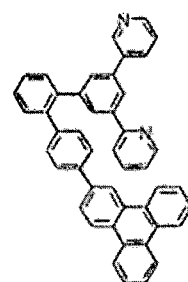
[A-294]



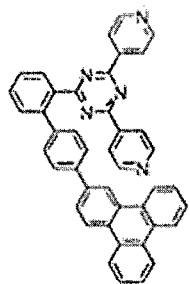
[A-295]



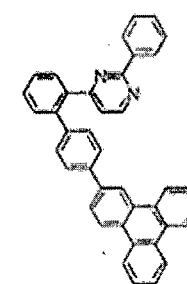
[A-296]



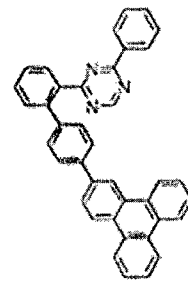
[A-297]



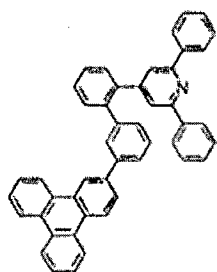
[A-298]



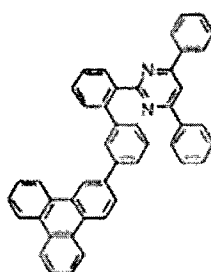
[A-299]



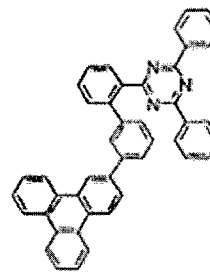
[A-300]



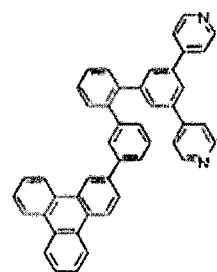
[A-301]



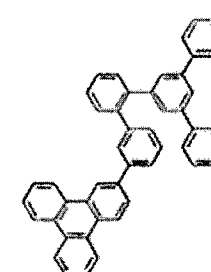
[A-302]



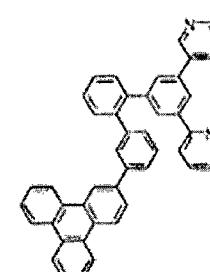
[A-303]



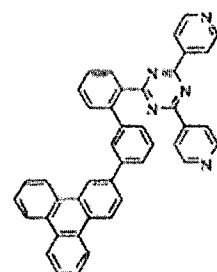
[A-304]



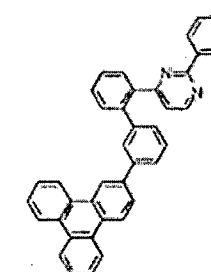
[A-305]



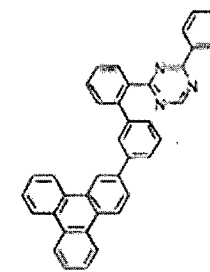
5 [A-306]



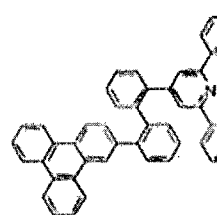
[A-307]



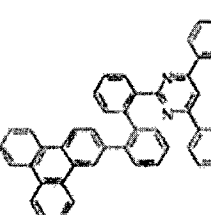
[A-308]



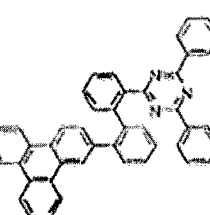
[A-309]



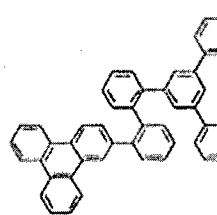
[A-310]



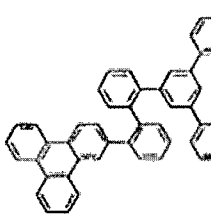
[A-311]



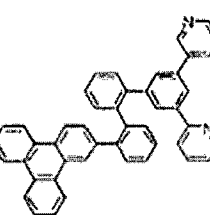
[A-312]



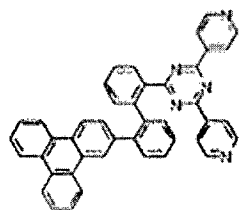
[A-313]



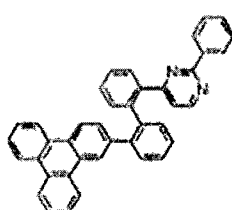
[A-314]



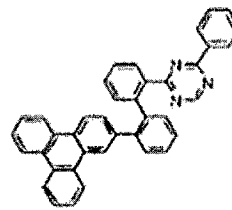
[A-315]



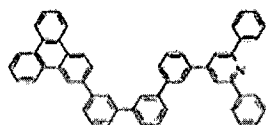
[A-316]



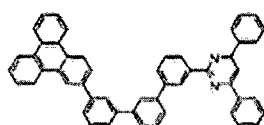
[A-317]



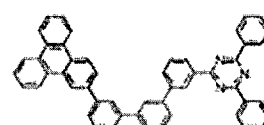
[A-318]



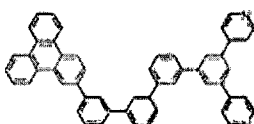
[A-319]



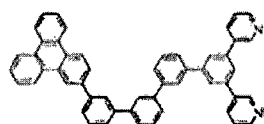
[A-320]



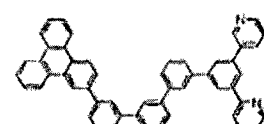
5 [A-321]



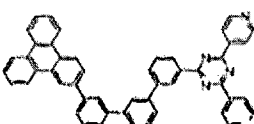
[A-322]



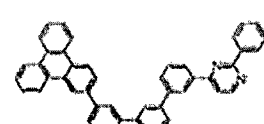
[A-323]



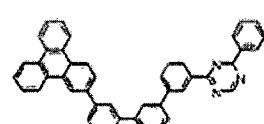
[A-324]



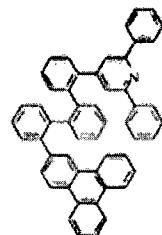
[A-325]



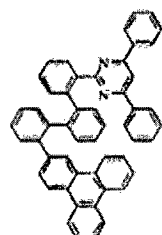
[A-326]



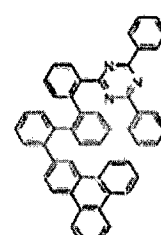
[A-327]



[A-328]

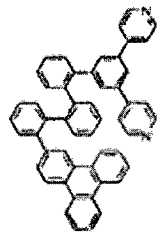


[A-329]

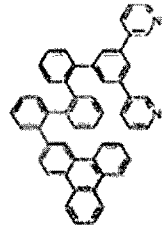


10

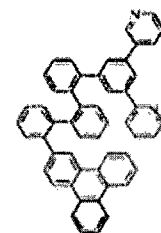
[A-330]



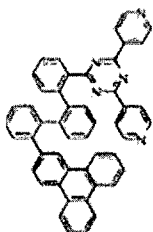
[A-331]



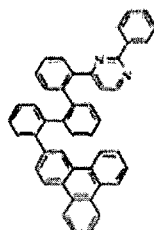
[A-332]



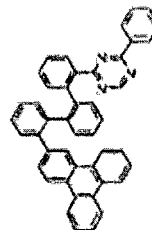
[A-333]



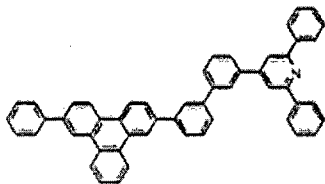
[A-334]



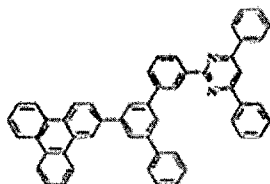
[A-335]



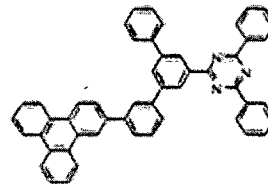
[A-336]



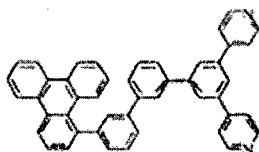
[A-337]



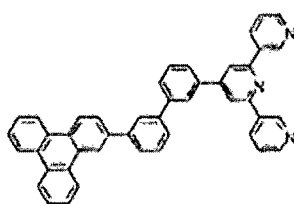
[A-338]



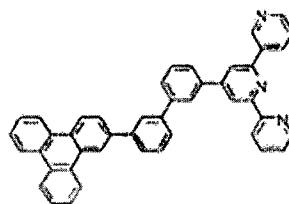
5 [A-339]



[A-340]



[A-341]



전술한 제1 화합물은 카바졸 모이어티 또는 카바졸 유도체를 가지는 적어도 하나의 제2 화합물과 발광층에 함께 사용될 수 있다.

10 카바졸 유도체란, 카바졸 모이어티를 기본으로 하여 유도된 구조로서, 예컨대 상기 화학식 3으로 표현되는 모이어티와 상기 화학식 4로 표현되는 모이어티의 조합으로 이루어진 융합된 카바졸 모이어티를 의미한다.

상기 제2 화합물은 상기 화학식 2로 표현될 수 있다.

본 발명의 일 구현예에 따른 상기 화학식 2의 L^3 내지 L^6 은 각각 독립적으로, 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는
15 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기일 수 있고, 구체적으로는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기일 수 있다. 예컨대, 단일결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 쿼터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 또는
20 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기일 수 있다.

본 발명의 일 구현예에 따른 화학식 1의 R^7 내지 R^{10} 은 전술한 바와 같이, 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환

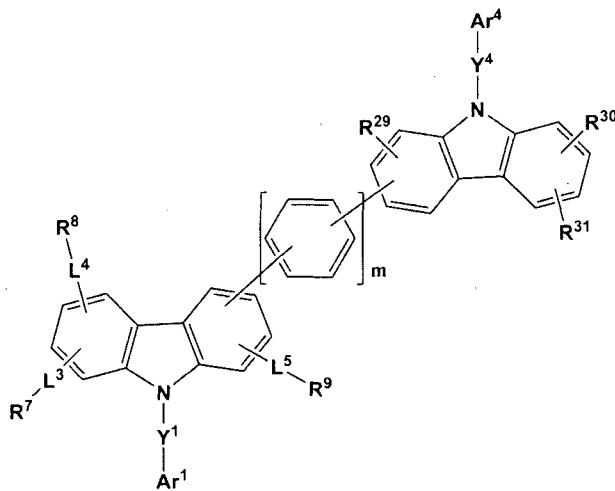
또는 비치환된 C6 내지 C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C50
 헤테로고리기 또는 이들의 조합일 수 있고,

구체적으로는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기,
 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C50 헤테로고리기일 수 있다. 예컨대, R⁷ 내지

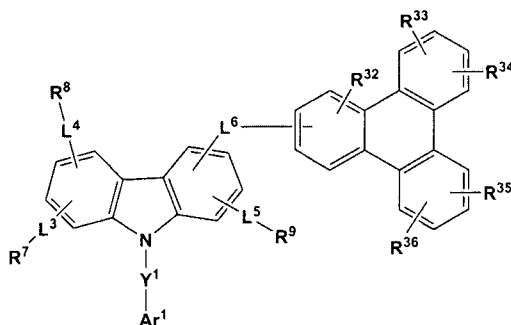
- 5 R¹⁰은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 페닐기, 또는 치환 또는
 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된
 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된
 디벤조퓨란일기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 또는 이들의 조합에서
 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- 10 상기 화학식 2는 예컨대 하기 화학식 2-I 내지 2-III 중 적어도 하나로
 표현될 수 있다.

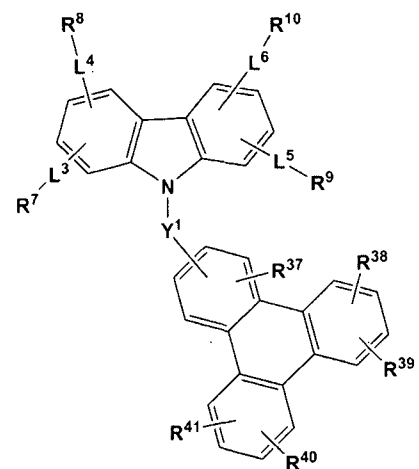
[화학식 2-I]



[화학식 2-II]



[화학식 2-III]



상기 화학식 2-I 내지 2-III에서, L³ 내지 L⁶, Y¹, 및 R⁷ 내지 R¹⁰은 전술한

바와 같고,

R^{29} 내지 R^{41} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C50 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

5 Y^4 는 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

Ar^1 및 Ar^4 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

m 은 0 내지 4의 정수 중 하나이고,

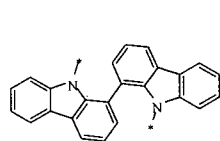
10 여기서, "치환"은 상기에서 정의한 바와 같다.

구체적으로, 상기 화학식 2-I 내지 2-III의 Ar^1 및 Ar^4 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는

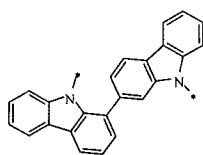
15 비치환된 벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 또는 이들의 조합일 수 있다.

구체적으로, 상기 화학식 2-I는 하기 그룹 3에 나열된 구조 중 하나이고, 상기 $*-Y^1-Ar^1$, $*-Y^4-Ar^4$ 는 하기 그룹 4에 나열된 치환기 중 하나일 수 있다.

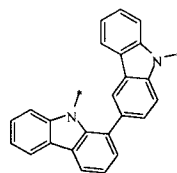
[그룹 3]



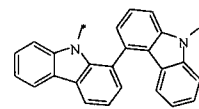
C-1



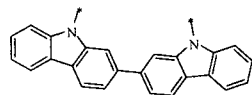
C-2



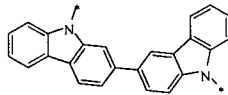
C-3



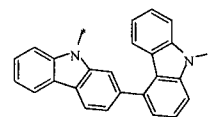
C-4



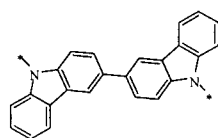
C-5



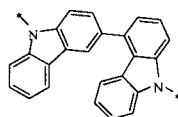
C-6



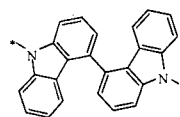
C-7



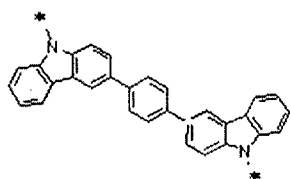
C-8



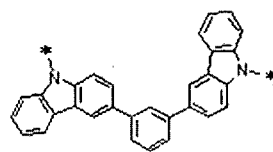
C-9



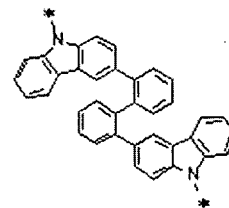
C-10



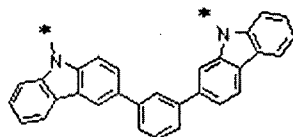
C-11



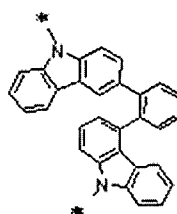
C-12



C-13

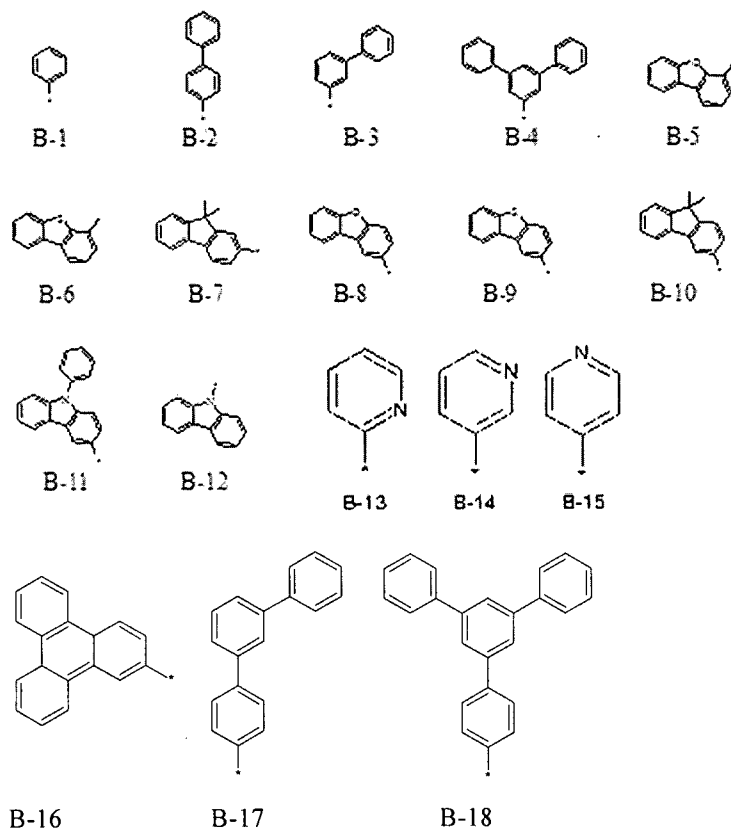


C-14



C-15

[그룹 4]



5

상기 그룹 3 및 그룹 4에서, *은 연결 지점이다.

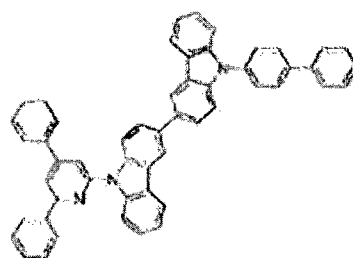
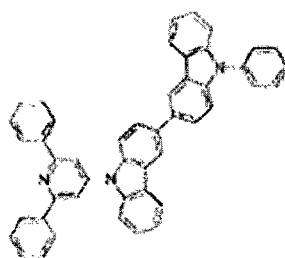
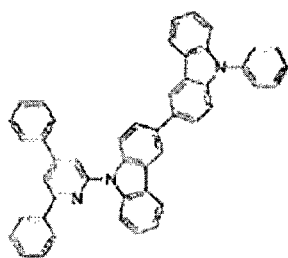
상기 화학식 2로 표현되는 제2 화합물은 예컨대 하기 그룹 B 내지 그룹 D에 나열된 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[그룹 B]

[B-1]

[B-2]

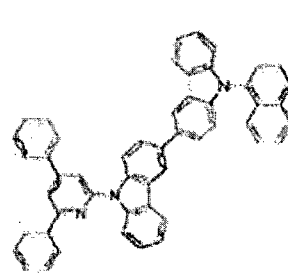
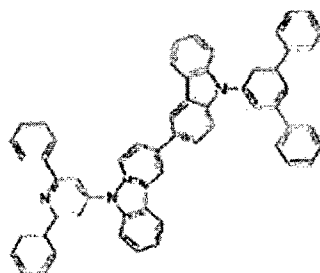
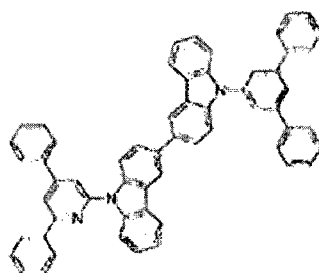
[B-3]



[B-4]

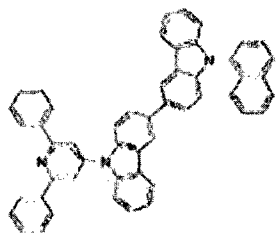
[B-5]

[B-6]

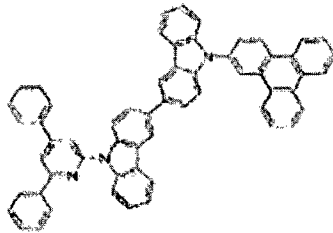


10

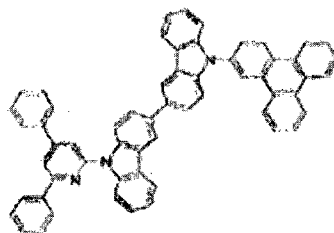
[B-7]



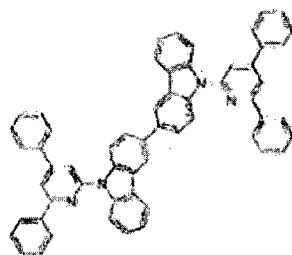
[B-8]



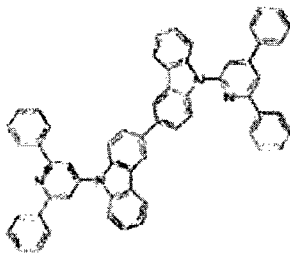
[B-9]



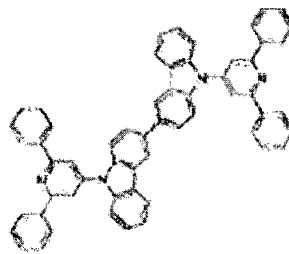
[B-10]



[B-11]

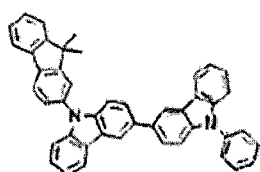


[B-12]

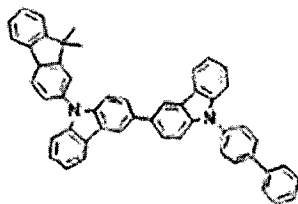


5

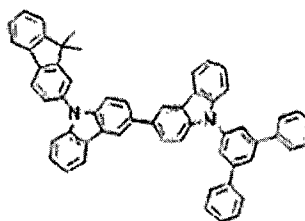
[B-13]



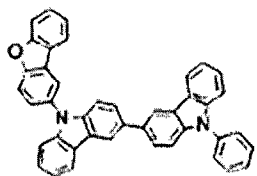
[B-14]



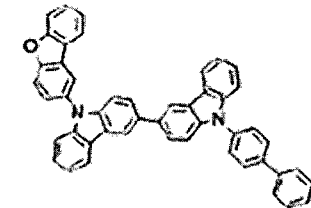
[B-15]



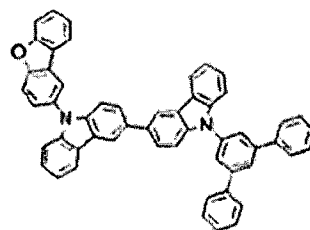
[B-16]



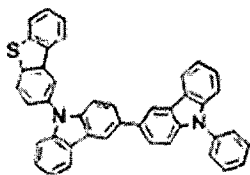
[B-17]



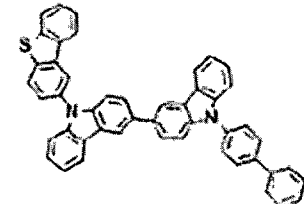
[B-18]



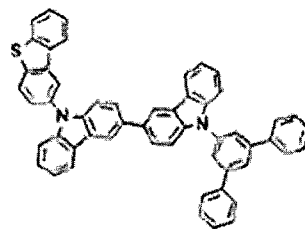
[B-19]



[B-20]

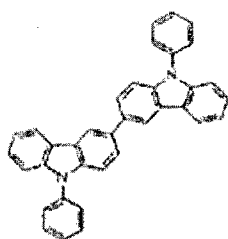


[B-21]

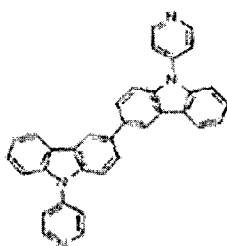


10

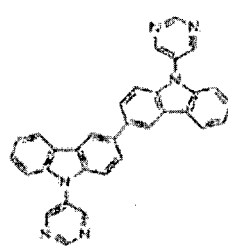
[B-22]



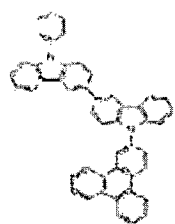
[B-23]



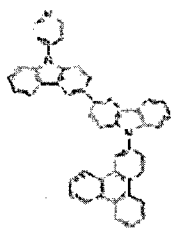
[B-24]



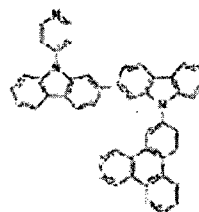
[B-25]



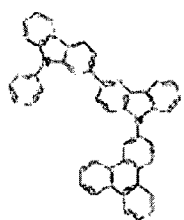
[B-26]



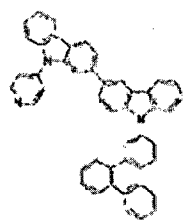
[B-27]



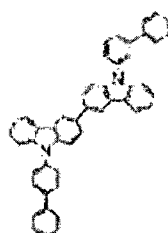
[B-28]



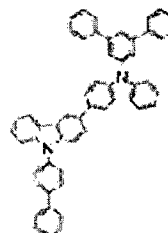
[B-29]



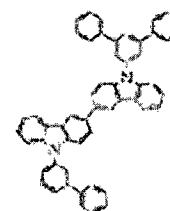
[B-30]



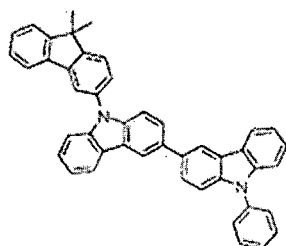
[B-31]



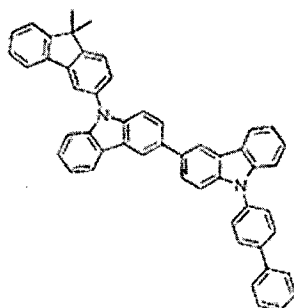
[B-32]



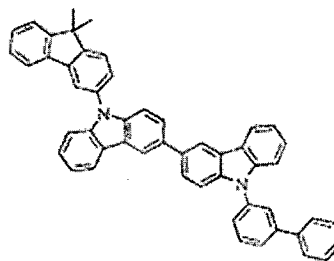
5 [B-33]



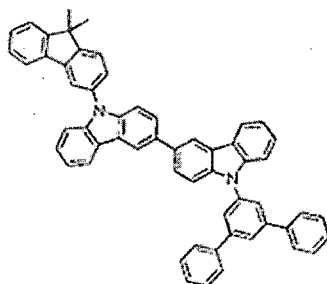
[B-34]



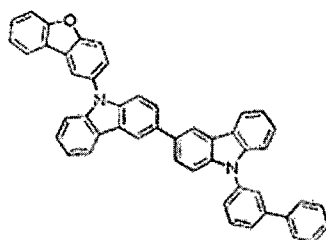
[B-35]



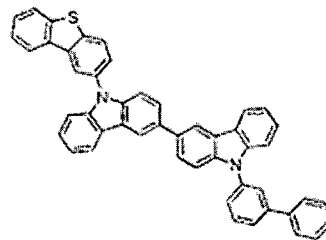
[B-36]



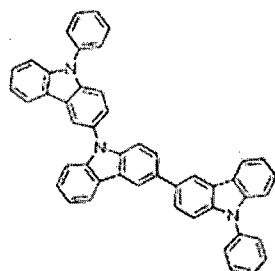
[B-37]



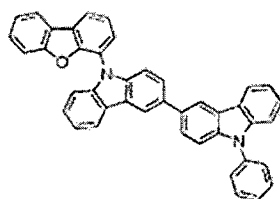
[B-38]



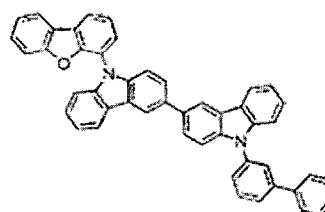
[B-39]



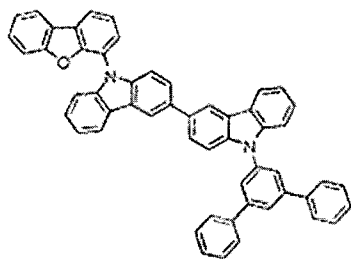
[B-40]



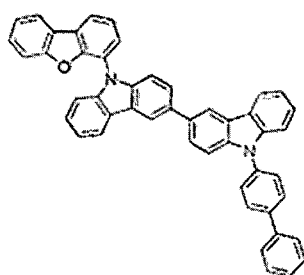
[B-41]



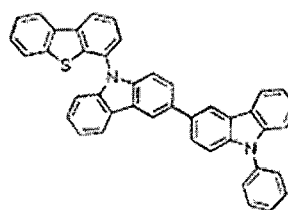
[B-42]



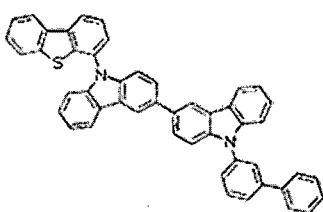
[B-43]



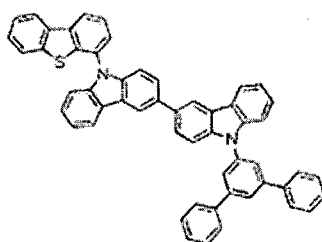
[B-44]



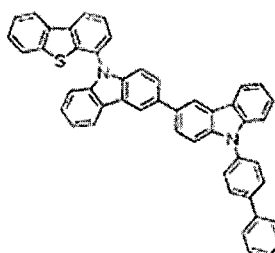
[B-45]



[B-46]

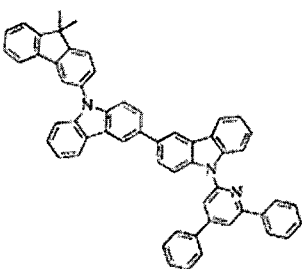


[B-47]

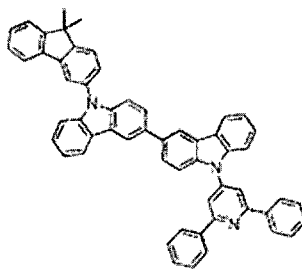


5

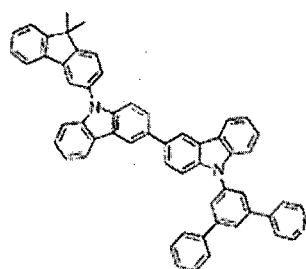
[B-48]



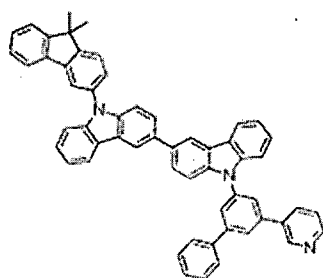
[B-49]



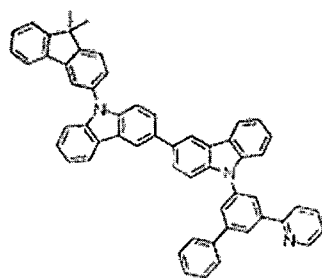
[B-50]



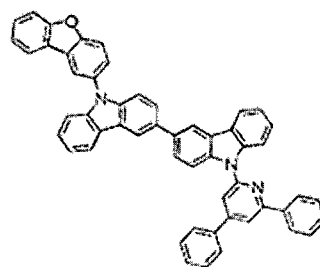
[B-51]



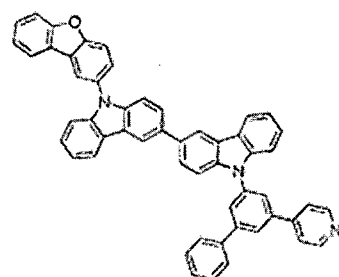
[B-52]



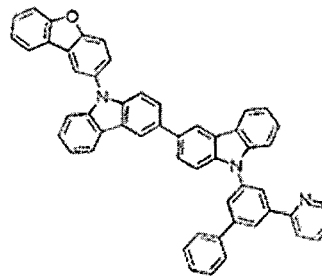
[B-53]



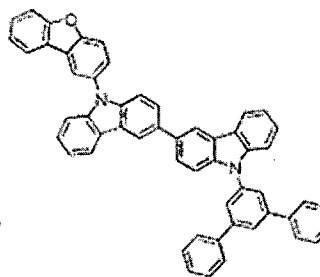
[B-54]



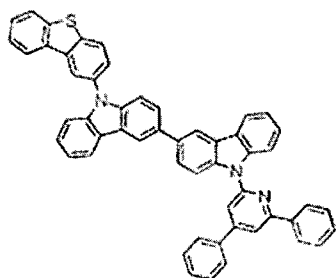
[B-55]



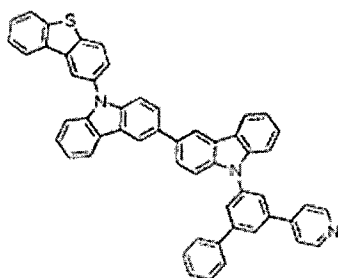
[B-56]



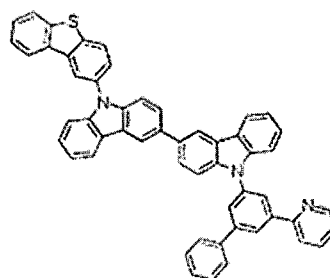
[B-57]



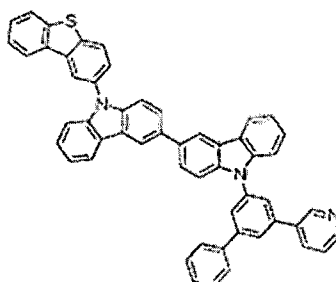
[B-58]



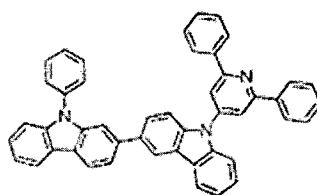
[B-59]



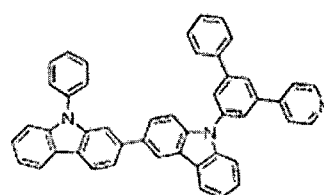
[B-60]



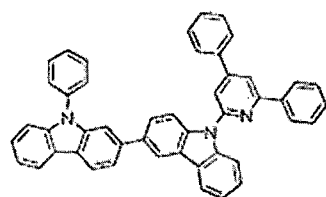
[B-61]



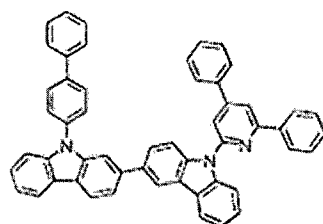
[B-62]



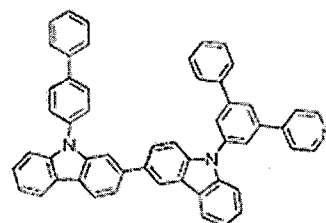
5 [B-63]



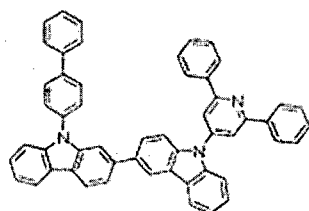
[B-64]



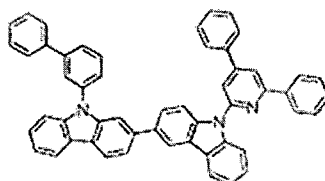
[B-65]



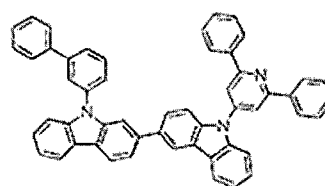
[B-66]



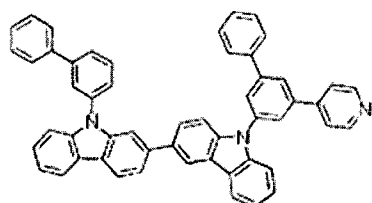
[B-67]



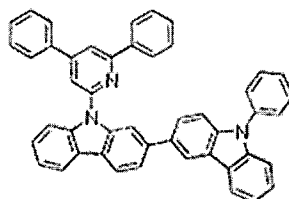
[B-68]



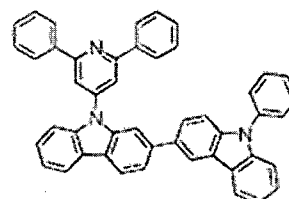
[B-69]



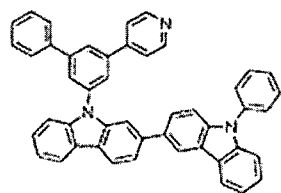
[B-70]



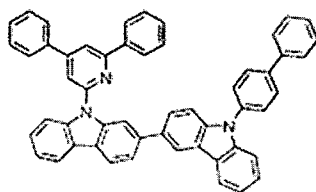
[B-71]



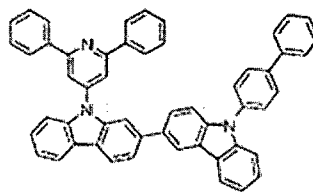
[B-72]



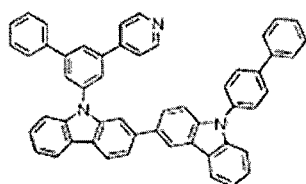
[B-73]



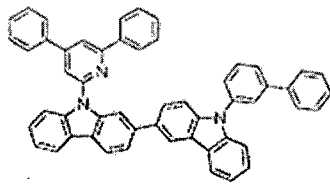
[B-74]



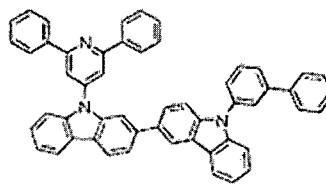
[B-75]



[B-76]

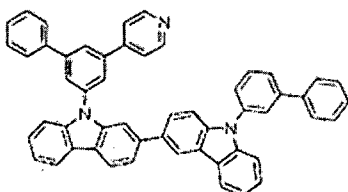


[B-77]

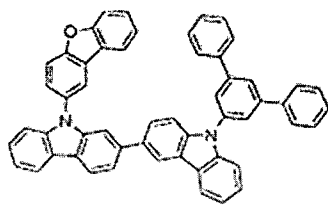


5

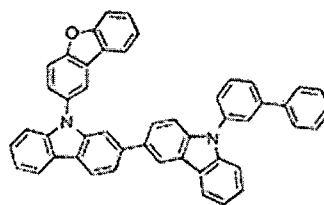
[B-78]



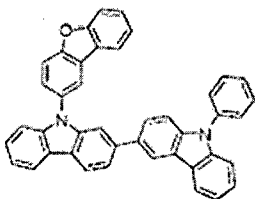
[B-79]



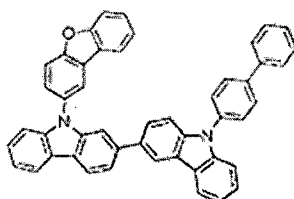
[B-80]



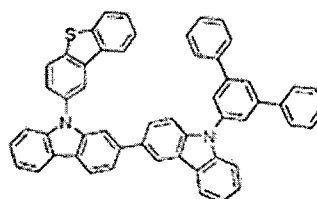
[B-81]



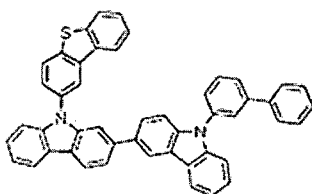
[B-82]



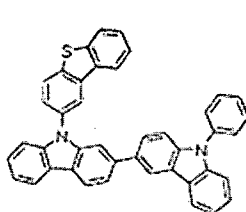
[B-83]



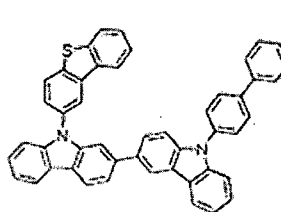
[B-84]



[B-85]

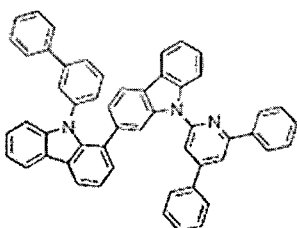


[B-86]

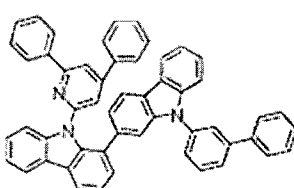


10

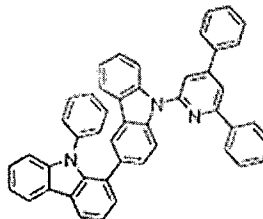
[B-87]



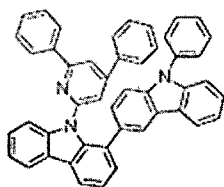
[B-88]



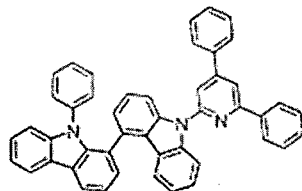
[B-89]



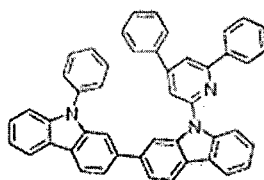
[B-90]



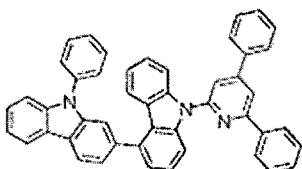
[B-91]



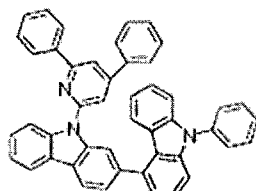
[B-92]



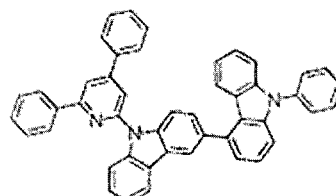
[B-93]



[B-94]

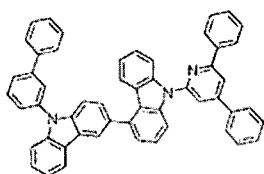


[B-95]

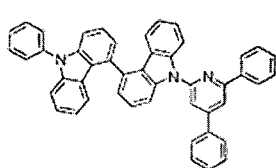


5

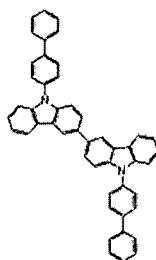
[B-96]



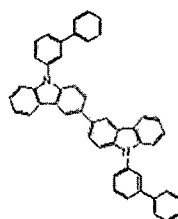
[B-97]



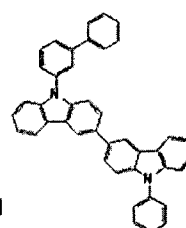
[B-98]



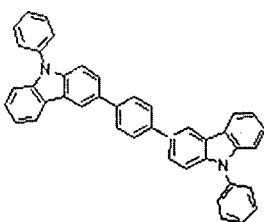
[B-99]



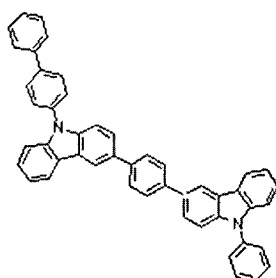
[B-100]



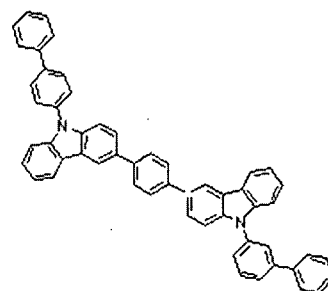
[B-101]



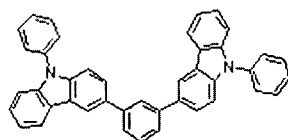
[B-102]



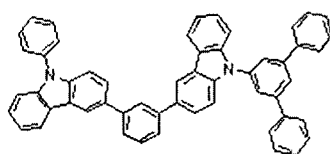
[B-103]



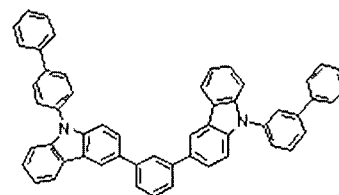
[B-104]



[B-105]

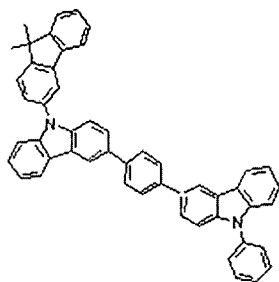


[B-106]

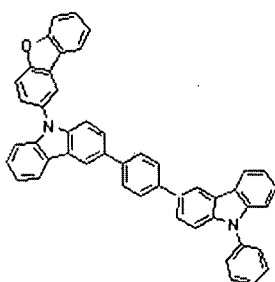


10

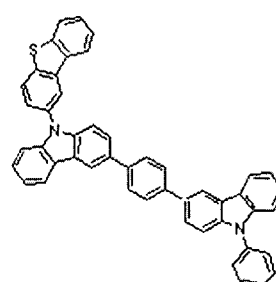
[B-107]



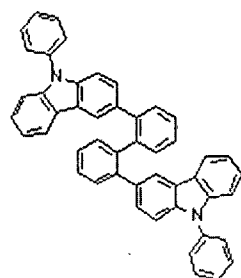
[B-108]



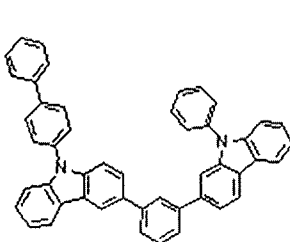
[B-109]



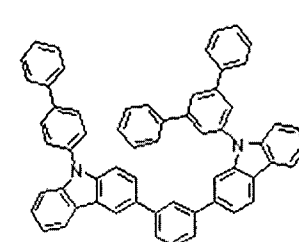
[B-110]



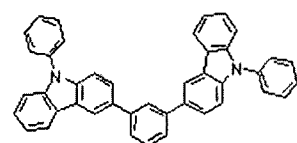
[B-111]



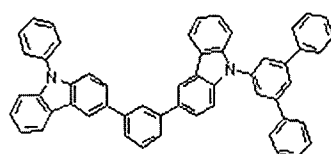
[B-112]



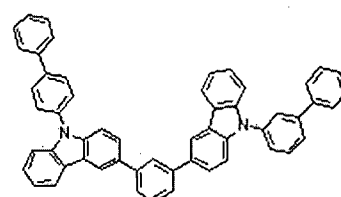
5 [B-113]



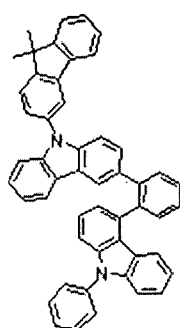
[B-114]



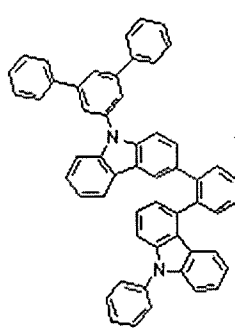
[B-115]



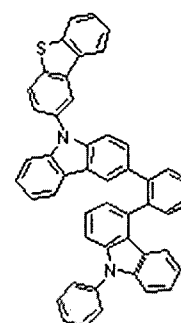
[B-116]



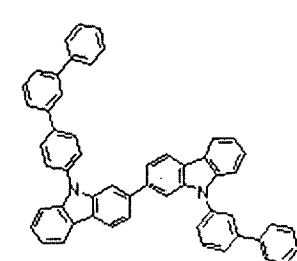
[B-117]



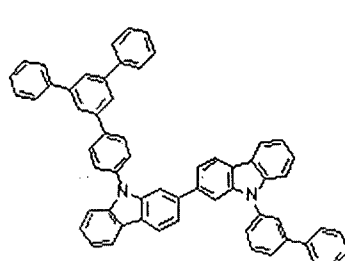
[B-118]



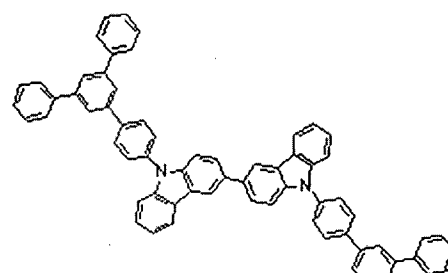
[B-119]



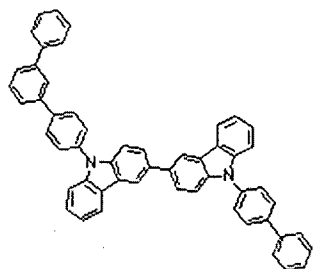
[B-120]



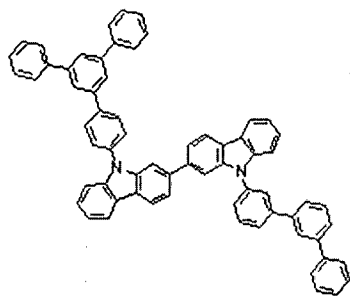
[B-121]



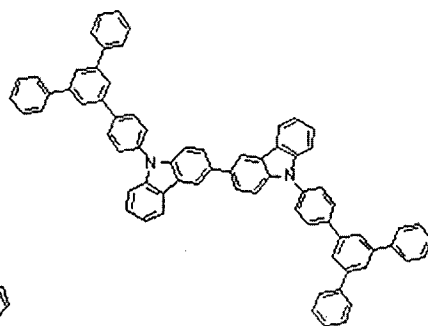
[B-122]



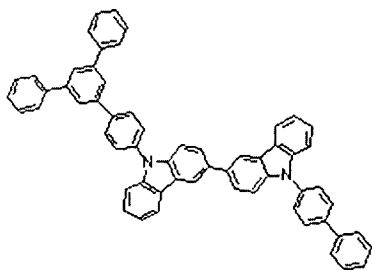
[B-123]



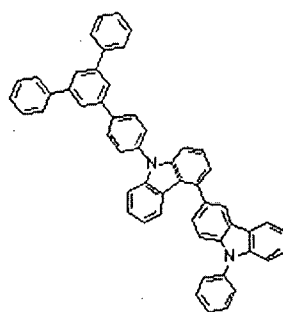
[B-124]



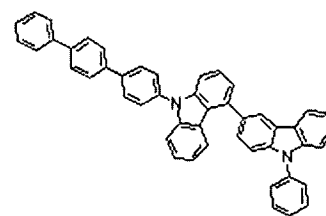
[B-125]



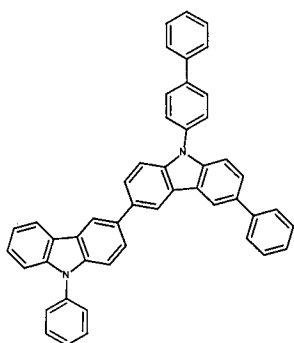
[B-126]



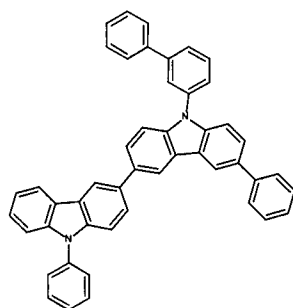
[B-127]



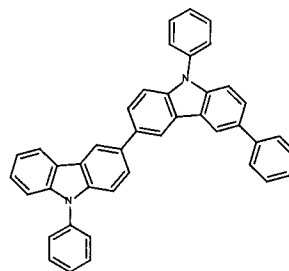
5 [B-128]



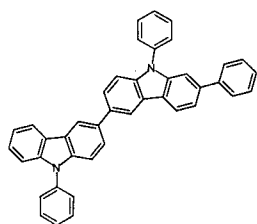
[B-129]



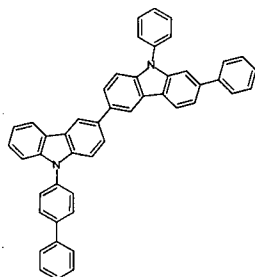
[B-130]



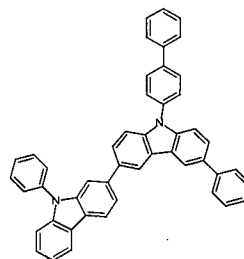
[B-131]



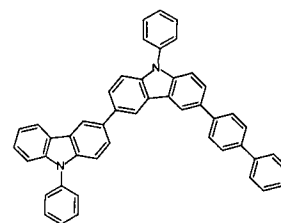
[B-132]



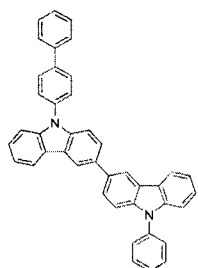
[B-133]



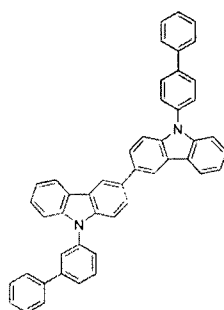
[B-134]



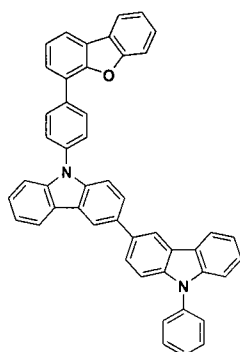
[B-135]



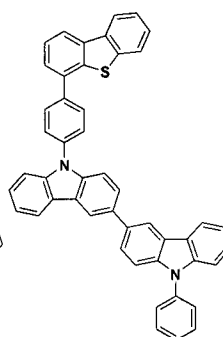
[B-136]



[B-137]

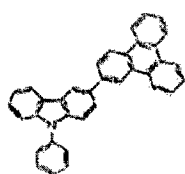


[B-138]

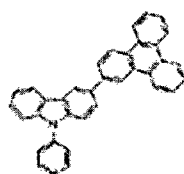


[C 그룹]

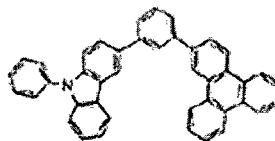
[C-1]



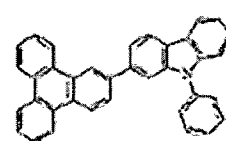
[C-2]



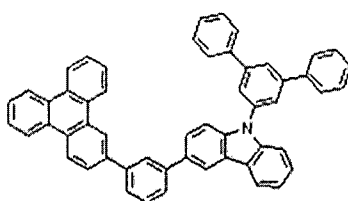
[C-3]



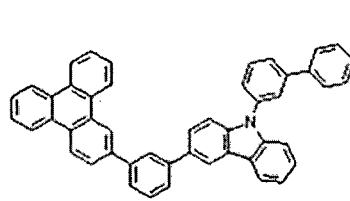
[C-4]



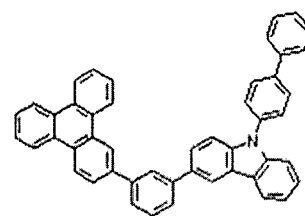
[C-5]



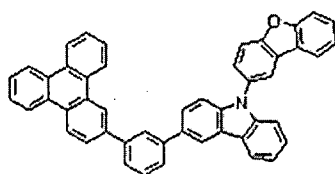
[C-6]



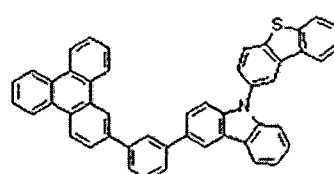
[C-7]



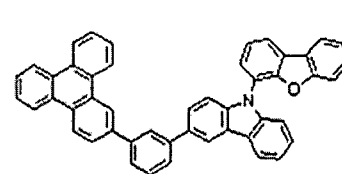
[C-8]



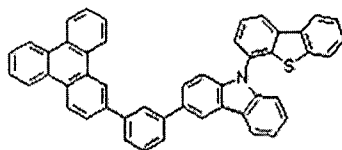
[C-9]



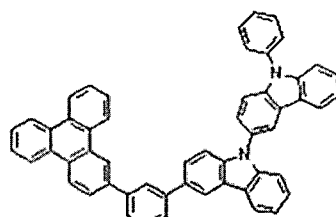
[C-10]



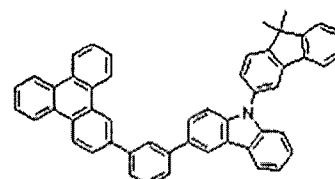
[C-11]



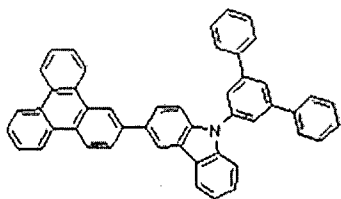
[C-12]



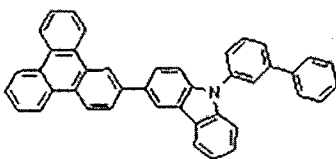
[C-13]



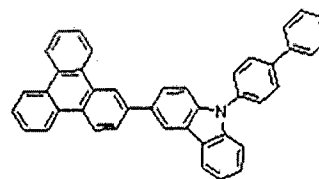
[C-14]



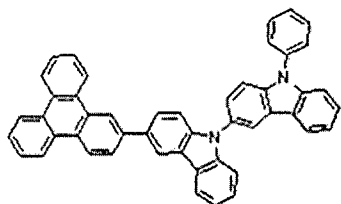
[C-15]



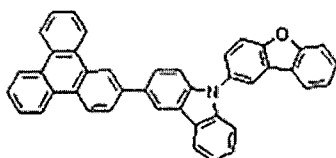
[C-16]



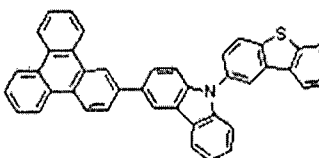
[C-17]



[C-18]

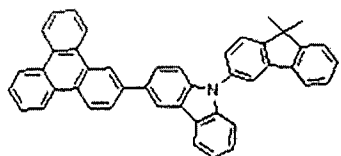


[C-19]

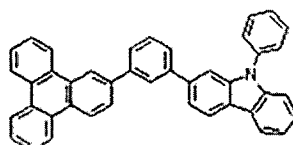


5

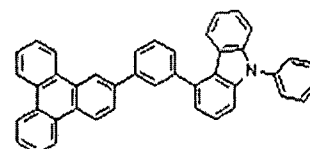
[C-20]



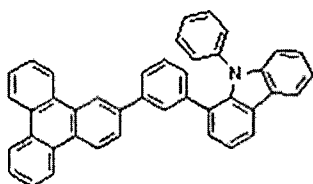
[C-21]



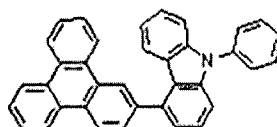
[C-22]



[C-23]



[C-24]



[D 그룹]

10

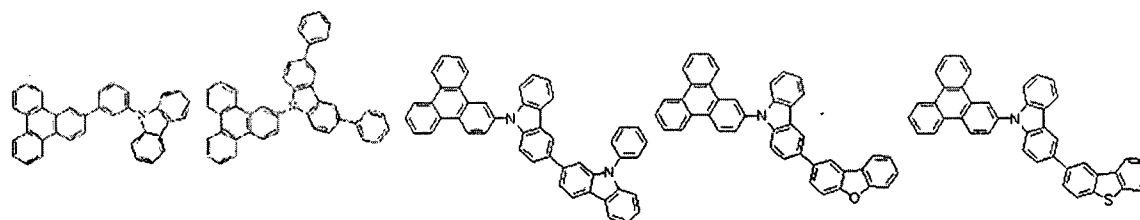
[D-1]

[D-2]

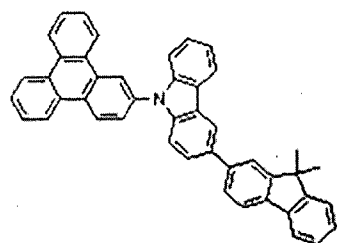
[D-3]

[D-4]

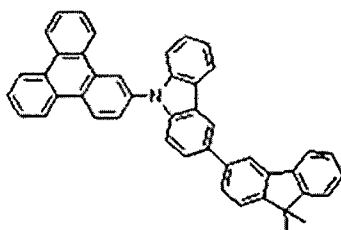
[D-5]



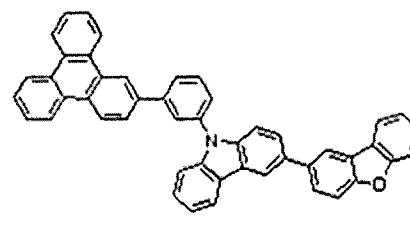
[D-6]



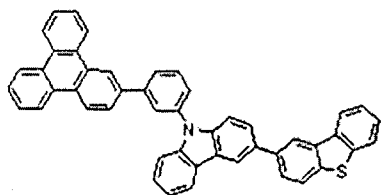
[D-7]



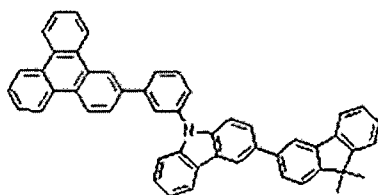
[D-8]



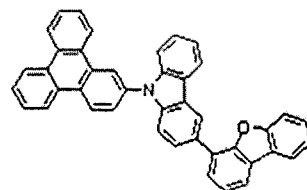
[D-9]



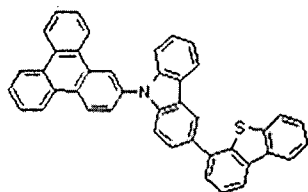
[D-10]



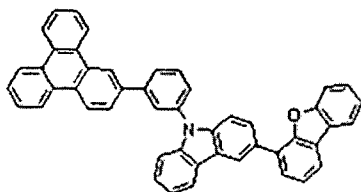
[D-11]



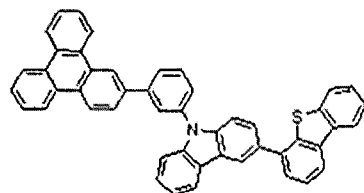
[D-12]



[D-13]

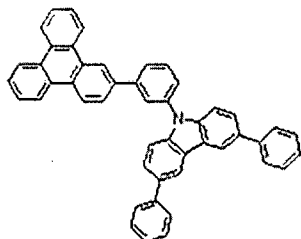


[D-14]

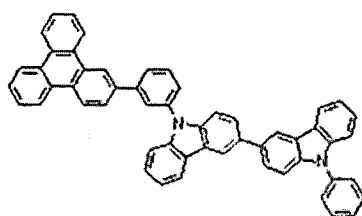


5

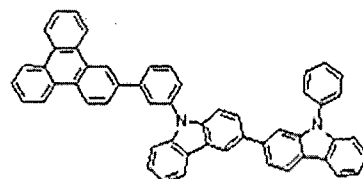
[D-15]



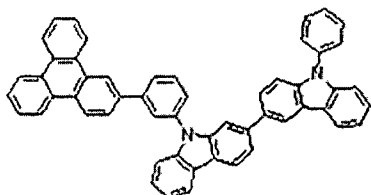
[D-16]



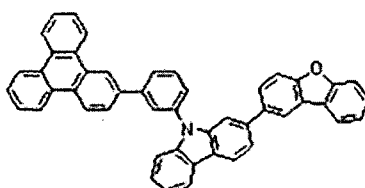
[D-17]



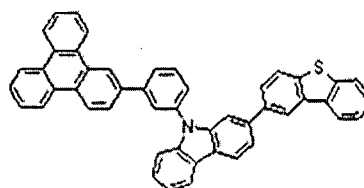
[D-18]



[D-19]



[D-20]



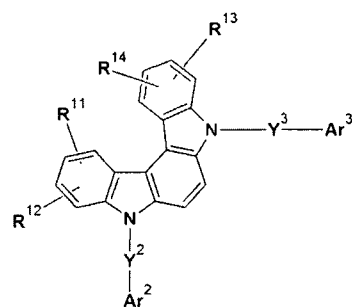
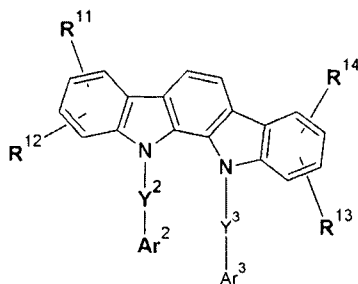
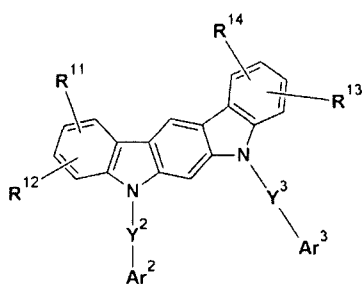
또한, 상기 제2 화합물은 상기 화학식 3으로 표현되는 모이어티와 상기
10 화학식 4로 표현되는 모이어티의 조합으로 표현될 수 있다.

상기 화학식 3으로 표현되는 모이어티와 상기 화학식 4로 표현되는
모이어티의 조합으로 이루어진 제2 화합물은 예컨대, 하기 화학식 3-I 내지 3-V
중 적어도 하나로 표현될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[화학식 3-I]

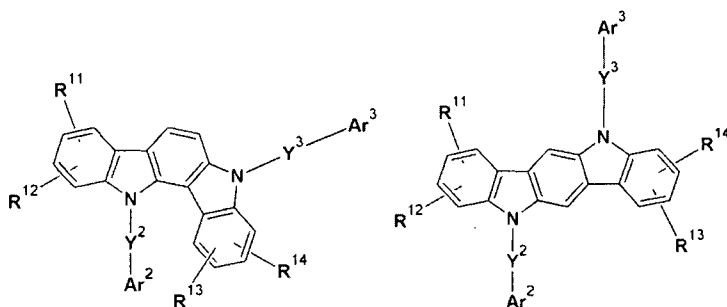
[화학식 3-II]

[화학식 3-III]



[화학식 3-VI]

[화학식 3-V]



상기 화학식 3-I 내지 3-V에서, Y^2 , Y^3 , Ar^2 , 및 R^{11} 내지 R^{14} 는 전술한 바와 같다. Ar^3 는 Ar^2 에 대하여 정의한 바와 같다.

- 5 상기 화학식 3으로 표현되는 모이어티와 상기 화학식 4로 표현되는 모이어티의 조합으로 이루어진 제2 화합물은 예컨대 하기 그룹 E에 나열된 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[그룹 E]

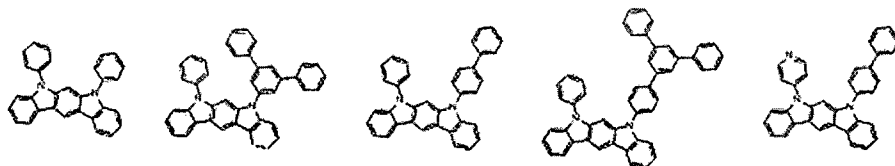
[E-1]

[E-2]

[E-3]

[E-4]

[E-5]



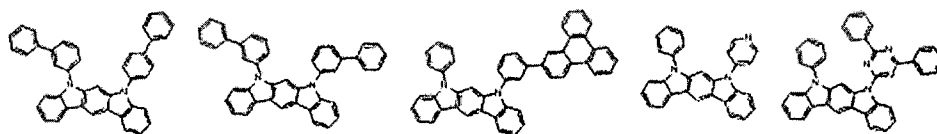
[E-6]

[E-7]

[E-8]

[E-9]

[E-10]



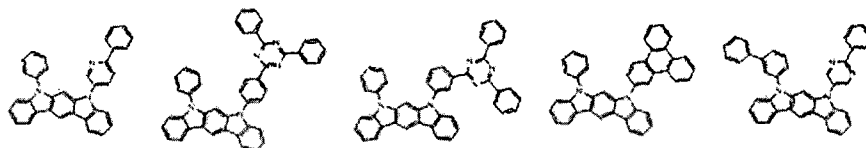
[E-11]

[E-12]

[E-13]

[E-14]

[E-15]



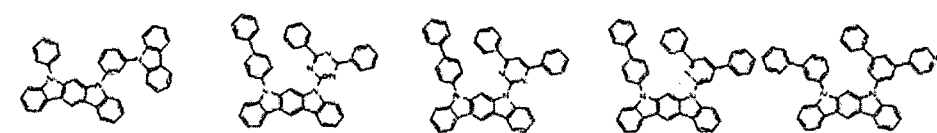
[E-16]

[E-17]

[E-18]

[E-19]

[E-20]



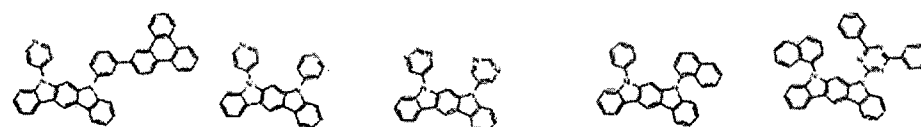
[E-21]

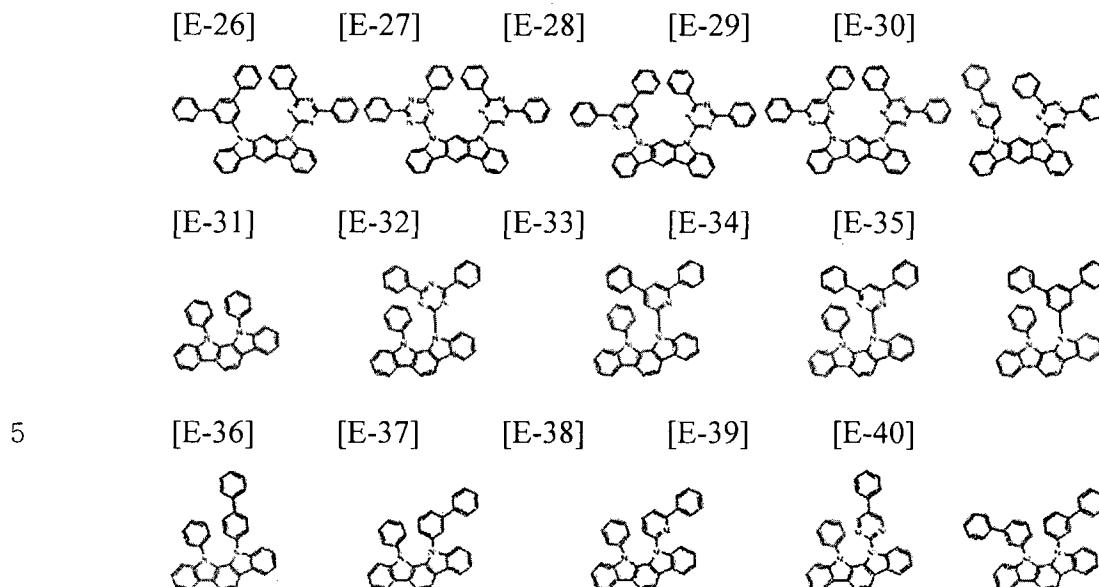
[E-22]

[E-23]

[E-24]

[E-25]





상기 제2 화합물은 정공 특성이 상대적으로 강한 바이폴라(bipolar) 특성을 가지는 화합물로, 상기 제1 화합물과 함께 발광층에 사용되어 전하의 이동성을 높이고 안정성을 높임으로써 발광 효율 및 수명 특성을 개선시킬 수 있다. 또한 정공 특성을 가지는 상기 제2 화합물과 상기 제1 화합물의 비율을 조절함으로써 전하의 이동성을 조절할 수 있다. 상기 제2 화합물의 정공 특성은 제1 화합물과의 관계에서 상대적으로 결정되는 것이므로, 상기 화학식 2의 R^7 내지 R^{10} 및 Ar^1 중 어느 하나의 위치에서 치환 또는 비치환된 피리디닐기와 같은 약한 전자 특성을 갖는 치환기를 포함할 수 있다.

또한, 상기 제1 화합물과 제2 화합물은 예컨대 약 1:9 내지 9:1의 중량비로 포함될 수 있고, 구체적으로 2:8 내지 8:2, 3:7 내지 7:3, 4:6 내지 6:4, 그리고 5:5의 중량비로 포함될 수 있다. 상기 범위로 포함됨으로써 바이폴라 특성이 구현되어 효율과 수명을 동시에 개선할 수 있다.

발광층(32)은 전술한 제1 화합물과 제2 화합물 외에 호스트로서 제3 화합물을 더 포함할 수 있다.

상기 제3 화합물은 상기 화학식 5로 표현될 수 있다.

상기 화학식 3의 X^1 내지 X^{12} 는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^d 일 수 있고,

본 발명의 일 구현예에 따른 R^d 는 전술한 바와 같이, 각각 독립적으로,

수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1

내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알키닐기, 치환 또는

비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기,

치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 히드록시기, 티올기, 또는 이들의 조합일 수 있다.

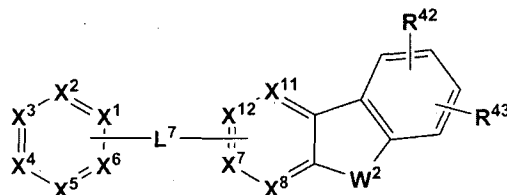
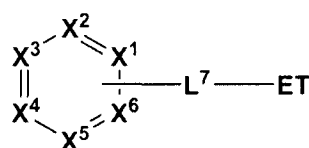
상기 R^d는 각각 독립적으로 존재하고, 구체적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합일 수 있다. 예컨대, 치환 또는 비치환된 페닐기, 또는 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 또는 이들의 조합에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

또한, 상기 인접한 R^d는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고, 예컨대, 치환 또는 비치환된 벤조퓨란피리미딘, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜피리미딘, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 또는 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기를 형성할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

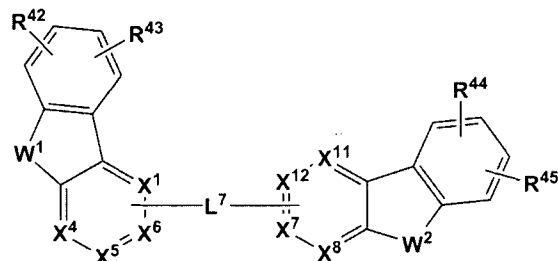
상기 화학식 5는 예컨대 하기 화학식 5-I 내지 5-III 중 어느 하나로 표현될 수 있다.

[화학식 5-I]

[화학식 5-II]



[화학식 5-III]



상기 화학식 5-I 내지 5-III에서, X¹ 내지 X⁸, X¹¹, X¹², 및 L⁷은 전술한 바와 같고, X¹, X⁴, X⁵ 및 X⁶ 중 적어도 하나는 N이고, X⁷, X⁸, X¹¹ 및 X¹² 중 적어도 하나는 N이고,

W¹ 및 W²는 각각 독립적으로 O 또는 S이고,

R⁴² 내지 R⁴⁵은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1

내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C50 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

ET는 치환 또는 비치환된 피리다닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 또는 이들의 조합이고,

여기서, "치환"은 상기에서 정의한 바와 같다.

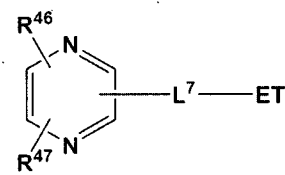
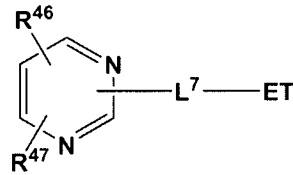
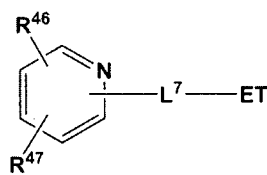
구체적으로, 상기 화학식 5-I은 예컨대 하기 화학식 5-I-a 내지 5-I-f 중 어느 하나로 표현될 수 있다.

10

[화학식 5-I-a]

[화학식 5-I-b]

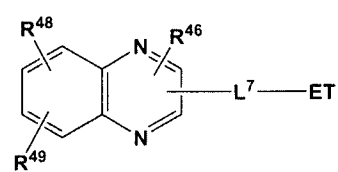
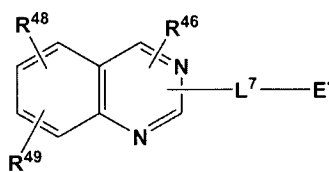
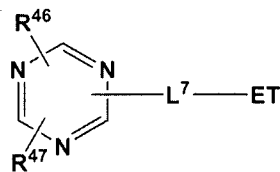
[화학식 5-I-c]



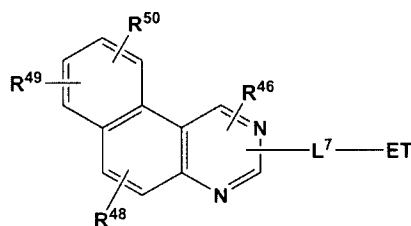
[화학식 5-I-d]

[화학식 5-I-e]

[화학식 5-I-f]



[화학식 5-I-f]



15

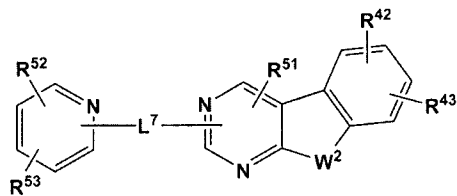
상기 화학식 5-I-a 내지 5-I-f에서, L^7 및 ET는 전술한 바와 같고,

R^{46} 내지 R^{50} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C50 헤테로고리기 또는 이들의 조합일 수 있다.

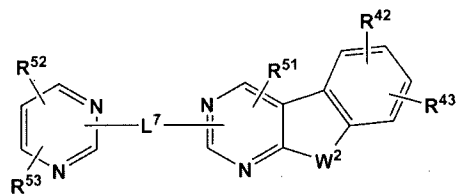
20

구체적으로, 상기 화학식 5-II는 예컨대 하기 화학식 5-II-a 내지 5-I-n 중 어느 하나로 표현될 수 있다.

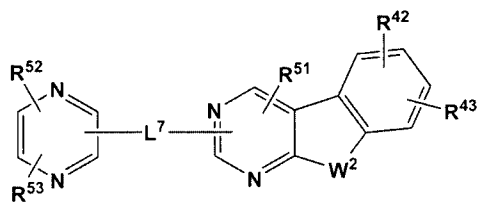
[화학식 5-II-a]



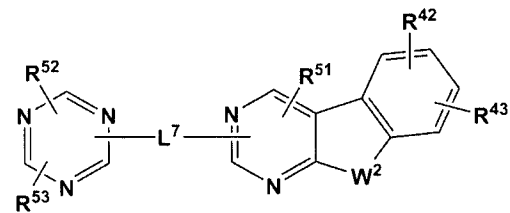
[화학식 5-II-b]



[화학식 5-II-c]

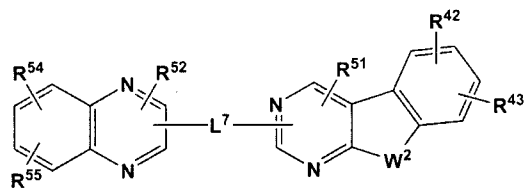


[화학식 5-II-d]

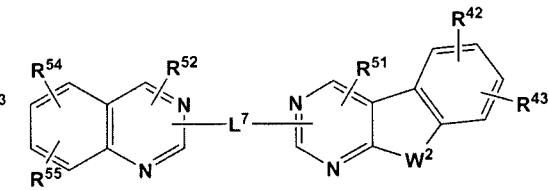


5

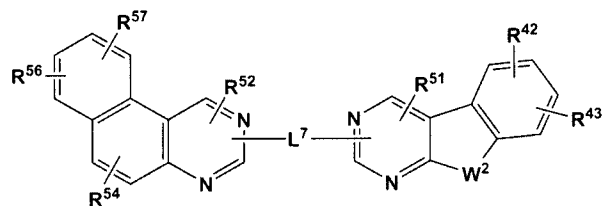
[화학식 5-II-e]



[화학식 5-II-f]

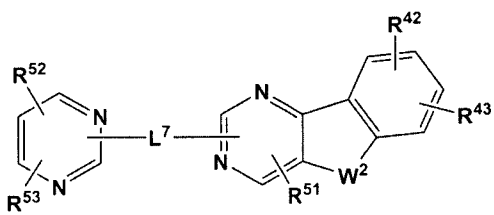
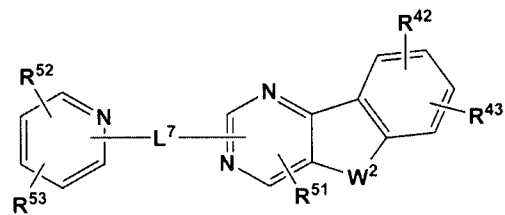


[화학식 5-II-g]



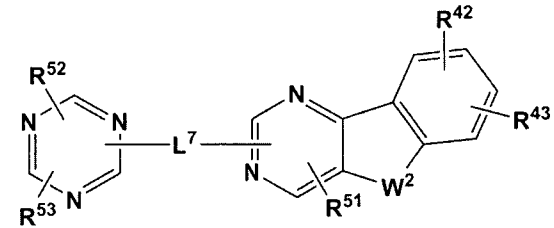
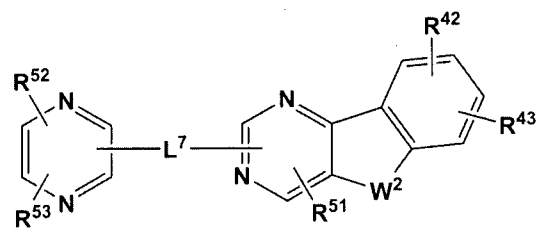
[화학식 5-II-h]

[화학식 5-II-i]



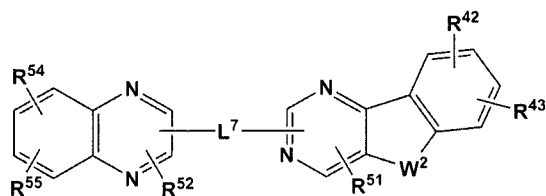
[화학식 5-II-j]

[화학식 5-II-k]

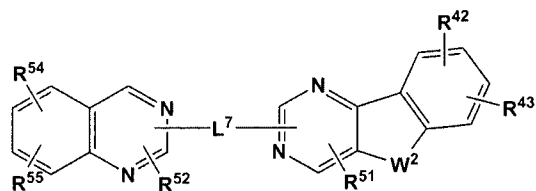


10

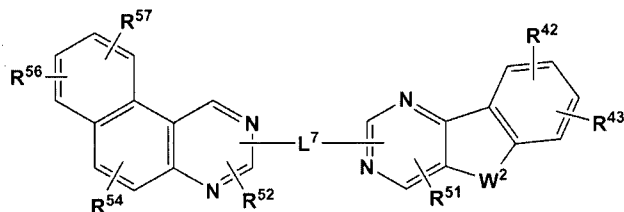
[화학식 5-II-l]



[화학식 5-II-m]



[화학식 5-II-n]

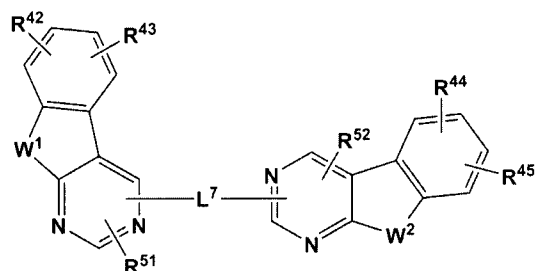


- 5 상기 화학식 5-I-a 내지 5-I-f에서, L^7 , 및 W^2 , R^{42} 및 R^{43} 은 전술한 바와 같고,

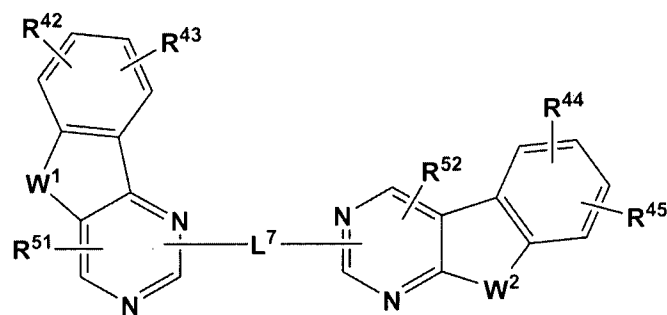
R^{51} 내지 R^{57} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C50 헤테로고리기 또는 이들의 조합일 수 있다.

- 10 구체적으로, 상기 화학식 5-III은 예컨대 하기 화학식 5-III-a 내지 5-III-c 중 어느 하나로 표현될 수 있다.

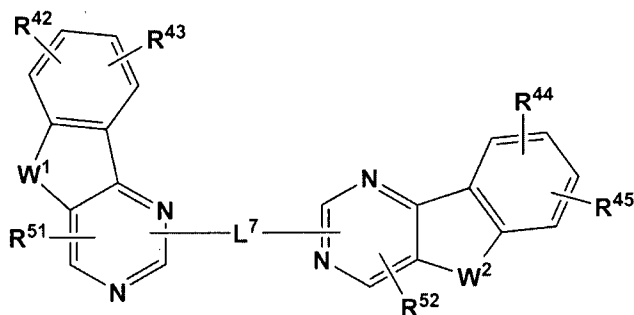
[화학식 5-III-a]



[화학식 5-III-b]



[화학식 5-III-c]



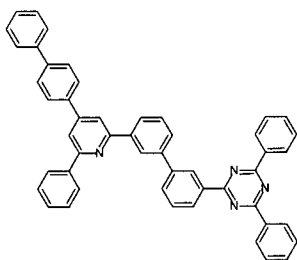
상기 화학식 5-III-a 내지 5-III-c에서, W^1 및 W^2 , R^{42} 내지 R^{45} , R^{51} , R^{52} , 및 L^7 는 전술한 바와 같다.

- 5 본 발명의 일 구현예에서, L^7 은 예컨대 상기 그룹 2에 나열된 치환 또는 비치환된 기에서 선택될 수 있다.

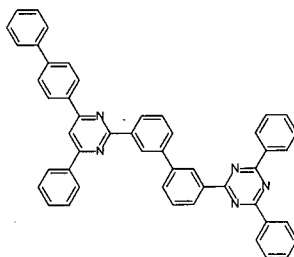
상기 화학식 5로 표현되는 제3 화합물은 예컨대 하기 그룹 F 내지 H에 나열된 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[그룹 F](그룹 F에 기재된 화합물 구조에서 헤테로원자는 모두 “N”이다)

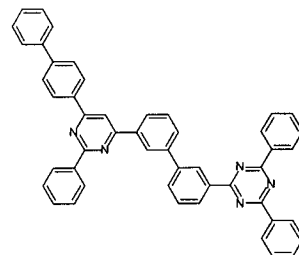
10 [F-1]



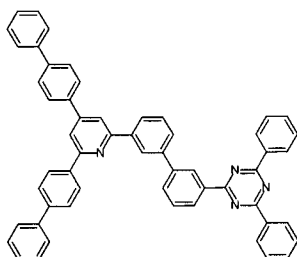
[F-2]



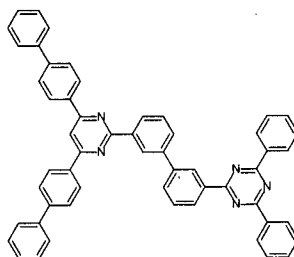
[F-3]



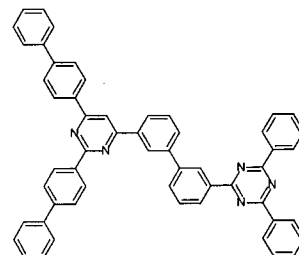
[F-4]



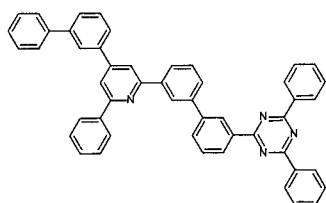
[F-5]



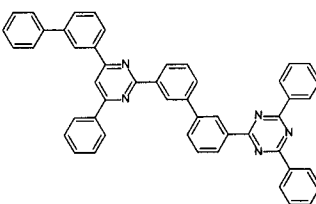
[F-6]



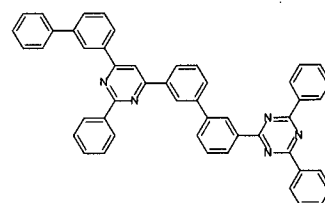
[F-7]



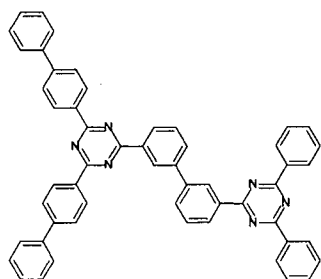
[F-8]



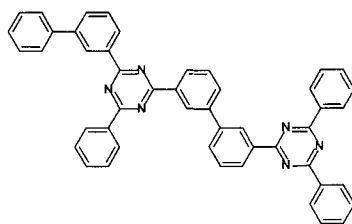
[F-9]



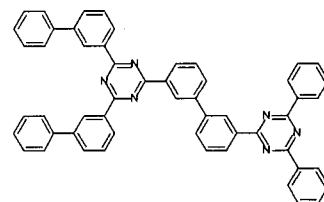
[F-10]



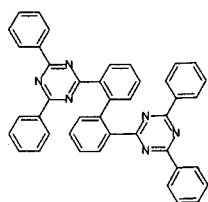
[F-11]



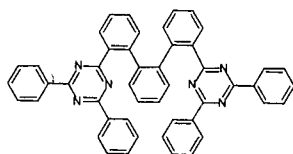
[F-12]



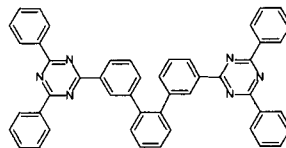
[F-13]



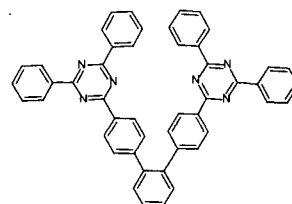
[F-14]



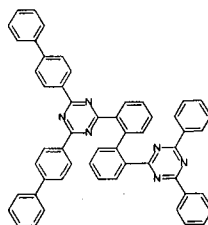
[F-15]



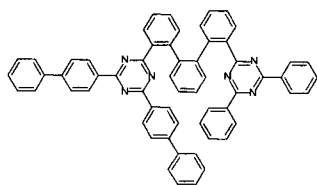
[F-16]



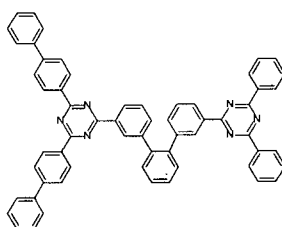
5 [F-17]



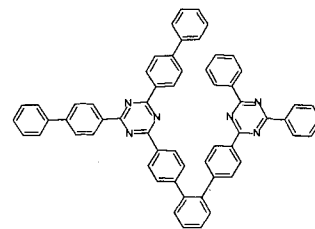
[F-18]



[F-19]

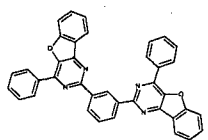


[F-20]

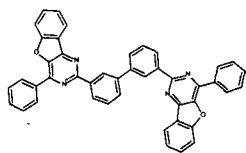


[그룹 G](그룹 G에 기재된 화합물의 구조식에서 6각고리 화합물에 기재된 헤테로 원자는 “N”이며, 5각 고리에 포함된 헤테로원자는 “O” 또는 “S”이다.)

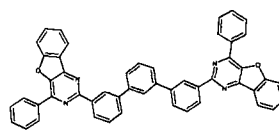
10 [G-1]



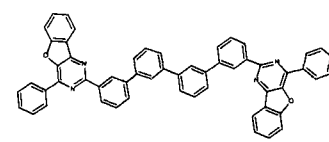
[G-2]



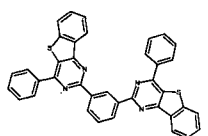
[G-3]



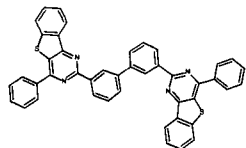
[G-4]



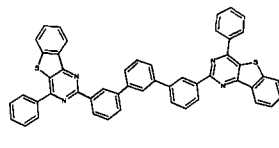
[G-5]



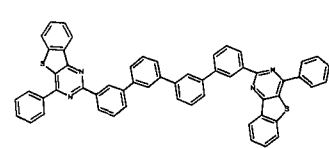
[G-6]



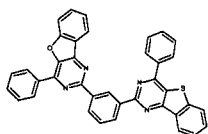
[G-7]



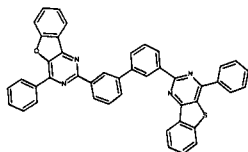
[G-8]



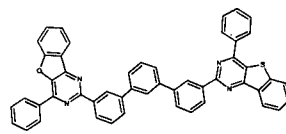
[G-9]



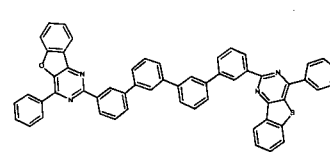
[G-10]



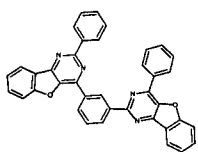
[G-11]



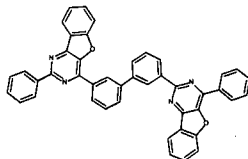
[G-12]



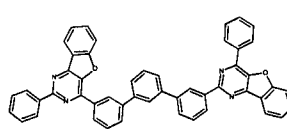
[G-13]



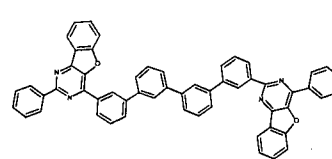
[G-14]



[G-15]

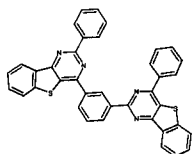


[G-16]

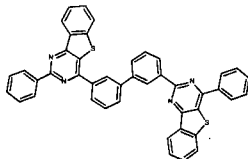


5

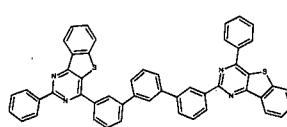
[G-17]



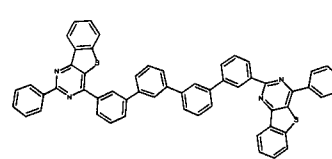
[G-18]



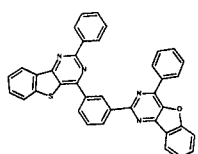
[G-19]



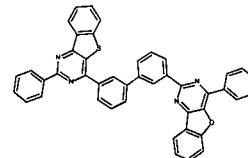
[G-20]



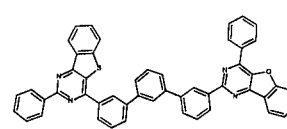
[G-21]



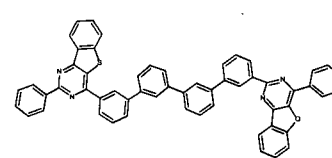
[G-22]



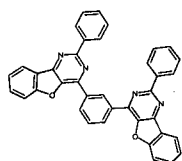
[G-23]



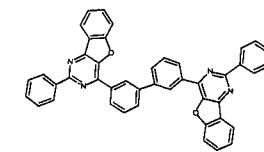
[G-24]



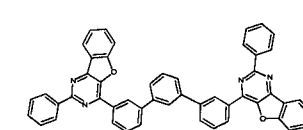
[G-25]



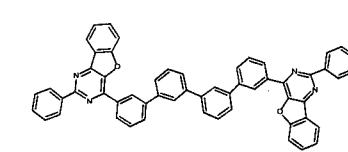
[G-26]



[G-27]

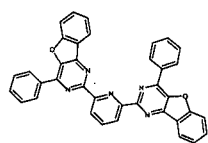


[G-28]

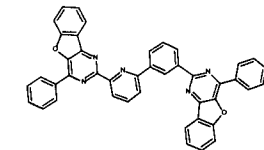


10

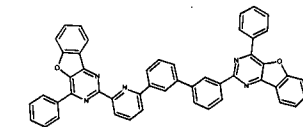
[G-29]



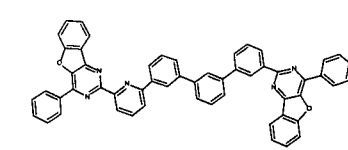
[G-30]



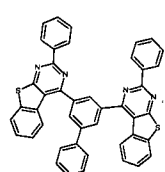
[G-31]



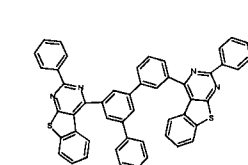
[G-32]



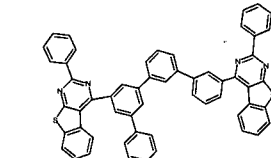
[G-33]



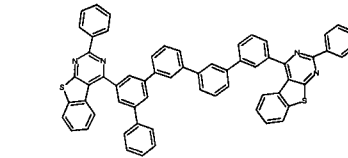
[G-34]



[G-35]



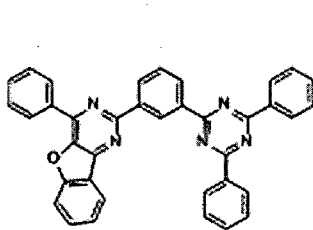
[G-36]



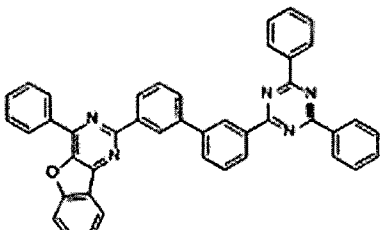
15

[그룹 H] (그룹 H에 기재된 화합물의 구조식에서 6각고리 화합물에 기재된 헤테로 원자는 “N”이며, 5각 고리에 포함된 헤테로원자는 “O” 또는 “S”이다.)

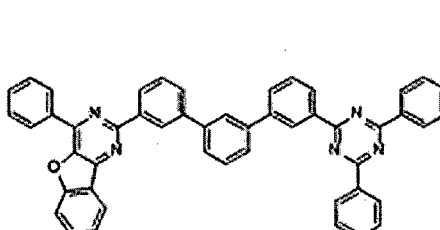
[H-1]



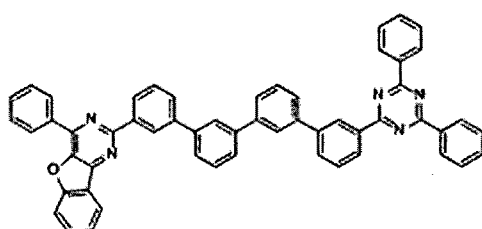
[H-2]



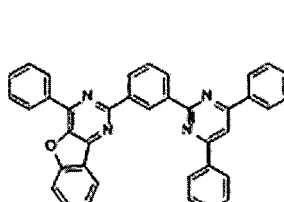
[H-3]



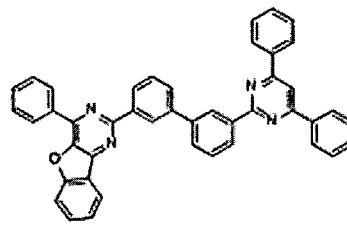
[H-4]



[H-5]

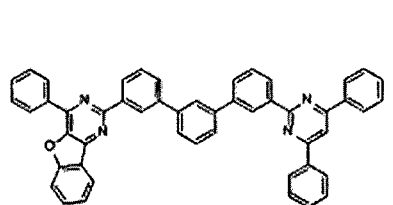


[H-6]

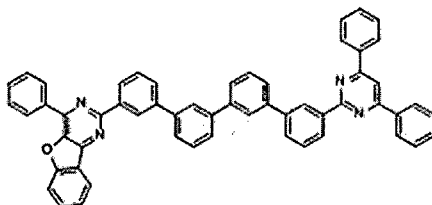


5

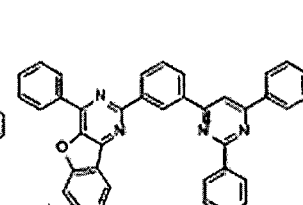
[H-7]



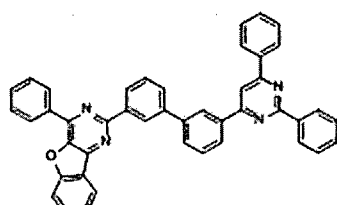
[H-8]



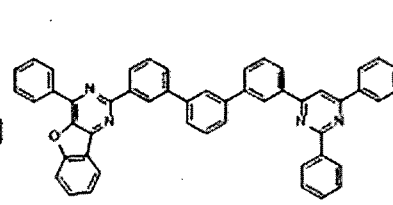
[H-9]



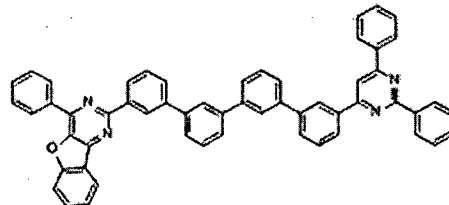
[H-10]



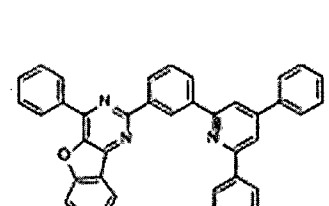
[H-11]



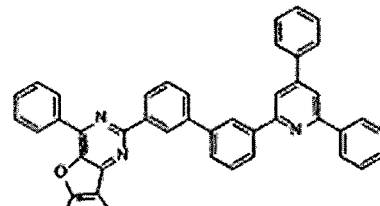
[H-12]



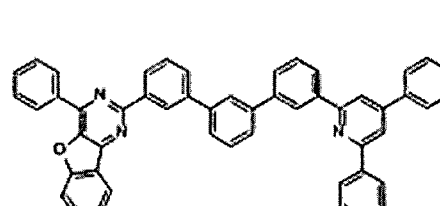
[H-13]



[H-14]

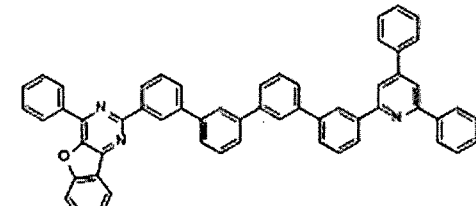


[H-15]

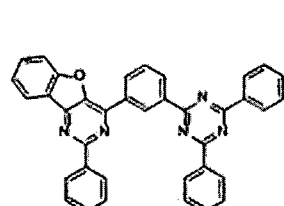


10

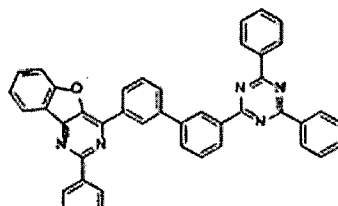
[H-16]



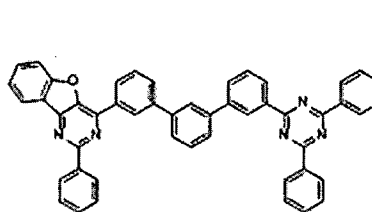
[H-17]



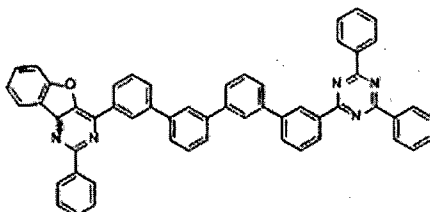
[H-18]



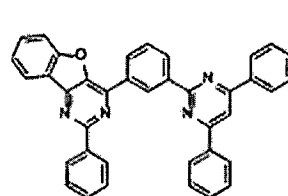
[H-19]



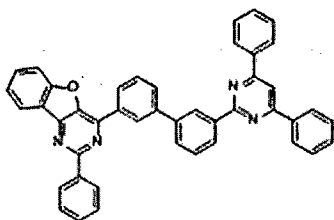
[H-20]



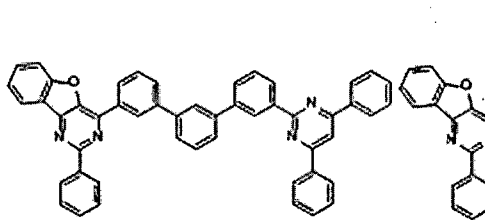
[H-21]



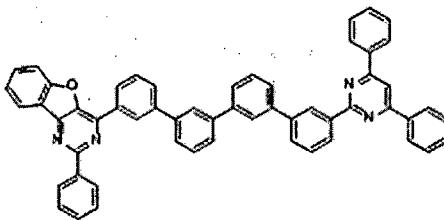
[H-22]



[H-23]

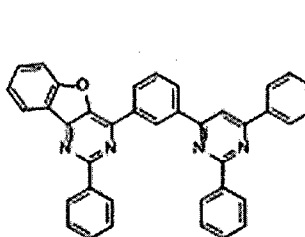


[H-24]

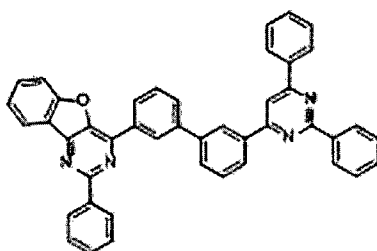


5

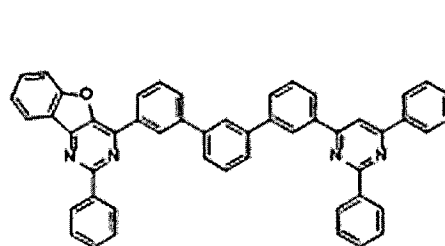
[H-25]



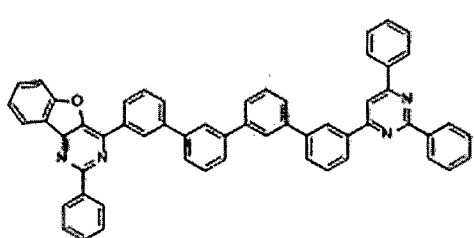
[H-26]



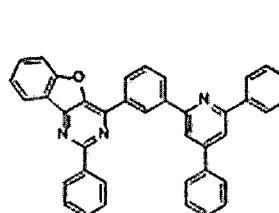
[H-27]



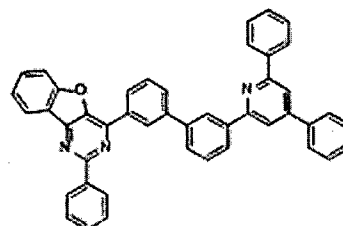
[H-28]



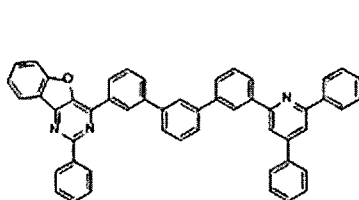
[H-29]



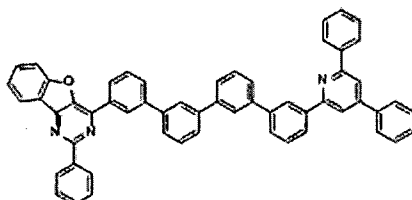
[H-30]



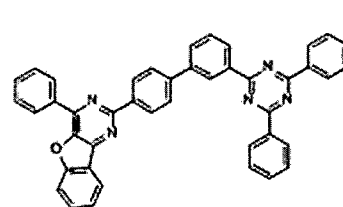
[H-31]



[H-32]

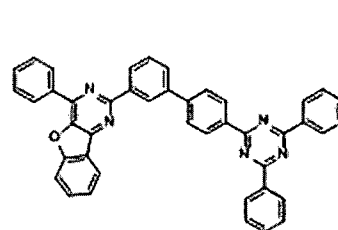


[H-33]

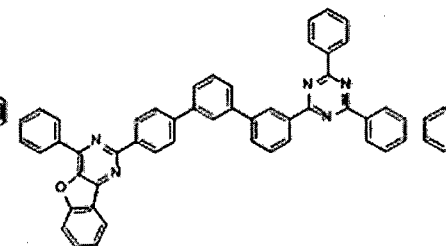


10

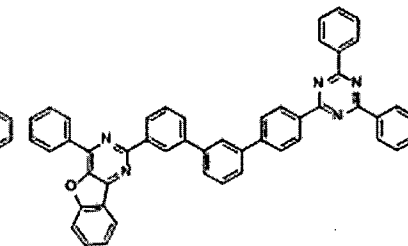
[H-34]



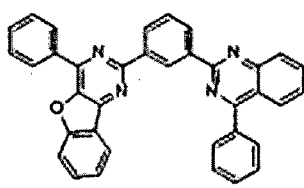
[H-35]



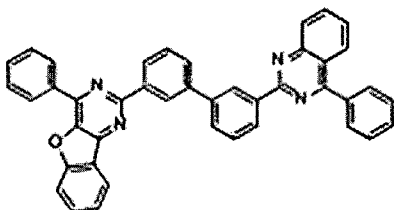
[H-36]



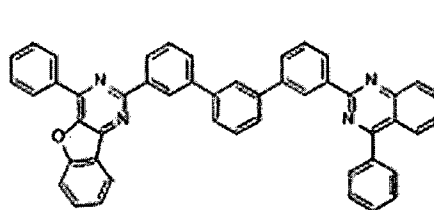
[H-37]



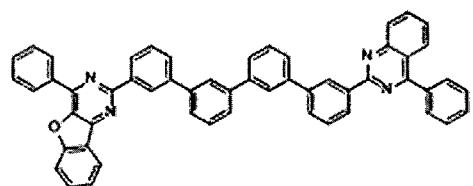
[H-38]



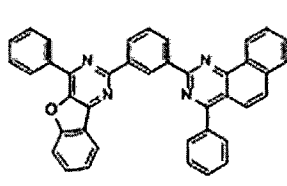
[H-39]



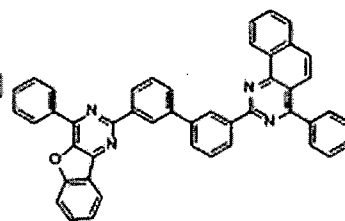
[H-40]



[H-41]

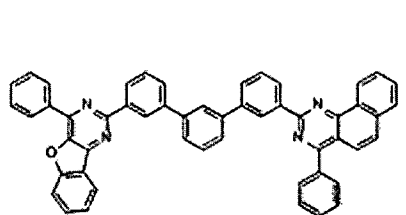


[H-42]

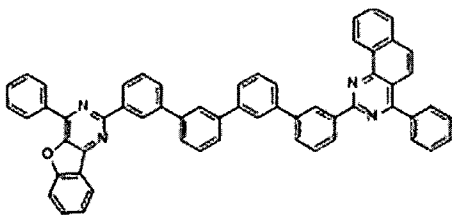


5

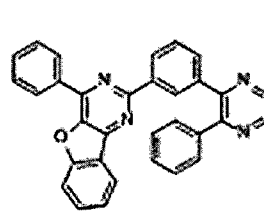
[H-43]



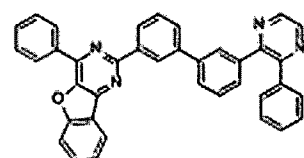
[H-44]



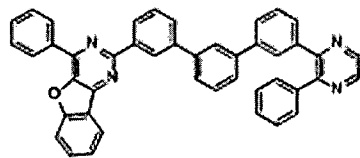
[H-45]



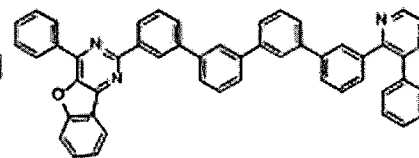
[H-46]



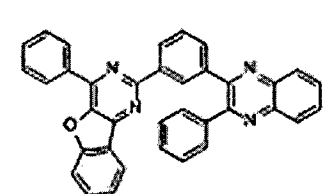
[H-47]



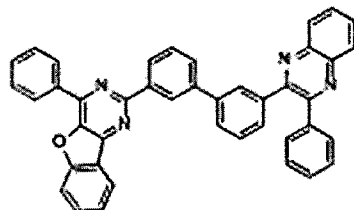
[H-48]



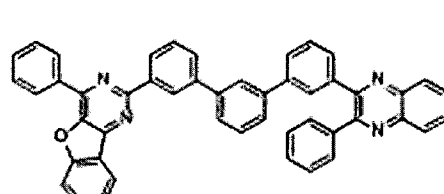
[H-49]



[H-50]

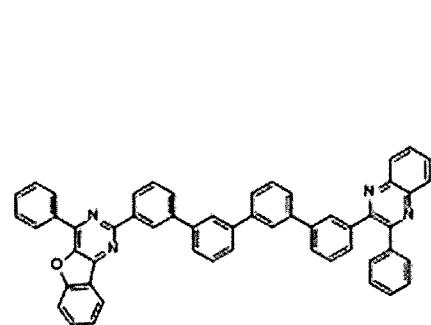


[H-51]

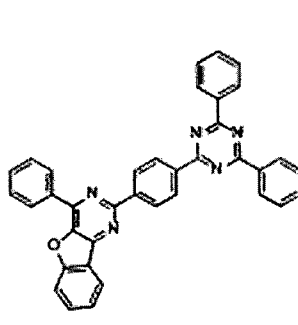


10

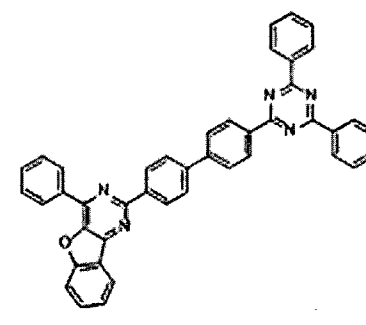
[H-52]



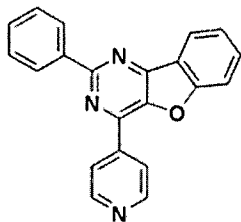
[H-53]



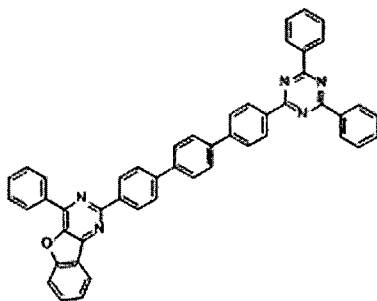
[H-54]



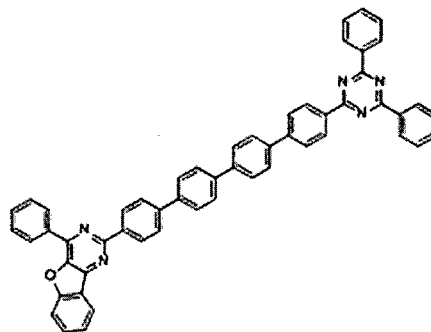
[H-55]



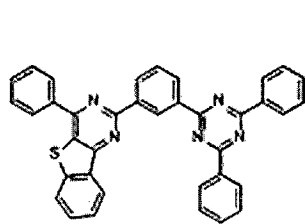
[H-56]



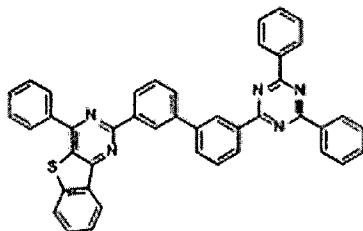
[H-57]



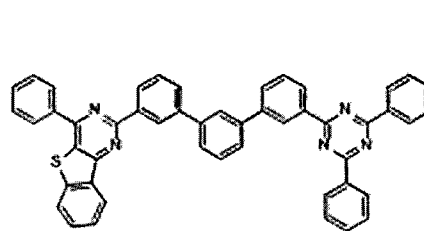
[H-58]



[H-59]

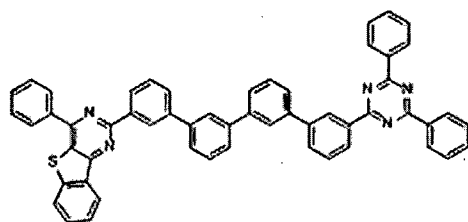


[H-60]

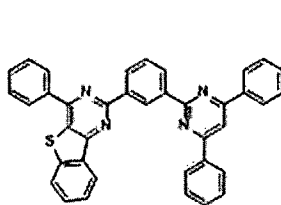


5

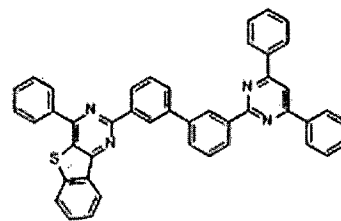
[H-61]



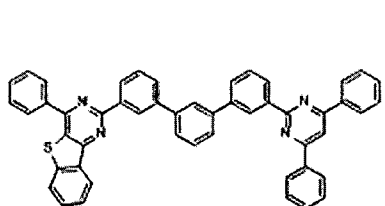
[H-62]



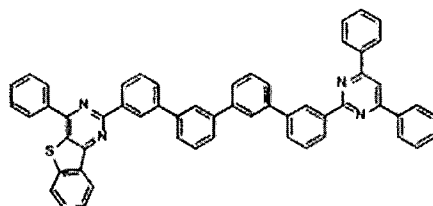
[H-63]



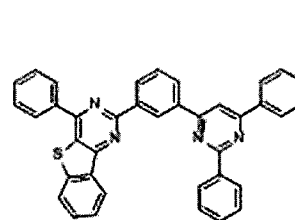
[H-64]



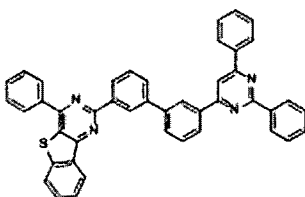
[H-65]



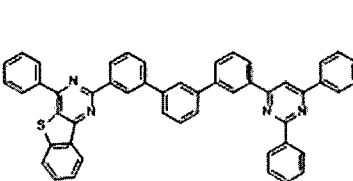
[H-66]



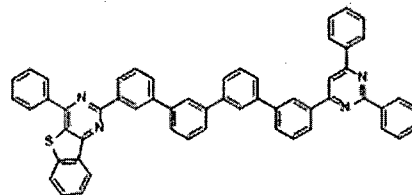
[H-67]



[H-68]

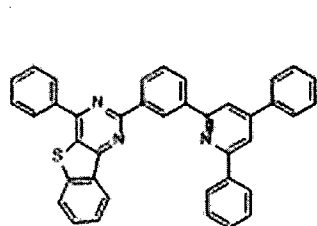


[H-69]

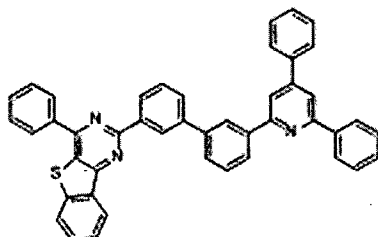


10

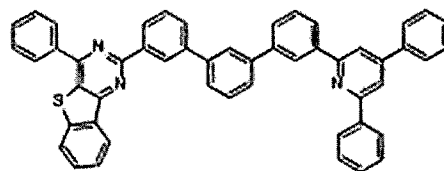
[H-70]



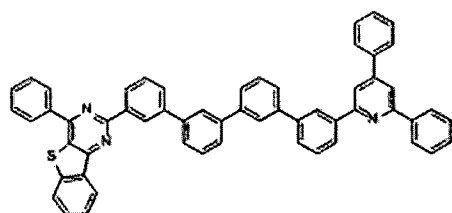
[H-71]



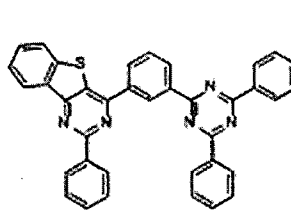
[H-72]



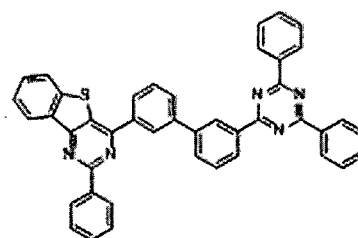
[H-73]



[H-74]

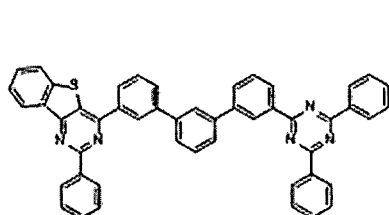


[H-75]

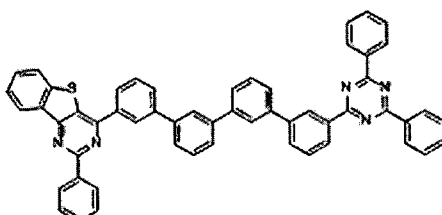


5

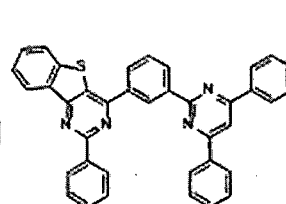
[H-76]



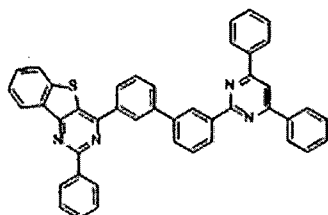
[H-77]



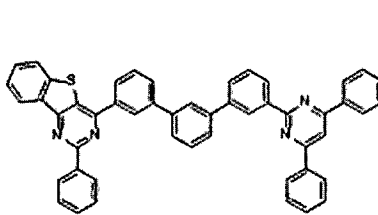
[H-78]



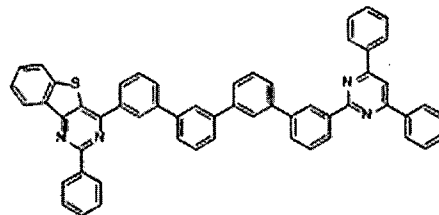
[H-79]



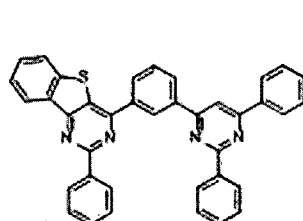
[H-80]



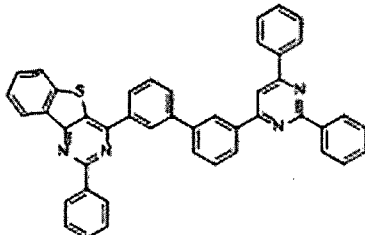
[H-81]



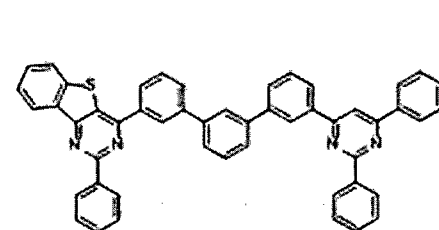
[H-82]



[H-83]

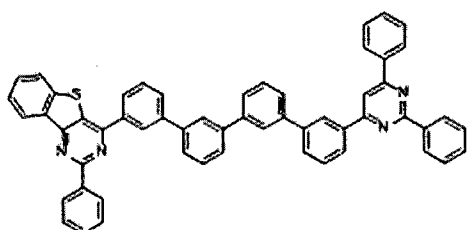


[H-84]

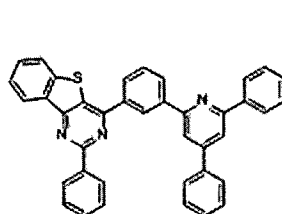


10

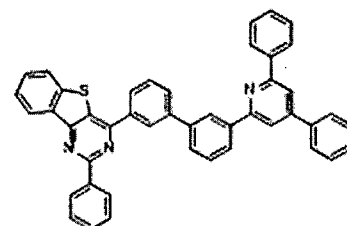
[H-85]



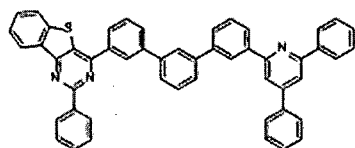
[H-86]



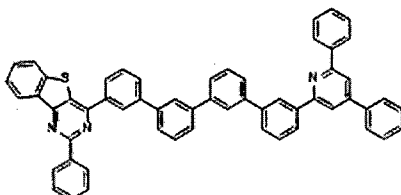
[H-87]



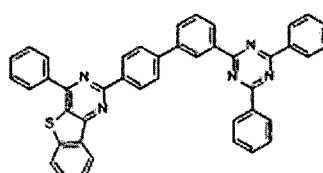
[H-88]



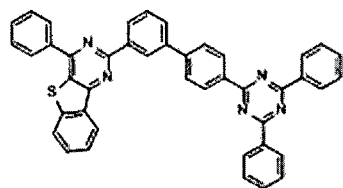
[H-89]



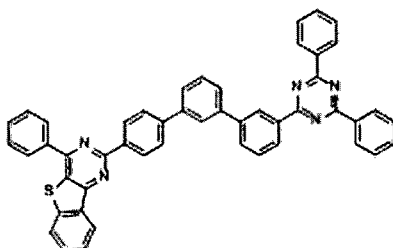
[H-90]



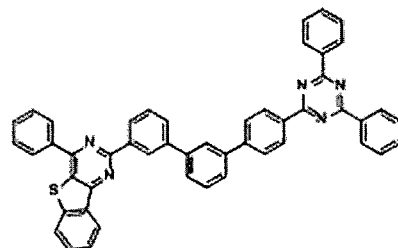
[H-91]



[H-92]

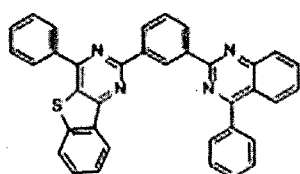


[H-93]

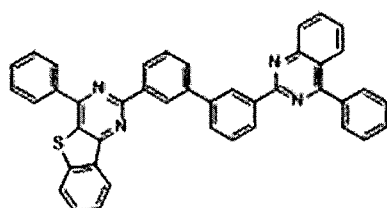


5

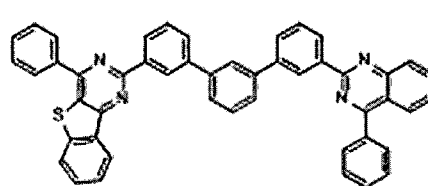
[H-94]



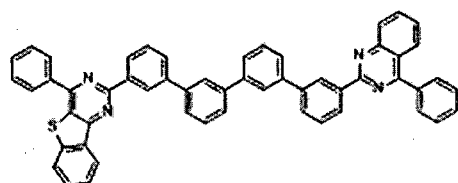
[H-95]



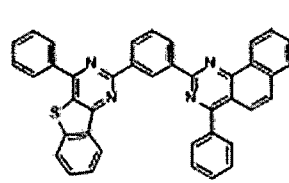
[H-96]



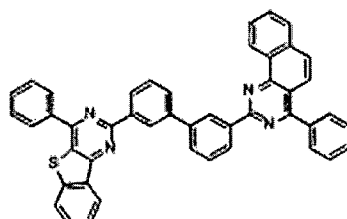
[H-97]



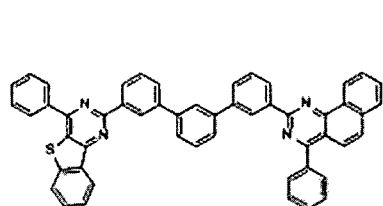
[H-98]



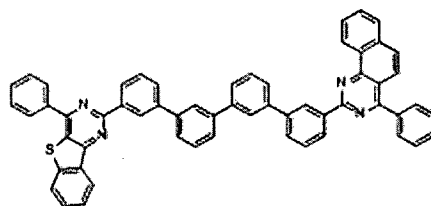
[H-99]



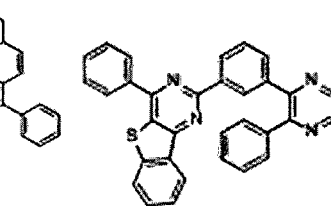
[H-100]



[H-101]

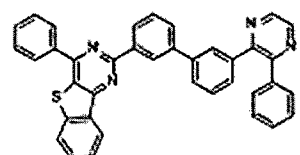


[H-102]

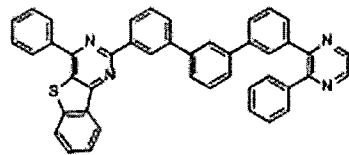


10

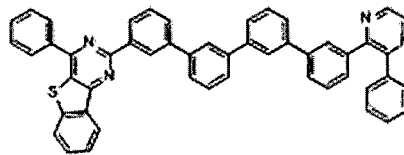
[H-103]



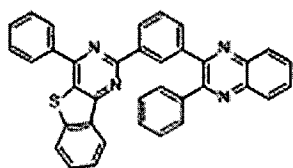
[H-104]



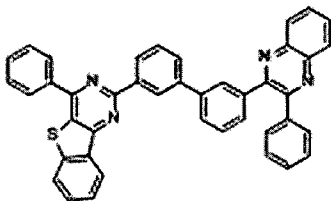
[H-105]



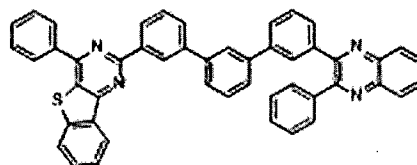
[H-106]



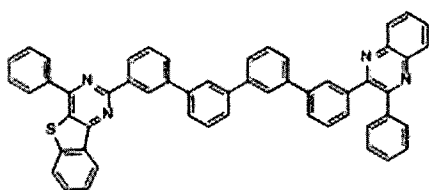
[H-107]



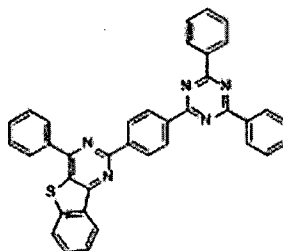
[H-108]



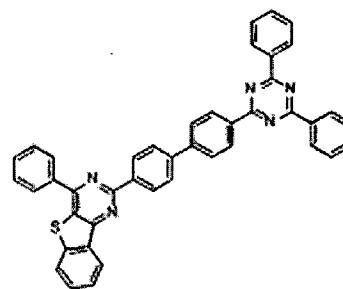
[H-109]



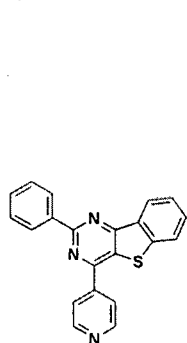
[H-110]



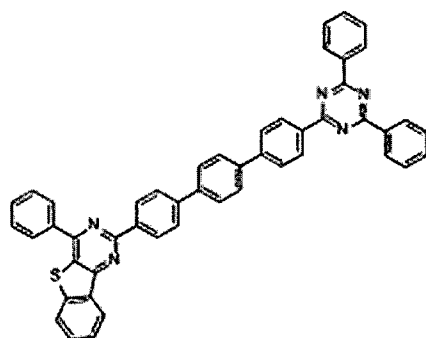
[H-111]



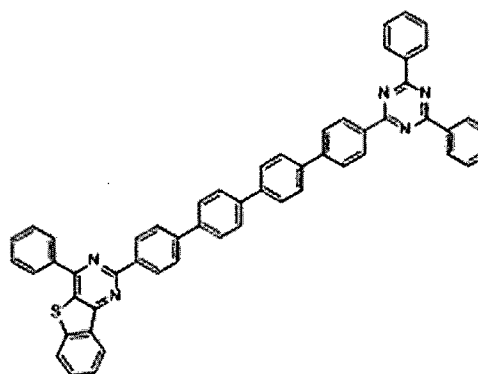
5 [H-112]



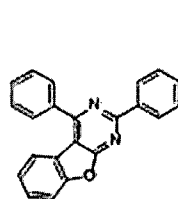
[H-113]



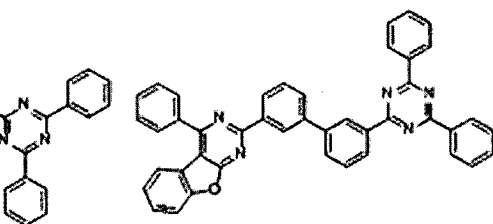
[H-114]



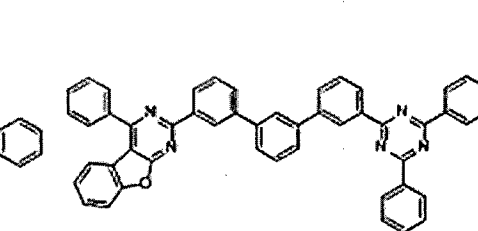
[H-115]



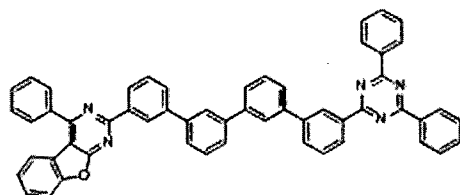
[H-116]



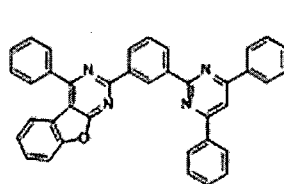
[H-117]



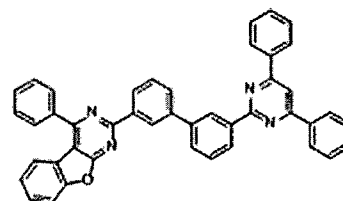
[H-118]



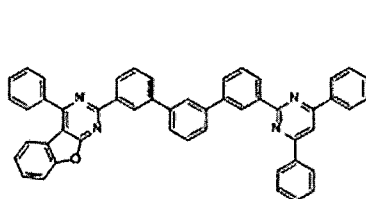
[H-119]



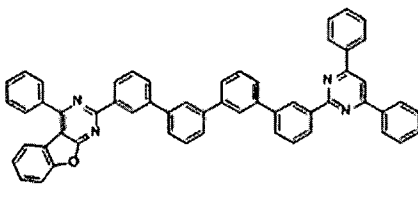
[H-120]



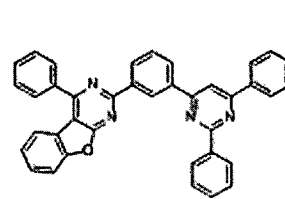
[H-121]



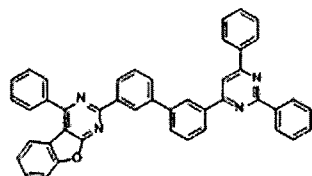
[H-122]



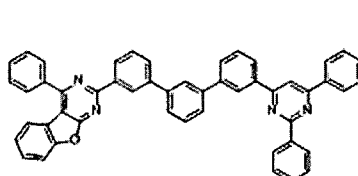
[H-123]



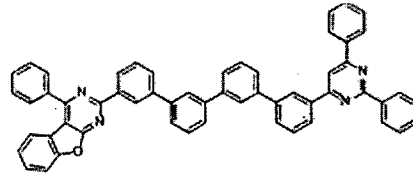
[H-124]



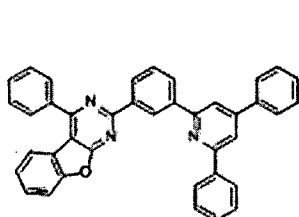
[H-125]



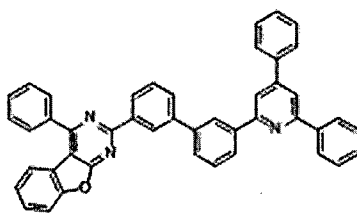
[H-126]



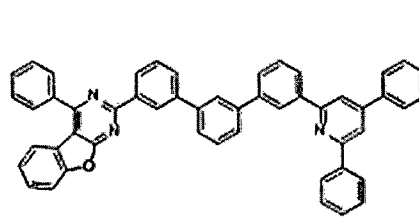
5 [H-127]



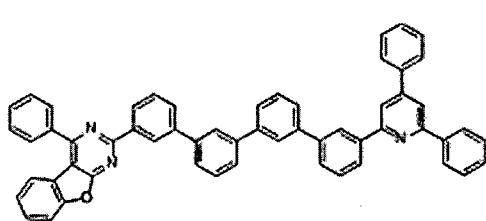
[H-128]



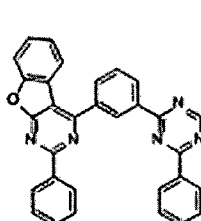
[H-129]



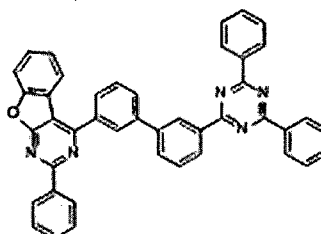
[H-130]



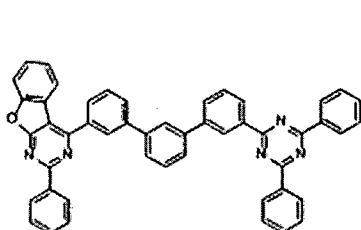
[H-131]



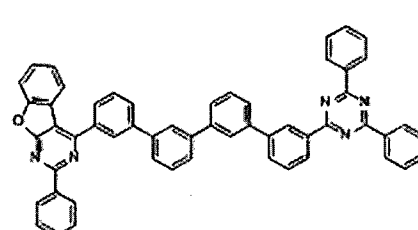
[H-132]



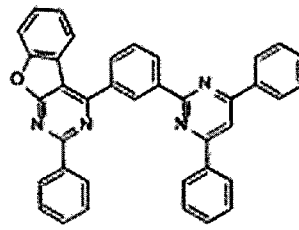
[H-133]



[H-134]

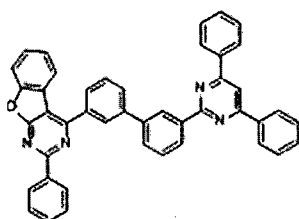


[H-135]

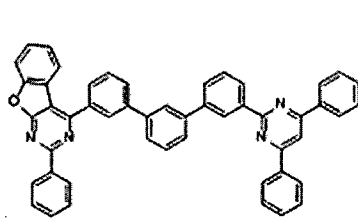


10

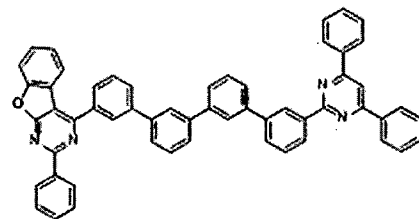
[H-136]



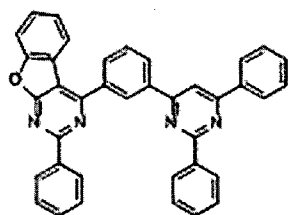
[H-137]



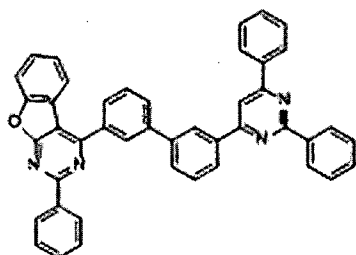
[H-138]



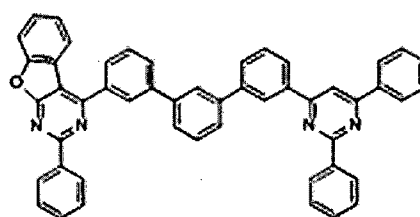
[H-139]



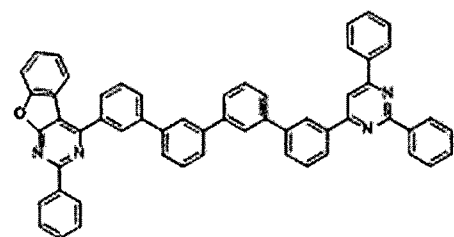
[H-140]



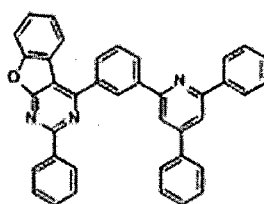
[H-141]



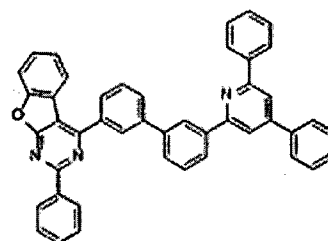
[H-142]



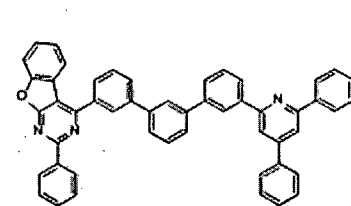
[H-143]



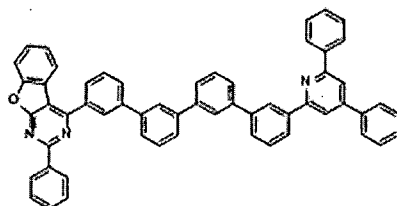
[H-144]



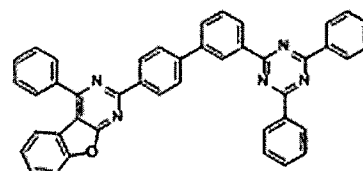
5 [H-145]



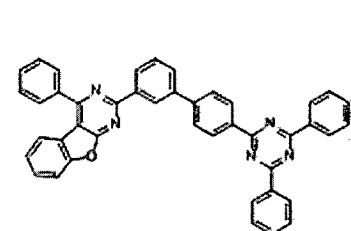
[H-146]



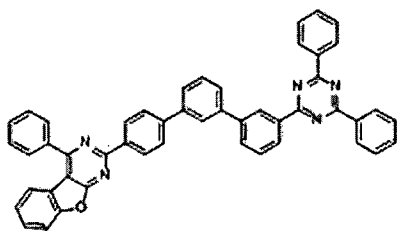
[H-147]



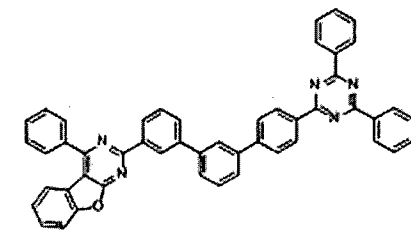
[H-148]



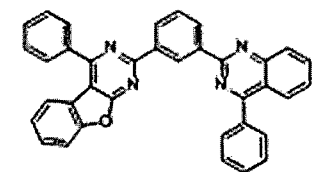
[H-149]



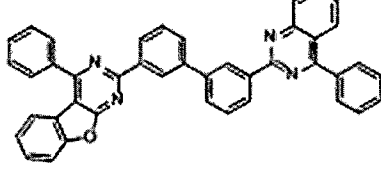
[H-150]



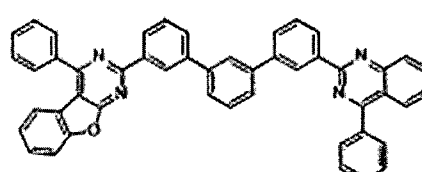
[H-151]



[H-152]

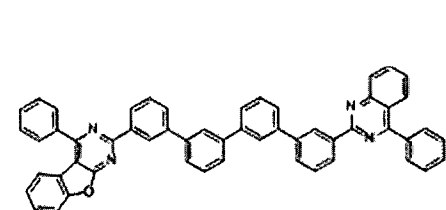


[H-153]

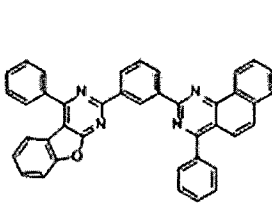


10

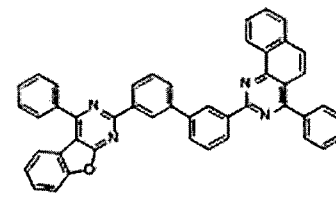
[H-154]



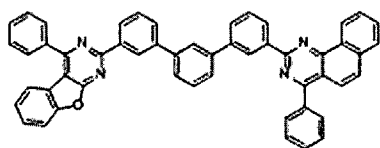
[H-155]



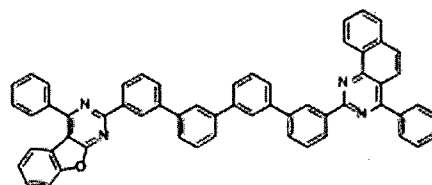
[H-156]



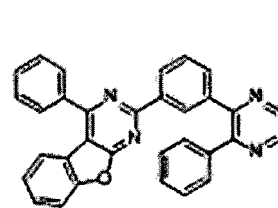
[H-157]



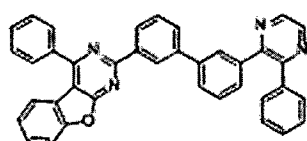
[H-158]



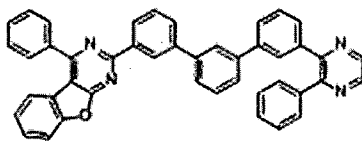
[H-159]



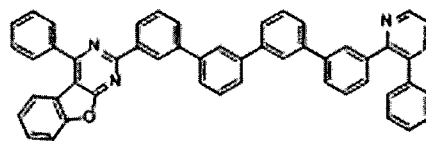
[H-160]



[H-161]

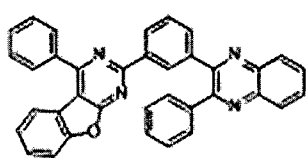


[H-162]

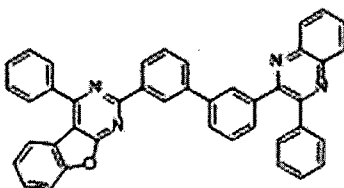


5

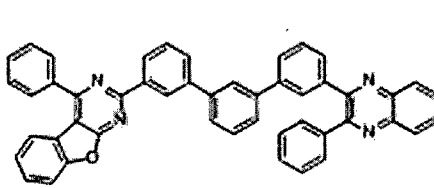
[H-163]



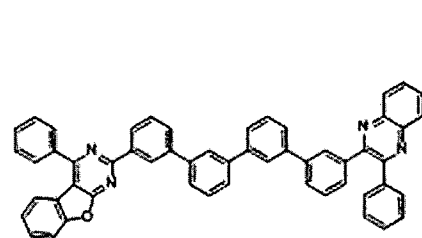
[H-164]



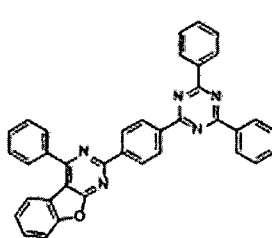
[H-165]



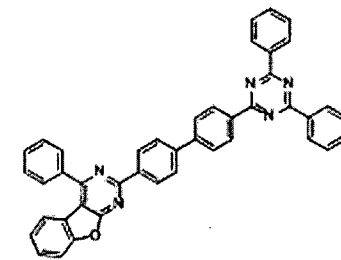
[H-166]



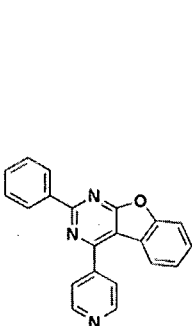
[H-167]



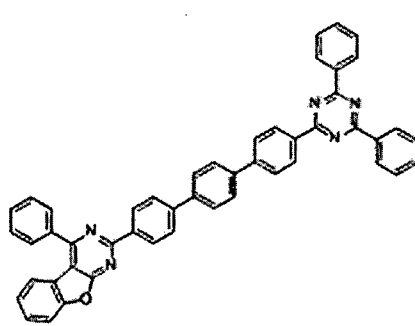
[H-168]



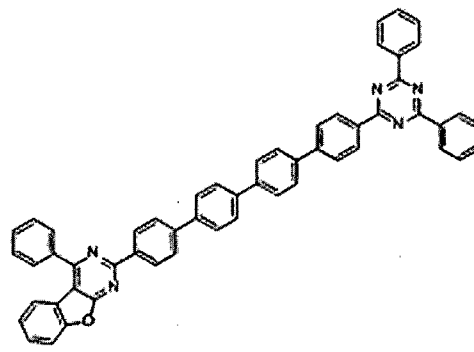
[H-169]



[H-170]

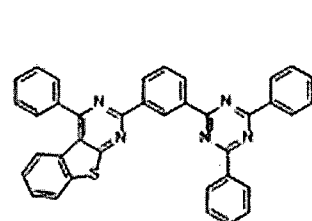


[H-171]

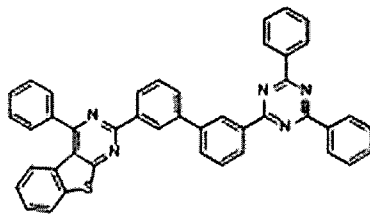


10

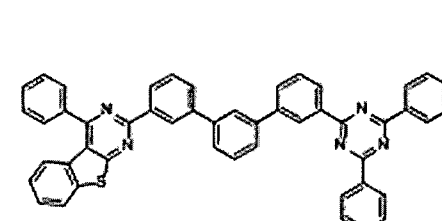
[H-172]



[H-173]



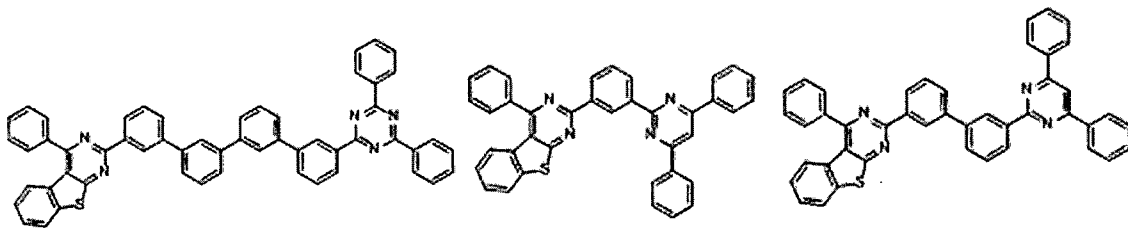
[H-174]



[H-175]

[H-176]

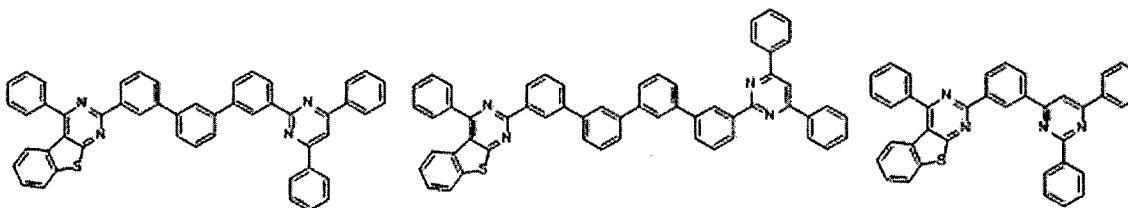
[H-177]



[H-178]

[H-179]

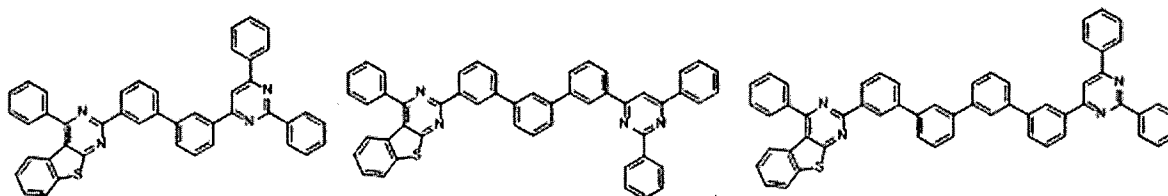
[H-180]



5 [H-181]

[H-182]

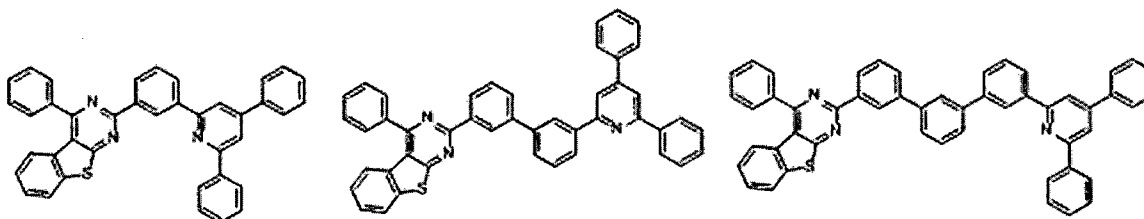
[H-183]



[H-184]

[H-185]

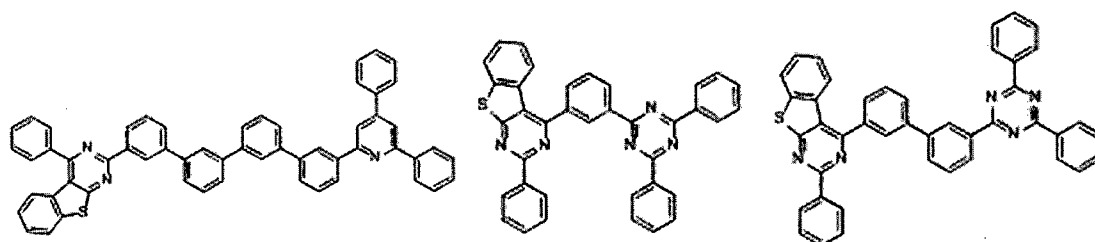
[H-186]



[H-187]

[H-188]

[H-189]

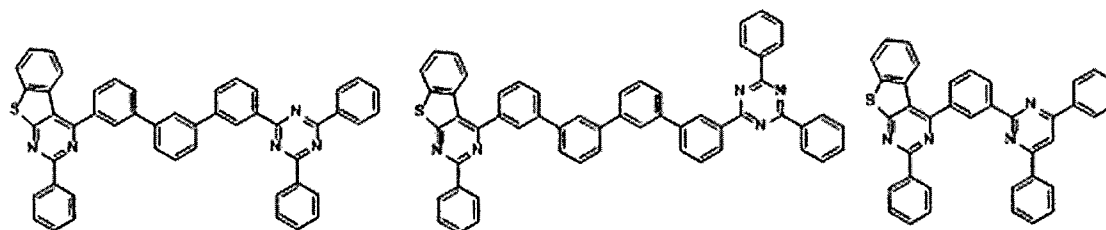


10

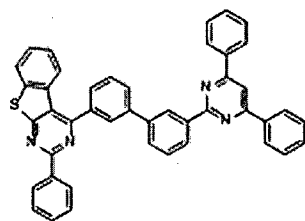
[H-190]

[H-191]

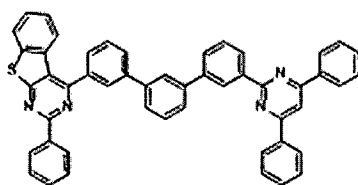
[H-192]



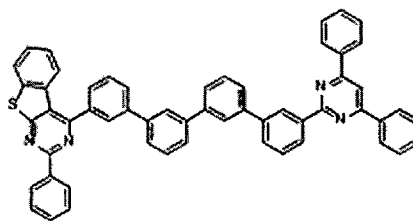
[H-193]



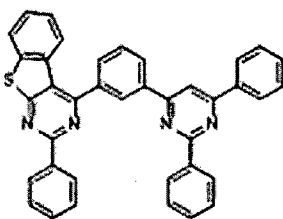
[H-194]



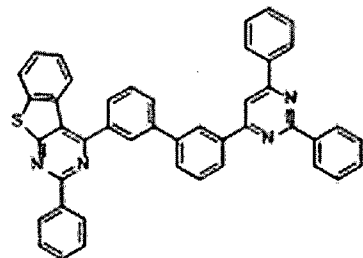
[H-195]



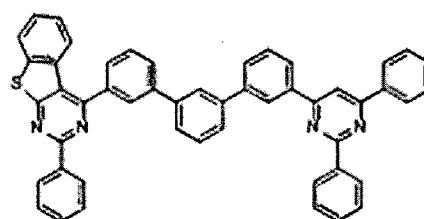
[H-196]



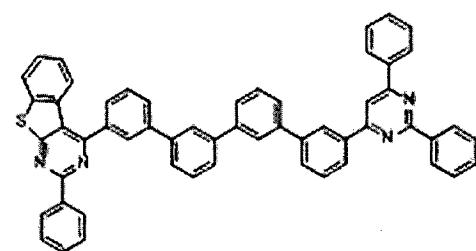
[H-197]



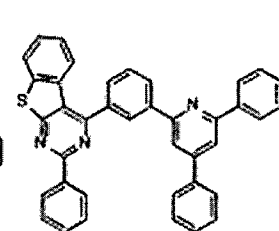
[H-198]



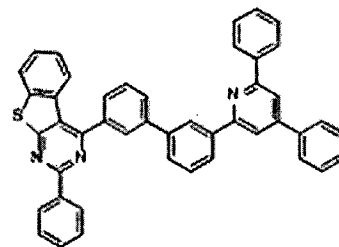
5 [H-199]



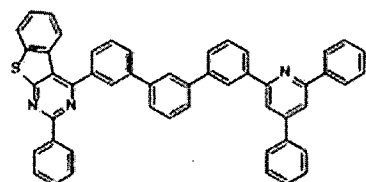
[H-200]



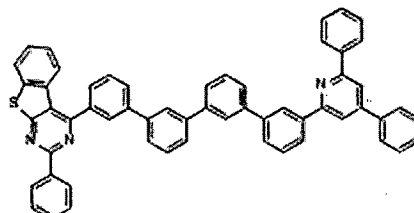
[H-201]



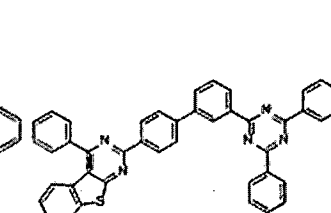
[H-202]



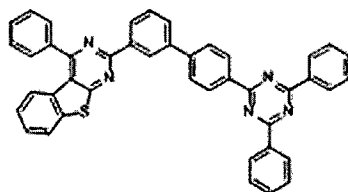
[H-203]



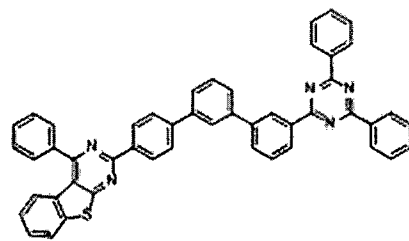
[H-204]



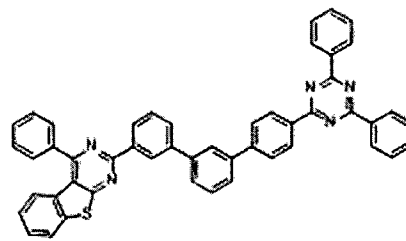
[H-205]



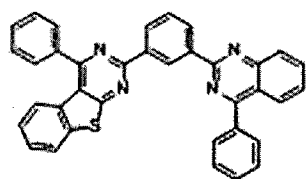
[H-206]



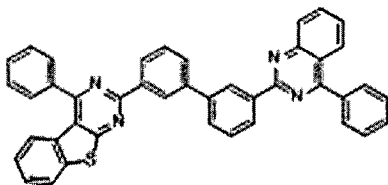
[H-207]



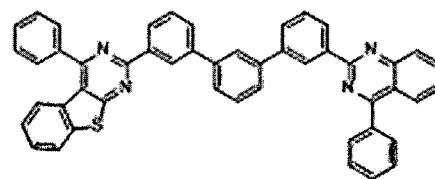
[H-208]



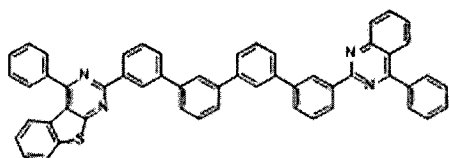
[H-209]



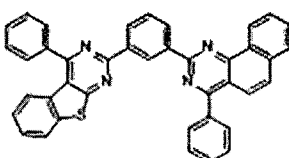
[H-210]



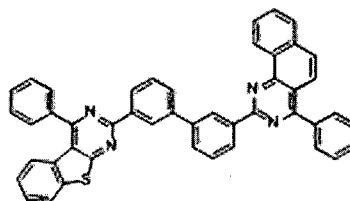
[H-211]



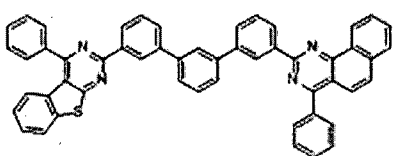
[H-212]



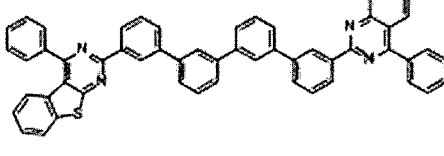
[H-213]



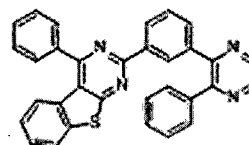
5 [H-214]



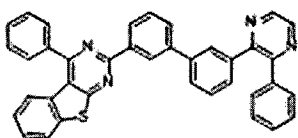
[H-215]



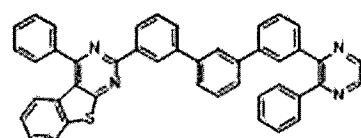
[H-216]



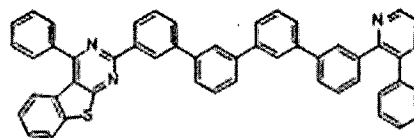
[H-217]



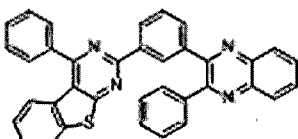
[H-218]



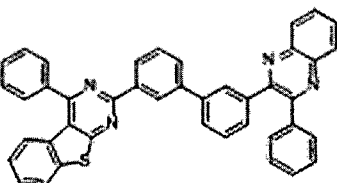
[H-219]



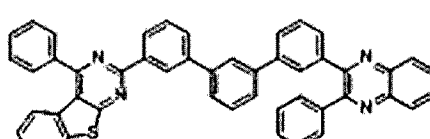
[H-220]



[H-221]

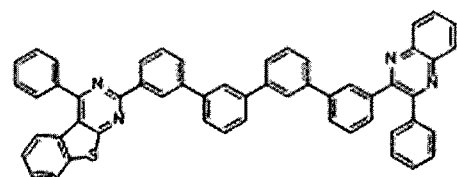


[H-222]

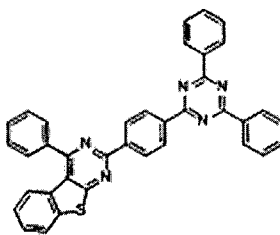


10

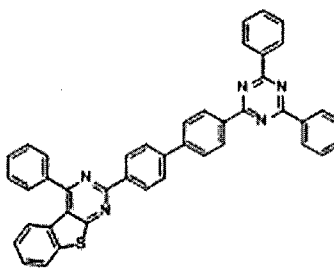
[H-223]



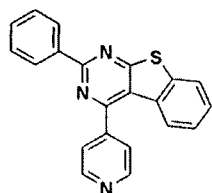
[H-224]



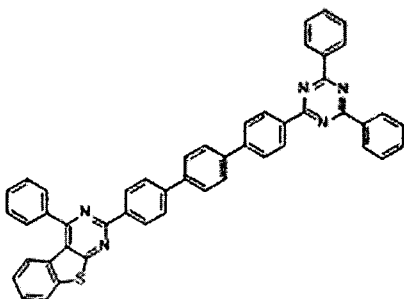
[H-225]



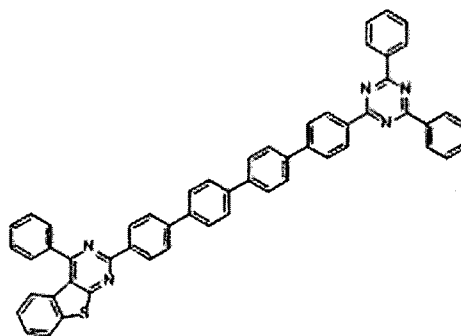
[H-226]



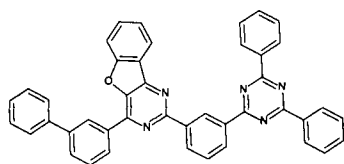
[H-227]



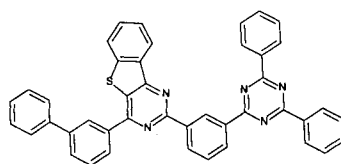
[H-228]



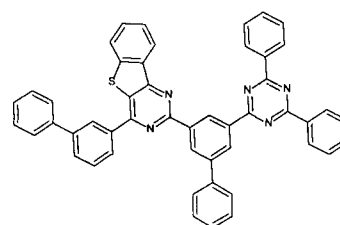
[H-229]



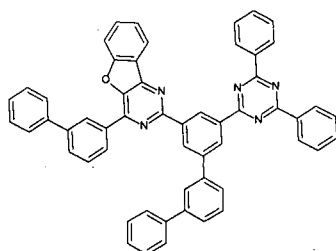
[H-230]



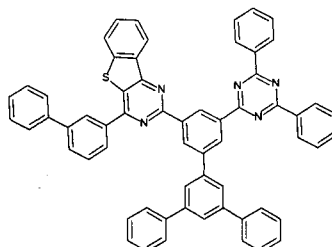
[H-231]



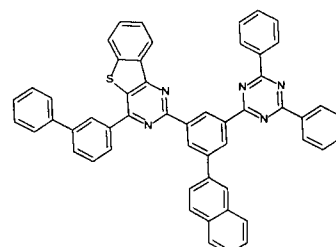
5 [H-232]



[H-233]



[H-234]



본 발명의 일 구현예에 따른 유기 광전자 소자용 조성물은 전자 특성이 상대적으로 강한 바이폴라 특성을 가지는 제1 화합물, 정공 특성이 상대적으로 강한 바이폴라 특성을 가지는 제2 화합물, 그리고 전자 주입 및 전자 수송 능력이 우수한 제3 화합물을 모두 발광층에 포함함으로써, 구동 전압을 획기적으로 낮추면서도 효율 및 수명이 우수한 유기 광전자 소자를 구현할 수 있다.

특히, 상기 제3 화합물을 더욱 포함함으로써, 도펀트와 호스트 간 트랩 현상을 감소시키거나 최소화하여 구동 전압을 낮추는 효과를 얻을 수 있다.

본 발명의 일 구현예에 따르면, 발광층(32)에는 상기 제1 화합물, 상기 제2 화합물, 및 상기 제3 화합물이 동시에 호스트로서 포함될 수 있으며,

상기 제1 화합물은 구체적으로 상기 화학식 1-I 또는 화학식 1-III로 표현될 수 있고, 상기 제2 화합물은 상기 화학식 2-I로 표현될 수 있으며, 상기

제3 화합물은 상기 화학식 5-I 또는 화학식 5-II로 표현될 수 있다.

더욱 구체적으로, 제1 화합물은 상기 화학식 1-IB 또는 1-III-A로 표현될 수 있고, 상기 화학식 1-IB의 더욱 구체적인 예로서 상기 화학식 1-I-3b로 표현될 수 있다.

- 5 또한, 제3 화합물은 상기 화학식 화학식 5-I-b, 화학식 5-I-d, 또는 화학식 5-II-k로 표현될 수 있다.

본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 제1 화합물은 예컨대 상기 화학식 1-I-c, 또는 화학식 1-III-a로 표현될 수 있고, 상기 화학식 1-I-c은 화학식 1-I-j로 표현될 수 있으며, 상기 화학식 1-III-a은 더욱 구체적으로 1-III-
10 g로 표현될 수 있다.

상기 제1 화합물 및 제2 화합물의 조성물과 제3 화합물은 예컨대 90:10 내지 10:90의 중량비로 포함될 수 있으며, 구체적으로 90:10 내지 10:90, 85:15 내지 15:85, 80:20 내지 20:80, 70:30 내지 30:70, 60:40 내지 40:60, 50:50의 중량비로 포함될 수 있다. 바람직하게는, 상기 제1 화합물 및 제2 화합물의 조성물과 제3
15 화합물은 90:10, 85:15, 80:20 또는 70:30의 중량비로 포함될 수 있다.

상기 범위로 포함됨으로써 바이폴라 특성이 더욱 효과적으로 구현되어 효율과 수명을 동시에 개선할 수 있을 뿐만 아니라, 구동 전압을 획기적으로 낮출 수 있다.

한편, 상기 제1 화합물과 제2 화합물은 예컨대 약 1:10 내지 10:1의
20 중량비로 포함될 수 있고, 구체적으로 2:8 내지 8:2, 3:7 내지 7:3, 4:6 내지 6:4, 그리고 5:5의 중량비로 포함될 수 있다. 바람직하게는, 상기 제1 화합물과 제2 화합물은 3:7, 4:6 또는 5:5의 중량비로 포함될 수 있다.

발광층(32)은 호스트로서 전술한 제1 화합물과 제2 화합물 외에 1종 이상의 화합물을 더 포함할 수 있다.

25 발광층(32)은 도펀트를 더 포함할 수 있다. 상기 도펀트는 상기 호스트에 미량 혼합되어 발광을 일으키는 물질로, 일반적으로 삼중항 상태 이상으로 여기시키는 다중항 여기(multiple excitation)에 의해 발광하는 금속 착체(metal complex)와 같은 물질이 사용될 수 있다. 상기 도펀트는 예컨대 무기, 유기, 유기금속 화합물일 수 있으며, 1종 또는 2종 이상 포함될 수 있다.

30 상기 도펀트는 적색, 녹색 또는 청색의 도펀트일 수 있으며, 예컨대 인광

도펀트일 수 있다. 상기 인광 도펀트의 예로는 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb, Tm, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd 또는 이들의 조합을 포함하는 유기 금속화합물을 들 수 있다. 상기 인광 도펀트는 예컨대 하기 화학식 Z로 표현되는 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

5 [화학식 Z]



상기 화학식 Z에서, M은 금속이고, L 및 X는 서로 같거나 다르며 M과 착화합물을 형성하는 리간드이다.

상기 M은 예컨대 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb, Tm, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd 또는
10 이들의 조합일 수 있고, 상기 L 및 X는 예컨대 바이덴테이트 리간드일 수 있다.

상기 조성물은 유기 광전자 소자의 유기층에 적용될 수 있으며, 일 예로 상기 조성물은 발광층에 적용될 수 있다. 예컨대 발광층의 호스트로서 적용될 수 있다.

상기 조성물은 건식 성막법 또는 용액 공정으로 형성될 수 있다. 상기
15 건식 성막법은 예컨대 화학기상증착법, 스퍼터링, 플라즈마 도금 및 이온도금 일 수 있고, 둘 이상의 화합물을 동시에 성막하거나 증착 온도가 같은 화합물을 혼합하여 같이 성막할 수 있다. 상기 용액 공정은 예컨대 잉크젯 인쇄법, 스핀 코팅, 슬릿 코팅, 바 코팅 및/또는 딥 코팅일 수 있다.

이하 상술한 조성물을 적용한 유기 광전자 소자를 설명한다.

20 상기 유기 광전자 소자는 전기 에너지와 광 에너지를 상호 전환할 수 있는 소자이면 특별히 한정되지 않으며, 유기발광소자, 유기광전소자, 유기태양전지, 유기트랜지스터, 유기 감광체 드럼 및 유기메모리소자로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나일 수 있다.

상기 유기 광전자 소자는 서로 마주하는 애노드와 캐소드, 그리고 상기
25 애노드와 상기 캐소드 사이에 위치하는 적어도 1층의 유기층을 포함할 수 있고, 상기 유기층은 전술한 조성물을 포함할 수 있다.

여기서는 유기 광전자 소자의 일 예인 유기 발광 소자를 도면을 참고하여 설명한다.

도 1은 일 구현예에 따른 유기 발광 소자를 보여주는 단면도이다.

30 도 1을 참고하면, 일 구현예에 따른 유기 발광 소자(100)는 서로 마주하는

애노드(110)와 캐소드(120), 그리고 애노드(110)와 캐소드(120) 사이에 위치하는 유기층(105)을 포함한다.

애노드(110)는 예컨대 정공 주입이 원활하도록 일 함수가 높은 도전체로 만들어질 수 있으며, 예컨대 금속, 금속 산화물 및/또는 도전성 고분자로 만들어질 수 있다. 캐소드(120)는 예컨대 니켈, 백금, 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO와 Al 또는 SnO₂와 Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리(3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜)(polyethylenedioxythiophene: PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 도전성 고분자 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

캐소드(120)는 예컨대 전자 주입이 원활하도록 일 함수가 낮은 도전체로 만들어질 수 있으며, 예컨대 금속, 금속 산화물 및/또는 도전성 고분자로 만들어질 수 있다. 애노드(110)는 예컨대 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 납, 세슘, 바륨 등과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al, LiO₂/Al, LiF/Ca, LiF/Al 및 BaF₂/Ca와 같은 다층 구조 물질을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

유기층(105)은 전술한 조성물을 포함하는 발광층(130)을 포함한다.

도 2는 다른 구현예에 따른 유기 발광 소자를 보여주는 단면도이다.

도 2를 참고하면, 본 구현예에 따른 유기 발광 소자(200)는 전술한 구현예와 마찬가지로 서로 마주하는 애노드(110)와 캐소드(120), 그리고 애노드(110)와 캐소드(120) 사이에 위치하는 유기층(105)을 포함한다.

유기층(105)은 발광층(130) 및 발광층(130)과 캐소드(120) 사이에 위치하는 보조층(140)을 포함한다. 보조층(140)은 캐소드(120)와 발광층(130) 사이의 전자 주입 및 이동을 용이하게 할 수 있다. 보조층(140)은 예컨대 전자수송층, 전자주입층 및/또는 전자수송보조층일 수 있다.

도 1 및 도 2에서 유기층(105)으로서 추가로 애노드(110)와 발광층(130) 사이에 위치하는 적어도 1층의 보조층을 더 포함할 수 있다.

상술한 유기 발광 소자는 유기 발광 표시 장치에 적용될 수 있다.

【발명을 실시를 위한 형태】

이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에

기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.

이하, 본 발명의 합성에 및 실시예에 사용된 출발물질 및 반응물은 특별한 언급이 없는 경우, Sigma-Aldrich社 또는 TCI社에서 구입하였다.

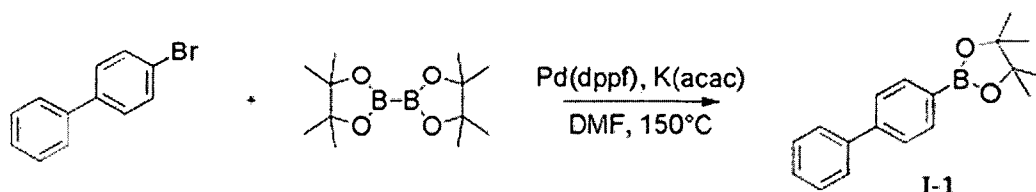
5

제1 화합물의 합성

(중간체의 합성)

중간체 I-1의 합성

[반응식 1]



10

질소 환경에서 4-bromo-1,1'-biphenyl (20g, 86mmol)을 dimethylformamide(DMF) 1L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (26 g, 103 mmol)와 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(Pd(dppf))(0.7 g, 0.86 mmol), 그리고 potassium acetate(K(acac)) (21 g, 215 mmol)을 넣고 150℃에서 5시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 I-1 (20 g, 85 %)을 얻었다.

15

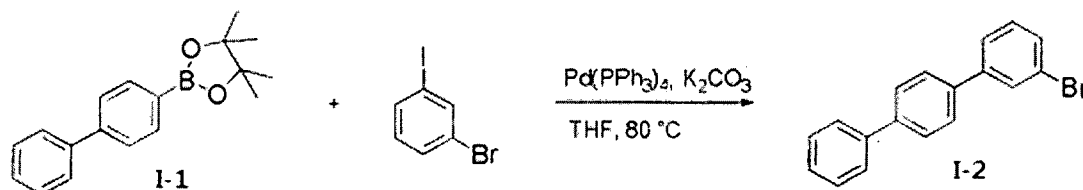
HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₁₈H₂₁BO₂: 280.1635, found: 280

Elemental Analysis: C, 77 %; H, 8 %

20

중간체 I-2의 합성

[반응식 2]

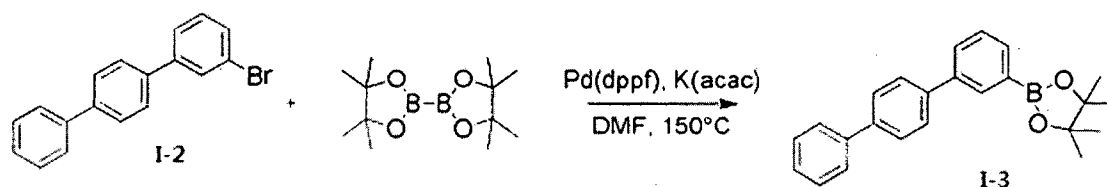


질소 환경에서 중간체 I-1 (20 g, 71 mmol)을 THF 1 L에 녹인 후, 여기에 1-

bromo-3-iodobenzene (24 g, 85 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium ($\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$) (0.8 mg, 0.7 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate (K_2CO_3) (24.5 g, 177 mmol)을 넣고 80 °C에서 12시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO_4 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 I-2 (30 g, 90 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for $\text{C}_{18}\text{H}_{13}\text{Br}$: 309.1998, found 309
Elemental Analysis: C, 70 %; H, 4 %

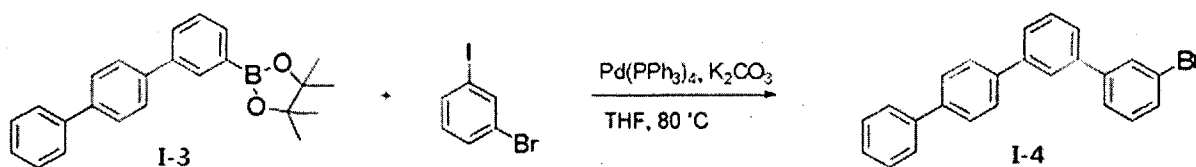
10 중간체 I-3의 합성 [반응식 3]



질소 환경에서 중간체 I-2 (25 g, 81 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 1L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (25 g, 97 mmol)와 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)($\text{Pd}(\text{dppf})$) (0.7 g, 0.81 mmol), 그리고 potassium acetate ($\text{K}(\text{acac})$) (20 g, 203 mmol)을 넣고 150 °C에서 5시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 I-3 (27 g, 93 %)을 얻었다.

20 HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for $\text{C}_{24}\text{H}_{25}\text{BO}_2$: 356.1948, found: 356
Elemental Analysis: C, 81 %; H, 7 %

25 중간체 I-4의 합성 [반응식 4]



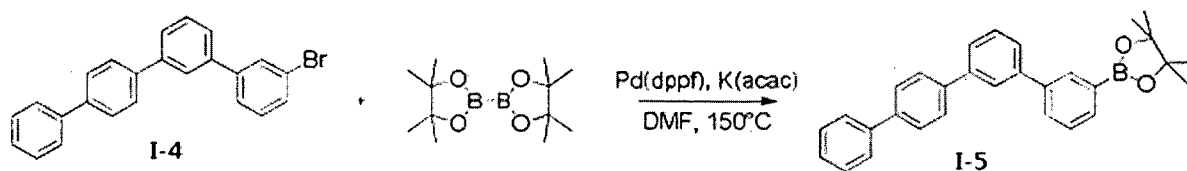
질소 환경에서 중간체 I-3 (50 g, 140 mmol)을 THF 1 L에 녹인 후, 여기에 1-bromo-3-iodobenzene (47 g, 168 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium ($\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$) (1.6 g, 1.4 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate (K_2CO_3) (48 g, 350 mmol)을 넣고 80 °C에서 12시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후
 5 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO_4 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 I-4 (44 g, 89 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for $\text{C}_{24}\text{H}_{17}\text{Br}$: 384.0514, found 384 Elemental Analysis: C, 75 %; H, 4 %

10

중간체 I-5의 합성

[반응식 5]



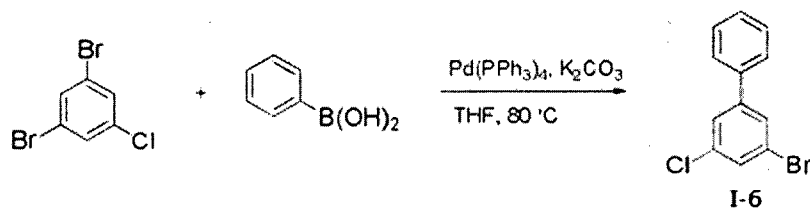
질소 환경에서 중간체 I-4 (20 g, 52 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 1L에 녹인
 15 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (16 g, 62.5 mmol)와 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)($\text{Pd}(\text{dppf})$) (0.4 g, 0.52 mmol) 그리고 potassium acetate ($\text{K}(\text{acac})$) (13 g, 130 mmol)을 넣고 150 °C에서 5시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로
 20 분리 정제하여 중간체 I-5 (19 g, 85 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for $\text{C}_{30}\text{H}_{29}\text{BO}_2$: 432.2261, found: 432

Elemental Analysis: C, 83 %; H, 7 %

중간체 I-6의 합성

[반응식 6]

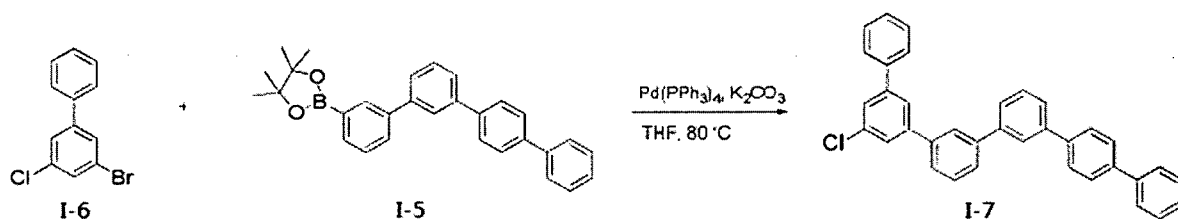


질소 환경에서 1,3-dibromo-5-chlorobenzene (100g, 370 mmol)을 THF 2L에 녹인 후, 여기에 phenylboronic acid (47.3g, 388 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (Pd(PPh₃)₄) (1.5g, 1.36 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate (K₂CO₃) (127g, 925 mmol)을 넣고 80 °C에서 12시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)으로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 I-6 (49g, 50 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₁₂H₈BrCl: 265.9498, found 266 Elemental Analysis: C, 54 %; H, 3 %

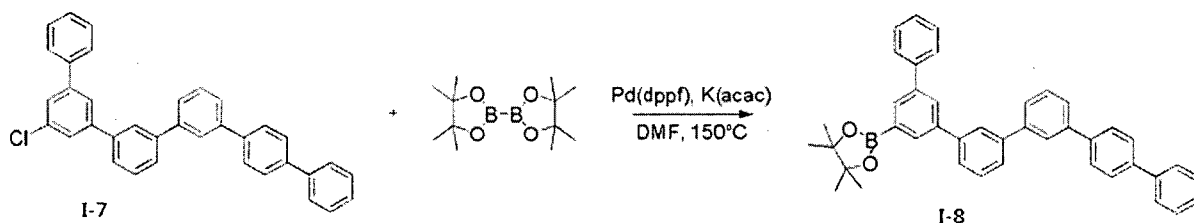
중간체 I-7의 합성

[반응식 7]



질소 환경에서 중간체 I-6 (22.43g, 83.83 mmol)을 THF 500mL에 녹인 후, 여기에 중간체 I-5 (50.7g, 117.36mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (Pd(PPh₃)₄) (2.9g, 2.5mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate (K₂CO₃) (46g, 335.31mmol)을 넣고 80 °C에서 12시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)으로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 I-7 (33g, 81%)을 얻었다.

HRMS (70eV, EI⁺): m/z calcd for C₃₆H₂₅Cl: 492.1645, found 492 Elemental Analysis: C, 88 %; H, 5 %

중간체 I-8의 합성[반응식 8]

5

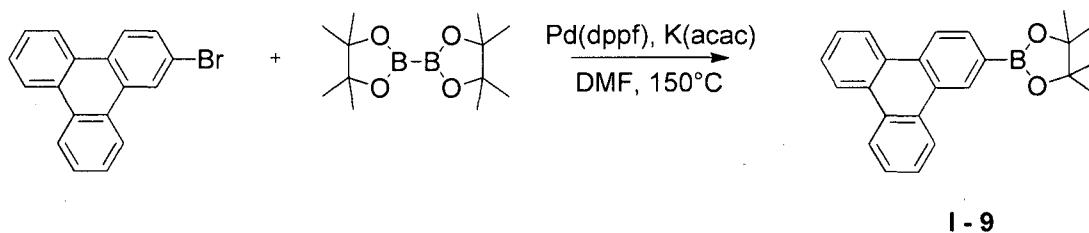
질소 환경에서 중간체 I-7 (42 g, 85.8 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 1L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (26 g, 103 mmol)와 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(Pd(dppf)) (0.7 g, 0.85 mmol) 그리고 potassium acetate (K(acac))(58 g, 595 mmol)을 넣고 150 °C에서 5시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-8 (42 g, 85 %)을 얻었다.

10

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₄₂H₃₇BO₂ : 584.2887, found: 584.

Elemental Analysis: C, 86 %; H, 6 %

15

중간체 I-9의 합성[반응식 9]

20

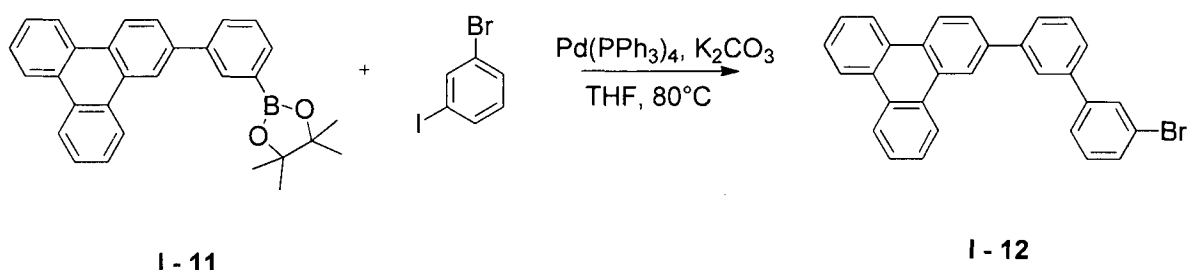
질소 환경에서 2-bromotriphenylene(100 g, 326 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 1L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (99.2 g, 391 mmol)와 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(2.66 g, 3.26 mmol) 그리고 potassium acetate(80 g, 815 mmol)을 넣고 150 °C에서 5시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여

potassium acetate(16.4 g, 167 mmol)을 넣고 150 °C에서 48시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 중간체 I-11(18.6 g, 65 %)을 얻었다.

- 5 HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₃₀H₂₇BO₂: 430.2104, found: 430.
Elemental Analysis: C, 84 %; H, 6 %

중간체 I-12의 합성

[반응식 12]



10

질소 환경에서 상기 중간체 I-11(50 g, 116 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.5 L에 녹인 후, 여기에 1-bromo-3-iodobenzene(39.4 g, 139 mmol)와

tetrakis(triphenylphosphine)palladium(1.34 g, 1.16 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(40.1 g, 290 mmol)을 넣고 80 °C에서 12시간 동안

- 15 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다.

이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 상기 중간체 I-12(42.6 g, 80 %)을 얻었다.

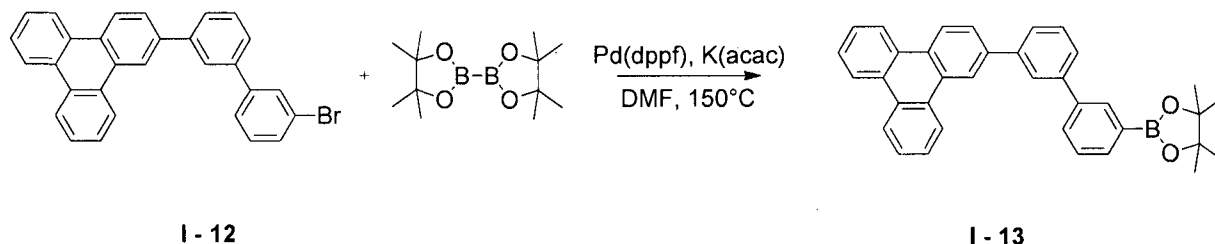
HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₃₀H₁₉Br: 458.0670, found: 458.

20

Elemental Analysis: C, 78 %; H, 4 %

중간체 I-13의 합성

[반응식 13]



질소 환경에서 상기 중간체 I-12(40 g, 87.1 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 0.3 L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (26.5 g, 104 mmol)와 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(0.71 g, 0.87 mmol) 그리고 potassium acetate(21.4 g, 218 mmol)을 넣고 150 °C에서 26시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 flash column chromatography로 분리 정제하여 상기 중간체 I-13(34 g, 77 %)을 얻었다.

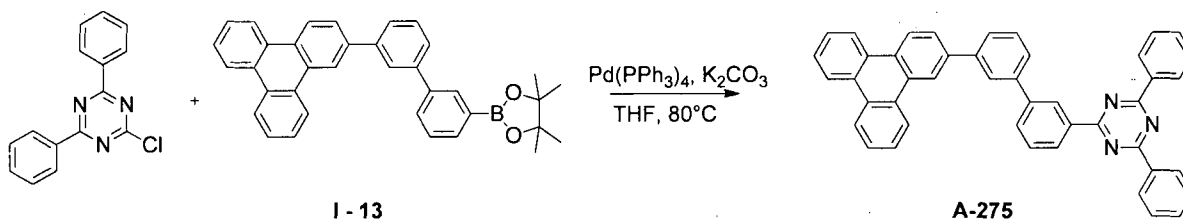
HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₃₆H₃₁BO₂: 506.2417, found: 506.

Elemental Analysis: C, 85 %; H, 6 %

(최종 화합물의 합성)

합성예 1: 화합물 A-275의 합성

[반응식 14]

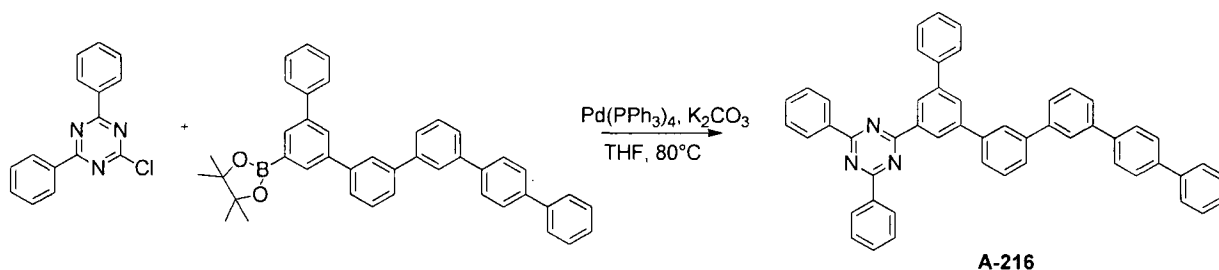


질소 환경에서 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (10.6 g, 39.5 mmol)을 THF 1 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-13 (20 g, 39.5 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (Pd(PPh₃)₄) (0.46 g, 0.4 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate (K₂CO₃)(13.6 g, 98.8 mmol)을 넣고 80 °C에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 A-275(17.9 g, 74 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₄₅H₂₉N₃: 611.2361, found 611 Elemental Analysis: C, 88 %; H, 5 %

합성예 2: 화합물 A-216의 합성

[반응식 15]



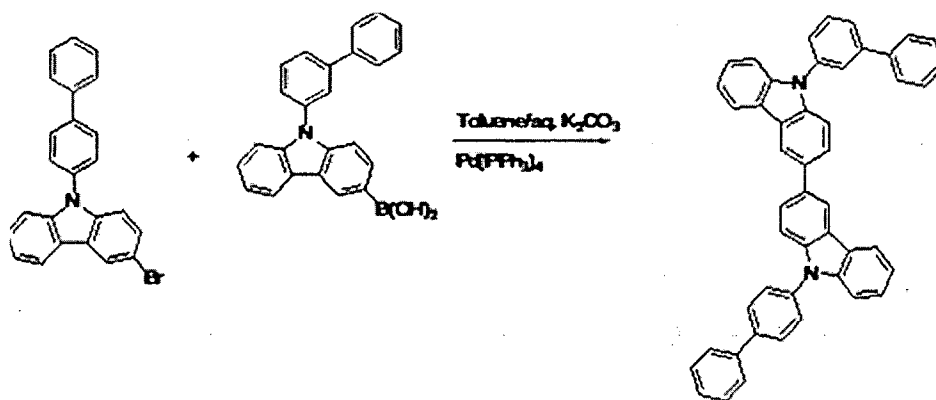
질소 환경에서 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (32 g, 76 mmol)을 THF 1 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-8 (44 g, 76 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (Pd(PPh₃)₄) (0.88 g, 0.76 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate (K₂CO₃) (26 g, 190 mmol)을 넣고 80 °C에서 12시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 A-216(41 g, 80 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₅₁H₃₅N₃: 689.2831, found 689 Elemental Analysis: C, 89 %; H, 5 %

제2 화합물의 합성

합성예 3: 화합물 B-30의 합성

[반응식 16]



질소 환경에서 상기 화합물 9-(4-(4,4'-biphenyl)carbazole)-3-yl bromide (12.33 g,

30.95 mmol)을 Toluene 0.2 L에 녹인 후, 여기에 (9-(3-(4-phenyl)phenyl)carbazole-3-yl boronic acid (12.37 g, 34.05 mmol) 와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(1.07 g, 0.93 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(12.83 g, 92.86 mmol)을 넣고 120 °C에서 12시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을
5 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 B-30 (18.7 g, 92 %)을 얻었다.

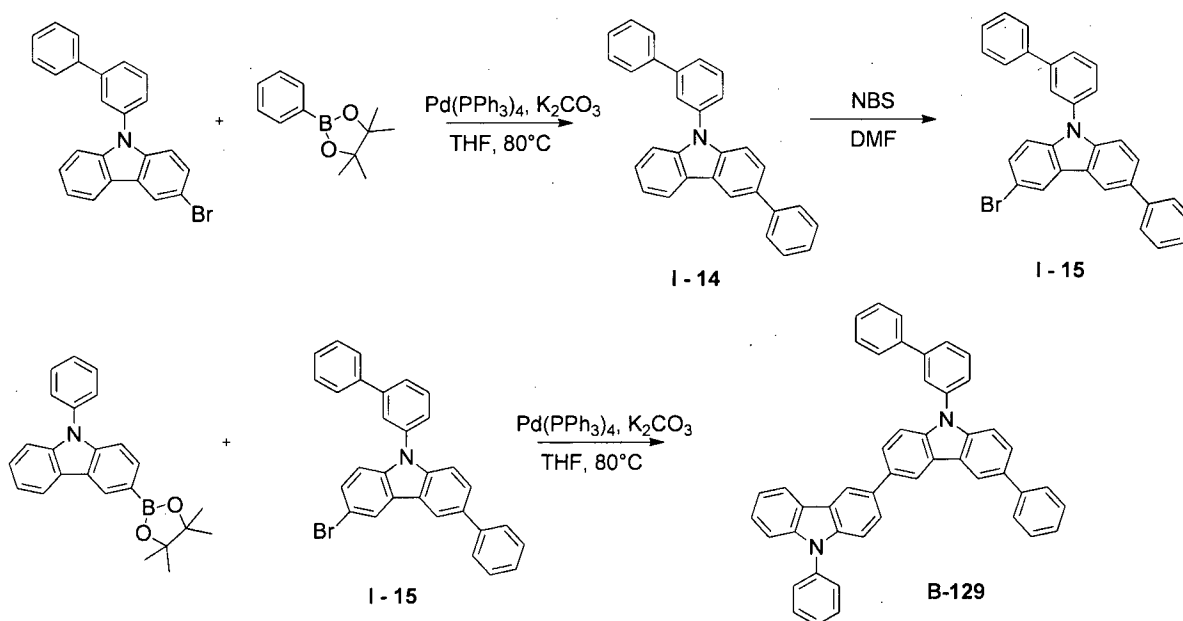
HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₄₈H₃₂N₂: 636.26, found: 636

Elemental Analysis: C, 91 %; H, 5 %

10

합성예 4: 화합물 B-129의 합성

[반응식 17]



15

제 1 단계: 화합물 I-14의 합성

(9-(3-(4-phenyl)phenyl)carbazole-3-yl bromide 43.2g(108.4 mmol)과 4,4,5,5-tetramethyl-2-Phenyl-1,3,2-dioxaborolane 14.5g(119 mmol)을 사용하여 화합물 B-30의 합성법과 동일한 방법을 사용하여 중간체 I-14 33g(77%)을 얻었다.

제 2 단계: 중간체 I-15의 합성

20

중간체 I-14 29.8g(75.28mmol) 과 N-Bromosuccinimide 14g(75.28 mmol)을 사용하여 상온에서 교반하였다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane

(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO_4 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 I-15 29g(81%)을 얻었다.

제 3 단계: 화합물 B-129의 합성

- 5 9-phenyl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-carbazole 9.7g(33.65 mmol)과 중간체 I-15 16g(33.65 mmol)을 사용하여 화합물 B-30의 합성법과 동일한 합성법을 사용하여 화합물 B-129 17g(79%)를 얻었다.

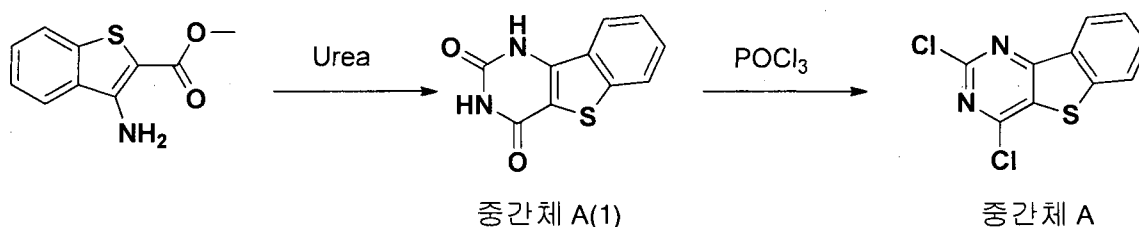
HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for $\text{C}_{48}\text{H}_{32}\text{N}_2$: 636.2565, found: 636

Elemental Analysis: C, 90 %; H, 5 %

10

제3 화합물의 합성

중간체 A의 합성



중간체 A(1)(벤조-1H-티에노 [3,2-d]피리미딘-2,4-디온)의 합성

- 15 2L 둥근 플라스크에 메틸 3-아미노-벤조2-티오펜카르복실레이트 (237.5g, 1.15mol) 및 우레아 (397.0g, 5.75mol)의 혼합물을 200°C 에서 2 시간 동안 교반 하였다. 고온의 반응 혼합물을 상온으로 식힌 후, 수산화나트륨 용액에 붓고, 불순물을 여과하여 제거한 다음, 반응물을 산성화하여 (HCl, 2N), 수득한 침전물을 건조시켜 중간체 A(1)을 수득하였다 (175g, 75%).

- 20 calcd. $\text{C}_{10}\text{H}_6\text{N}_2\text{O}_2\text{S}$: C, 55.04; H, 2.77; N, 12.84; O, 14.66; S, 14.69; found: C, 55.01; H, 2.79; N, 12.81; O, 14.69; S, 14.70

중간체 A(벤조-2,4-디클로로-티에노[3,2-d]피리미딘)의 합성

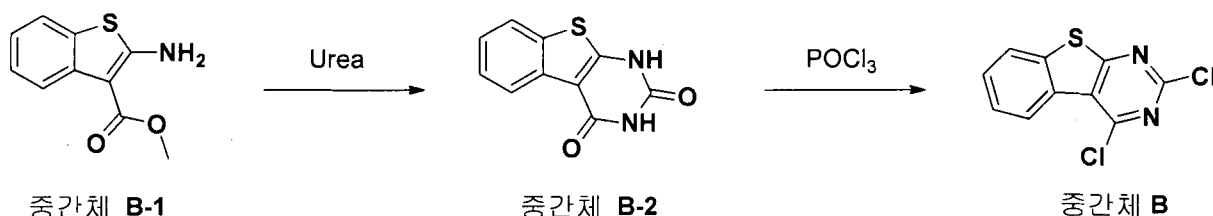
- 3000 mL 둥근 플라스크에 중간체 A(1) (벤조-1H-티에노[3,2-d]피리미딘-2,4-디온) (175 g, 0.80mol) 및 옥시염화인 (1000 mL)의 혼합물을 환류하에 8시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 상온으로 냉각시키고, 세게 교반하면서 얼음/물에 부어, 침전물을 생성하였다. 이로부터 수득한 반응물을 여과하여, 중간체 A(벤조-2,4-디클로로-티에노[3,2-d]피리미딘) (175g, 85%, 백색 고체)를 수득하였다. 생성된
- 25

중간체 A의 원소 분석 결과는 하기와 같다.

calcd. $C_{10}H_4Cl_2N_2S$: C, 47.08; H, 1.58; Cl, 27.79; N, 10.98; S, 12.57; found : C, 47.03; H, 1.61; Cl, 27.81; N, 10.98; S, 12.60

5

중간체 B의 합성



중간체 B-2 의 합성

250 mL 둥근 플라스크에 중간체 B-1 (35.0g, 0.17mol) 및 우레아 (50.7g, 0.84mol)의 혼합물을 200℃에서 2 시간 동안 교반하였다. 고온의 반응 혼합물을 상온으로 식힌 후, 수산화나트륨 용액에 붓고, 불순물을 여과하여 제거한 다음, 반응물을 산성화하여 (HCl, 2N), 수득한 침전물을 건조시켜 중간체 B-2를 수득하였다 (18.9g, 51%).

calcd. $C_{10}H_6N_2O_2S$: C, 55.04; H, 2.77; N, 12.84; O, 14.66; S, 14.69; found : C, 55.01; H, 2.77; N, 12.83; O, 14.65; S, 14.63

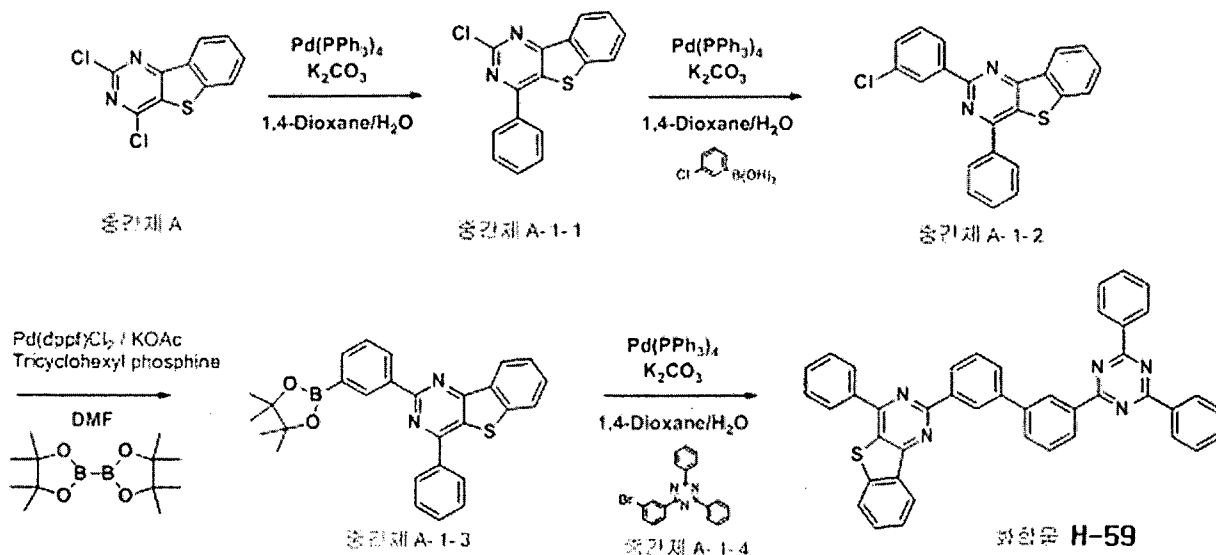
중간체 B 의 합성

250 mL 둥근 플라스크에 중간체 B-2 (18.9 g, 99.2mmol) 및 옥시염화인 (100mL)의 혼합물을 환류하에 6시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 상온으로 냉각시키고, 세게 교반하면서 얼음/물에 부어, 침전물을 생성하였다. 이로부터 수득한 반응물을 여과하여, 중간체 B를 수득하였다. (17.5g, 85%, 백색 고체)

calcd. $C_{10}H_4Cl_2N_2S$: C, 47.08; H, 1.58; Cl, 27.79; N, 10.98; S, 12.57; found : C, 47.04; H, 1.53; Cl, 27.74; N, 10.96; S, 12.44

합성예 5 : 화합물 H-59의 합성

[반응식 18]

중간체 A-1-1의 합성

- 2000 mL 플라스크에 중간체 A 70.0 g (274.4 mmol), 페닐보로닉에시드 33.5 g (274.4 mmol), 탄산칼륨 94.8 g (686.0 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀) 팔라듐 (0) 15.9 g (13.7 mmol)을 1,4-다이옥산 800 mL, 물 400 mL 에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 24시간 동안 50℃로 가열하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 3000 mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 모노클로로벤젠에 녹여 실리카겔/셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 중간체 A-1-1 (59.4 g, 73%의 수율)을 수득하였다.

calcd. C₁₆H₉ClN₂S : C, 64.75; H, 3.06; Cl, 11.95; N, 9.44; S, 10.80; found : C, 64.70; H, 3.02; Cl, 11.93; N, 9.40; S, 10.73

중간체 A-1-2 의 합성

- 2 L 둥근 플라스크에 중간체 A-1-1 59.0 g (198.8 mmol), 3-클로로페닐 보로닉에시드 31.1 g (198.8 mmol), 탄산칼륨 68.7 g (497.0 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀) 팔라듐 (0) 11.5 g (9.9 mmol)을 1,4-다이옥산 600 mL, 물 300 mL에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 16시간 동안 가열하여 환류하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 2000 mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 모노클로로벤젠에 녹여 실리카겔/ 셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 중간체 A-1-2 (51.2 g, 69%의 수율)를 수득하였다.

calcd. C₂₂H₁₃ClN₂S : C, 70.87; H, 3.51; Cl, 9.51; N, 7.51; S, 8.60; found C, 70.84; H, 3.46; Cl, 9.50; N, 7.47; S, 8.58

중간체 A-1-3의 합성

1 L 플라스크에 중간체 A-1-2 (50.0 g, 134.1 mmol), 4,4,4',4', 5,5,5',5'-옥타메틸-2,2'-바이(1,3,2-다이옥사보로란) (40.9 g, 160.9 mmol), 아세트산칼륨 (KOAc, 39.5 g, 402.3 mmol) 및 1,1'-비스(다이페닐포스포노) 페로센-팔라듐(II)다이클로라이드 (6.6g, 8.1 mmol), 트리사이클로헥실포스핀 (5.6g, 20.1 mmol)을 N,N-다이메틸포름아마이드 500 mL에 넣은 후, 130°C에서 24시간 교반하였다. 반응 완료 후, 반응 용액을 물과 EA로 추출하여 수득한 유기층으로부터 황산마그네슘을 사용하여 수분을 제거하고 농축하여, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 중간체 A-1-3을 흰색의 고체 (40.3 g, 수율= 69 %)로 얻었다.

calcd. C₂₈H₂₅BN₂O₂S : C, 72.42; H, 5.43; B, 2.33; N, 6.03; O, 6.89; S, 6.90; found : C, 72.40; H, 5.42; B, 2.32; N, 6.00; O, 6.82; S, 6.85

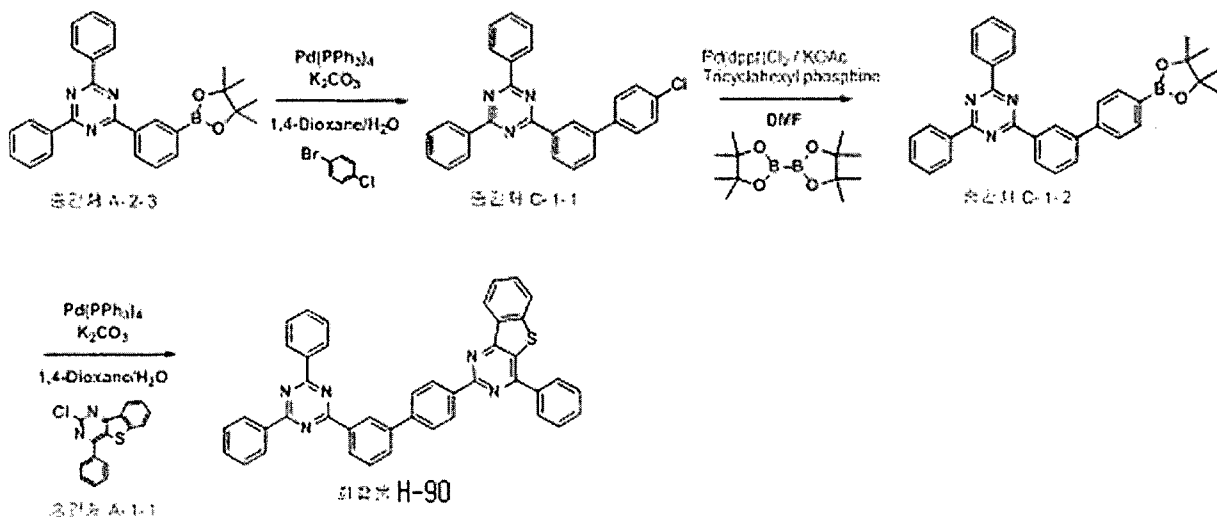
화합물 H-59의 합성

100 mL 플라스크에 중간체 A-1-3 5.0 g (10.8 mmol), 중간체 A-1-4 (2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 출발물질로 하고 중간체 I-8의 합성법과 같이 피나콜보론화 반응 후 생성된 생성물과 1-bromo-3-iodobenzene와 중간체 I-12의 합성법과 같이 반응시켜 제조함) 4.2 g (10.8 mmol), 탄산칼륨 3.7 g (27.0 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀) 팔라듐 (0) 0.6 g (0.5 mmol)을 1,4-다이옥산 40 mL, 물 20 mL 에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 16시간 동안 가열하여 환류하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 150 mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 모노클로로벤젠에 녹여 실리카겔/셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 화합물 H-59 (4.7 g, 68%의 수율)을 수득하였다.

calcd. C₄₃H₂₇N₅S : C, 79.98; H, 4.21; N, 10.84; S, 4.97; found : C, 79.95; H, 4.20; N, 10.81; S, 4.92

합성예 6: 화합물 H-90의 합성

[반응식 19]

중간체 C-1-1의 합성

- 1000 mL 플라스크에 중간체 A-2-3 23.0 g (중간체 A-1-4를 출발물질하고
- 5 중간체 I-13의 합성법과 같이 반응시켜 제조함)(64.3 mmol), 1-브로모-4-클로로벤젠 13.6 g (70.8 mmol), 탄산칼륨 17.8 g (128.6 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀) 팔라듐 (0) 2.2 g (1.93 mmol)을 1,4-다이옥산 300 mL, 물 150 mL 에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 24시간 동안 환류하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 1000 mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 물, 메탄올, 및 헥산으로 씻어주었다.
- 10 건조하여 중간체 C-1-1을 흰색의 고체(26.8 g, 99%의 수율)로 수득하였다.

calcd. C₂₇H₁₈ClN₃ : C, 77.23; H, 4.32; Cl, 8.44; N, 10.01; found : C, 77.25; H, 4.30; Cl, 8.42; N, 10.03

중간체 C-1-2 의 합성

- 500 mL 플라스크에 중간체 C-1-1 (26.8 g, 63.8 mmol), 4,4,4',4', 5,5,5',5'-
- 15 옥타메틸-2,2'-바이(1,3,2-다이옥사보로란) (19.5 g, 76.6 mmol), 아세트산칼륨 (KOAc, 18.8 g, 191.5 mmol) 및 1,1'-비스(다이페닐포스피노) 페로센-팔라듐(II)다이클로라이드 (3.1 g, 3.8 mmol), 트리사이클로헥실포스핀 (4.3g, 15.3 mmol)을 N,N-다이메틸포름아마이드 300 mL에 넣은 후, 130 °C에서 24시간 교반하였다. 반응 완료 후, 반응 용액을 물과 EA로 추출하여 수득한
- 20 유기층으로부터 황산마그네슘을 사용하여 수분을 제거하고 농축하여, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 중간체 C-1-2을 흰색의 고체 (22.5 g, 수율= 69 %)로 얻었다.

calcd. C₃₃H₃₀BN₃O₂ : C, 77.50; H, 5.91; B, 2.11; N, 8.22; O, 6.26; found : C, 77.52; H, 5.89; B, 2.13; N, 8.18; O, 6.28

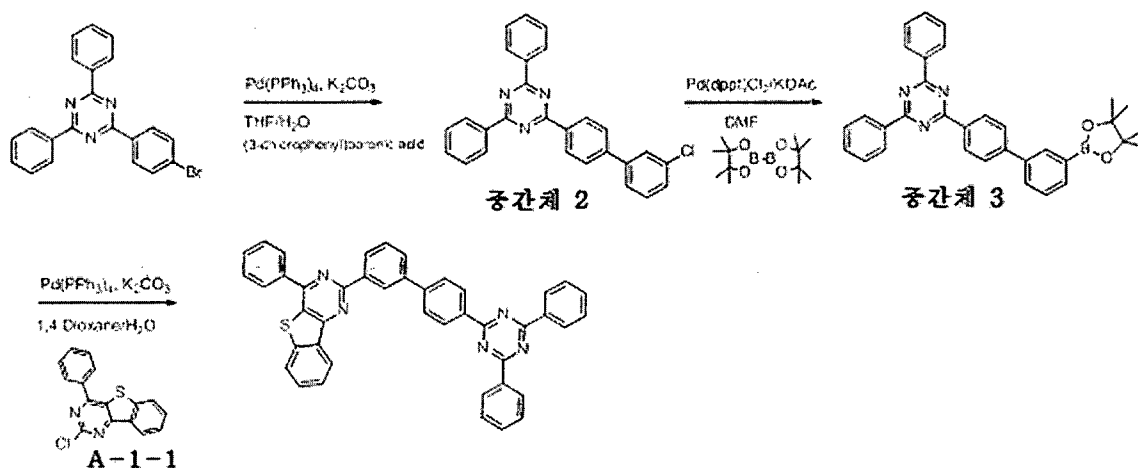
화합물 H-90의 합성

500 mL 플라스크에 중간체 C-1-2 20.0 g (39.1 mmol), 중간체 A-1-1 12.8 g (43.0 mmol), 탄산칼륨 10.8 g (78.2 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀) 팔라듐 (0) 1.4 g (1.2 mmol)을 1,4-다이옥산 200 mL, 물 100 mL 에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 12시간 동안 가열하여 환류하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 150 mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 디클로로벤젠에 녹여 실리카겔/셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 화합물 H-90 (22.4 g, 89%의 수율)을 수득하였다.

calcd. C₄₃H₂₇N₅S : C, 79.98; H, 4.21; N, 10.84; S, 4.97; found : C, 79.96; H, 4.23; N, 10.82; S, 4.99

합성예 7: 화합물 H-91의 합성

[반응식 20]



중간체 2의 합성

질소 환경에서 상기 화합물 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (50 g, 128 mmol)을 THF 1 L에 녹인 후, 여기에 (4-chlorophenyl)boronic acid (24 g, 155 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (1.5 g, 1.3 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(44 g, 320 mmol)을 넣고 80℃에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)으로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로

분리 정제하여 상기 중간체 2 (2-(3'-chloro-[1,1'-biphenyl]-4-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine) (51 g, 95 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₂₇H₁₈ClN₃: 419.1189, found: 419.

Elemental Analysis: C, 77%; H, 4%

5

중간체 3의 합성

질소 환경에서 중간체 2 (50 g, 119 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 1L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (36 g, 142 mmol)와 (1,1'-

bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II) (1 g, 1.19 mmol), 그리고 potassium acetate(29 g, 298 mmol)을 넣고 150 °C에서 48시간 동안 가열하여 환류 시켰다.

반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 중간체 3(54 g, 88 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₃₃H₃₀BN₃O₂: 511.2431, found: 511

15 Elemental Analysis: C, 77 %; H, 6 %

화합물 H-91의 합성

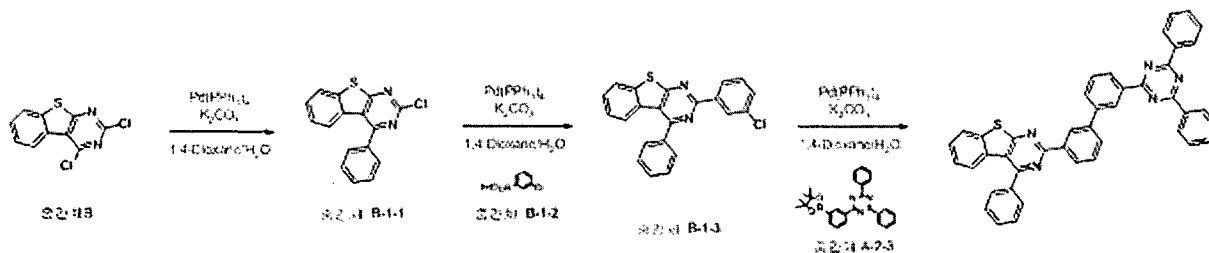
질소 환경에서 중간체 3 (20 g, 39 mmol)을 1,4 Dioxane 0.2 L에 녹인 후, 여기에 중간체 A-1-1 (11.5 g, 39 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0.45 g, 0.39 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(13.5 g, 97 mmol)을 넣고 80 °C에서 20시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 H-91 (19 g, 79 %)을 얻었다.

25 HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₄₃H₂₇N₅S: 645.1987, found: 645

Elemental Analysis: C, 80 %; H, 4 %

합성예 8: 화합물 H-173의 합성

[반응식 21]

중간체 B-1-1의 합성

- 500 mL 플라스크에 중간체 B 10.0 g (39.2 mmol), 페닐보론산 5.3 g (43.1 mmol), 탄산칼륨 13.5 g (98.0 mmol) 테트라키스(트리페닐포스핀) 팔라듐 (0) 2.3 g (2.0 mmol)을 1,4-다이옥산 140 mL, 물 70 mL 에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 10시간 동안 60℃로 가열하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 450 mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 모노클로로벤젠에 녹여 실리카겔/셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 중간체 B-1-1 (8.0 g, 69%의 수율)를 수득하였다.

calcd. C₁₆H₉ClN₂S : C, 64.75; H, 3.06; Cl, 11.95; N, 9.44; S, 10.80; found : C, 64.72; H, 3.06; Cl, 11.94; N, 9.42; S, 10.77

중간체 B-1-3의 합성

- 중간체 A-1-1 대신 중간체 B-1-1를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 5의 중간체 A-1-2의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 중간체 B-1-3 (10.3 g, 65%의 수율) 를 합성하였다.

calcd. C₂₂H₁₃ClN₂S : C, 70.87; H, 3.51; Cl, 9.51; N, 7.51; S, 8.60; found : C, 70.83; H, 3.49; Cl, 9.47; N, 7.50; S, 8.54

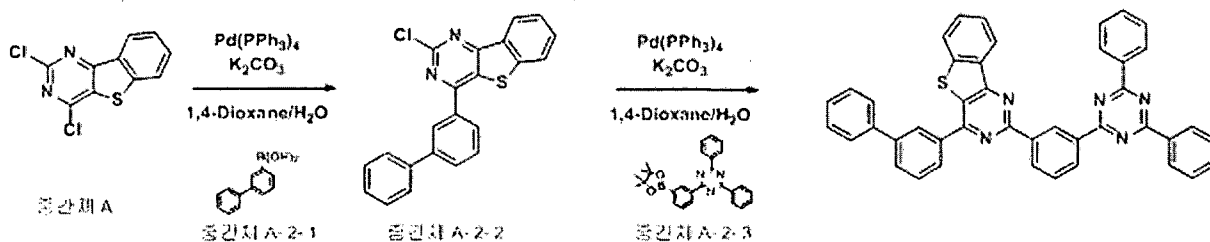
화합물 H-173의 합성

- 중간체 A-1-2 대신 중간체 B-1-3를 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 5의 화합물 중간체 A-1-3의 합성 방법과 동일하게 진행 후, 이의 생성물을 합성예 5의 H-59의 합성방법과 동일한 방법을 이용하여, 화합물 H-173 (4.1 g, 39%의 수율) 를 합성하였다.

- calcd. C₄₃H₂₇N₅S : C, 79.98; H, 4.21; N, 10.84; S, 4.97; found : C, 79.94; H, 4.17; N, 10.82; S, 4.95

합성예 9 : 화합물 H-230의 합성

[반응식 22]

중간체 A-2-2의 합성

- 5 500 mL 플라스크에 중간체 A 10.0 g (39.2 mmol), 중간체 A-2-1 12.1 g (43.1 mmol), 탄산칼륨 13.5 g (98.0 mmol) 테트라키스(트리페닐포스핀) 팔라듐 (0) 2.3 g (43.1 mmol)을 1,4-다이옥산 140 mL, 물 70 mL 에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 12시간 동안 60℃로 가열하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 500 mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 모노클로로벤젠에 녹여
- 10 실리카겔/셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 중간체 A-2-2 (10.1 g, 69%의 수율)를 수득하였다.

calcd. C₂₂H₁₃ClN₂S : C, 70.87; H, 3.51; Cl, 9.51; N, 7.51; S, 8.60; found : C, 70.80; H, 3.50; Cl, 9.47; N, 7.49; S, 8.60

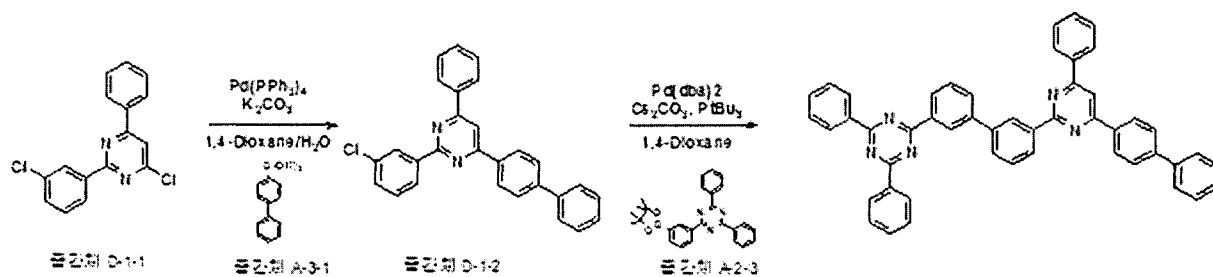
화합물 H-230의 합성

- 15 250 mL 플라스크에 중간체 A-2-2 10.0 g (26.8 mmol), 중간체 A-2-3 11.7 g (26.8 mmol), 탄산칼륨 9.3g (67.1 mmol) 테트라키스(트리페닐포스핀) 팔라듐 (0) 1.6 g (1.3 mmol)을 1,4-다이옥산 90 mL, 물 45 mL 에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 12시간 동안 70℃로 가열하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 250 mL에
- 20 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 모노클로로벤젠에 녹여 실리카겔/셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 화합물 H-230 (12.4 g, 72%의 수율)를 수득하였다.

calcd. C₄₃H₂₇N₅S : C, 79.98; H, 4.21; N, 10.84; S, 4.97; found : C, 79.97; H, 4.19; N, 10.81; S, 4.96

합성예 10: 화합물 F-2의 합성

[반응식 23]

중간체 D-1-2의 합성

- 5 500 mL 플라스크에 중간체 D-1-1 (구매가능, Aurora Building Blocks) 11.8 g (39.2 mmol), 중간체 A-3-1 12.1 g (43.1 mmol), 탄산칼륨 13.5 g (98.0 mmol) 테트라키스(트리페닐포스핀) 팔라듐 (0) 2.3 g (43.1 mmol)을 1,4-다이옥산 140 mL, 물 70 mL 에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 12시간 동안 60℃로 가열하였다.
- 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 500 mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후,
- 10 모노클로로벤젠에 녹여 실리카겔/셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 중간체 D-1-2 (13.1 g, 80%의 수율)를 수득하였다.
- calcd. $\text{C}_{28}\text{H}_{19}\text{ClN}_2$: C, 80.28; H, 4.57; Cl, 8.46; N, 6.69; found : C, 80.25; H, 4.55; Cl, 8.41; N, 6.68

화합물 F-2의 합성

- 15 250 mL 플라스크에 중간체 D-1-2 12.0 g (28.6 mmol), 중간체 A-2-3 12.5 g (28.6 mmol), 세슘카보네이트(Cs_2CO_3) 23.3 g (71.5 mmol), 트리스(디벤질리텐-아세톤) 디팔라듐(0) 1.1 g (0.6 mmol), 트리 t-부틸포스핀 0.9 mL (50% in 톨루엔)을 1,4-다이옥산 120 mL에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 18시간 동안 110℃로
- 20 가열하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 250 mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 모노클로로벤젠에 녹여 실리카겔/셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 화합물 F-2 (13.8 g, 70%의 수율)를 수득하였다.

calcd. $\text{C}_{49}\text{H}_{33}\text{N}_5$: C, 85.07; H, 4.81; N, 10.12; found : C, 85.09; H, 4.80; N, 10.10

유기 발광 소자의 제작

실시예 1

ITO (Indium tin oxide)가 1500 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수
 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올
 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송 시킨 다음
 5 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 10분간 세정 한 후 진공 증착기로 기판을
 이송하였다. 이렇게 준비된 ITO 투명 전극을 양극으로 사용하여 ITO 기판 상부에
 화합물 A를 진공 증착하여 700 Å 두께의 정공 주입층을 형성하고 상기 주입층
 상부에 화합물 B를 50 Å의 두께로 증착한 후, 화합물 C를 1020 Å의 두께로
 증착하여 정공수송층을 형성하였다. 정공수송층 상부에 합성예 1에서 얻은 제1
 10 화합물 A-275, 합성예 3에서 얻은 제2 화합물 B-30, 및 합성예 5에서 얻은 제3
 화합물 H-59를 동시에 호스트로 사용하고 도판트로 트리스(2-
 페닐피리딘)이리듐(III) [Ir(ppy)₃]를 10wt%로 도핑하여 진공 증착으로 400 Å 두께의
 발광층을 형성하였다. 여기서 화합물 A-275와 화합물 B-30은 3:7 중량비율로
 사용되었으며,

15 화합물 A-275 및 화합물 B-30의 조성물과 화합물 H-59는 8:2의 중량비율로
 사용되었다.

이어서 상기 발광층 상부에 화합물 D와 Liq를 동시에 1:1 비율로 진공
 증착하여 300 Å 두께의 전자수송층을 형성하고 상기 전자수송층 상부에 Liq
 15 Å과 Al 1200 Å을 순차적으로 진공 증착 하여 음극을 형성함으로써
 20 유기발광소자를 제작하였다.

상기 유기발광소자는 5층의 유기 박막층을 가지는 구조로 되어 있으며,
 구체적으로 다음과 같다.

ITO/화합물A(700 Å)/화합물B(50 Å)/화합물C(1020 Å)/EML[{(화합물A-
 275:화합물B-30=3:7 wt%):화합물H-59}=8:2]:Ir(ppy)₃ =
 25 X:X:10%](400 Å)/화합물D:Liq(300 Å)/Liq(15 Å)/Al(1200 Å)의 구조로 제작하였다. (X=
 중량비)

화합물 A: N4,N4'-diphenyl-N4,N4'-bis(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)biphenyl-4,4'-
 diamine

화합물 B: 1,4,5,8,9,11-hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile (HAT-CN),

30 화합물 C: N-(biphenyl-4-yl)-9,9-dimethyl-N-(4-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)phenyl)-

9H-fluoren-2-amine

화합물 D: 8-(4-(4,6-di(naphthalen-2-yl)-1,3,5-triazin-2-yl)phenyl)quinoline

실시예 2

- 5 화합물 A-275 및 화합물 B-30의 조성물과 화합물 H-59의 혼합비를 7:3로 변경한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

실시예 3

- 10 발광층에 제3 화합물 H-59 대신 합성예 6에서 얻어진 화합물 H-90을 제3 화합물로 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

실시예 4

- 15 발광층에 제3 화합물 H-59 대신 합성예 7에서 얻어진 화합물 H-91을 제3 화합물로 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

실시예 5

- 20 발광층에 제3 화합물 H-59 대신 합성예 8에서 얻어진 화합물 H-173을 제3 화합물로 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

실시예 6

- 25 발광층에 제3 화합물 H-59 대신 합성예 9에서 얻어진 화합물 H-230을 제3 화합물로 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

실시예 7

- 30 화합물 A-275 및 화합물 B-30의 조성물과 화합물 H-230의 혼합비를 85:15로 변경한 것을 제외하고는 실시예 6과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

실시예 8

발광층에 제3 화합물 H-59 대신 합성예 10에서 얻어진 화합물 F-2를 제3 화합물로 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법으로 유기발광소자를
5 제작하였다.

실시예 9

발광층에 제2 화합물 B-30 대신 합성예 4에서 얻어진 화합물 B-129를 제2 화합물로 사용한 것을 제외하고는 실시예 2와 동일한 방법으로 유기발광소자를
10 제작하였다.

실시예 10

발광층에 제1 화합물 A-275 대신 합성예 2에서 얻어진 화합물 A-216을 제1 화합물로 사용한 것을 제외하고는 실시예 9와 동일한 방법으로
15 유기발광소자를 제작하였다.

참고예 1

제3 화합물을 사용하지 않은 것을 제외하고는, 상기 실시예 9와 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.
20

참고예 2

제3 화합물을 사용하지 않은 것을 제외하고는, 상기 실시예 10과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

비교예 1

제3 화합물을 사용하지 않은 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

평가

30 실시예 1 내지 실시예 10, 참고예 1, 참고예 2, 및 비교예 1에 따른 유기발광소자의 구동전압, 및 발광효율 특성을 평가하였다.

구체적인 측정방법은 하기와 같고, 그 결과는 표 1과 같다.

(1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

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

(2) 전압변화에 따른 휘도변화 측정

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

(3) 발광효율 측정

- 상기(1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도(10 mA/cm^2)의 전력 효율(lm/W) 을 계산하였다.

(4) 구동전압 측정

전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 15 mA/cm^2 에서 각 소자의 구동전압을 측정하였다.

15 [표 1]

No.	제1 호스트	제2 호스트	제1호스트: 제2호스트 비율	제3 호스트	제1호스트 및 제2호스트의 조성물 : 제3호스트	구동 전압(V_d)	Δ 구동 전압 (%)	전력 효율(lm/W)	Δ 전력 효율 (%)
실시 예 1	A-275	B-30	30:70	H-59	80:20	3.83	84	40.2	122 %
실시 예 2	A-275	B-30	30:70	H-59	70:30	3.79	77	39.2	119 %
실시 예 3	A-275	B-30	30:70	H-90	80:20	3.93	80	39.6	120 %
실시 예 4	A-275	B-30	30:70	H-91	80:20	3.99	81	38.4	117 %
실시 예 5	A-275	B-30	30:70	H-173	80:20	4.12	83	37.2	113 %
실시 예 6	A-275	B-30	30:70	H-230	80:20	4.03	82	39.7	121 %

실시 예 7	A-275	B-30	30:70	H-230	85:15	4.14	84	39.0	119 %
실시 예 8	A-275	B-30	30:70	F-2	80:20	4.07	82	38.4	117 %
실시 예 9	A-275	B-129	30:70	H-59	70:30	4.13	93	40.9	122 %
실시 예 10	A-216	B-129	30:70	H-59	70:30	4.07	93	40.7	128 %
참고 예 1	A-275	B-129	30:70	-	-	4.72	100	33.5	100 %
참고 예 2	A-216	B-129	30:70	-	-	4.37	100	31.9	100 %
비교 예 1	A-275	B-30	30:70	-	-	4.94	100	32.9	100 %

표 1을 참고하면, 제1호스트 및 제2호스트로만 구성된 비교예 1에 비하여 본 발명의 제3호스트를 도입하는 경우 구동전압이 큰 폭으로 감소함과 동시에 전력 효율 또한 크게 증가하는 것을 확인할 수 있다. 이러한 결과는 전자 주입 및 전자 수송 능력이 우수한 본 발명의 제3화합물을 호스트로 추가하여 도펀트와 호스트 간 LUMO 에너지 레벨 차이로 인한 트랩 현상을 최소화함으로써 얻을 수 있는 것이며, 구동 전압을 획기적으로 낮추면서도 효율 및 수명이 우수한 유기 광전자 소자를 제작할 수 있게 한다.

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

【청구의 범위】

【청구항 1】

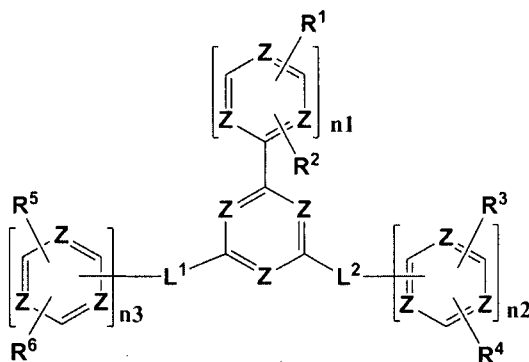
하기 화학식 1로 표현되는 적어도 1종의 제1 화합물,

하기 화학식 2로 표현되는 화합물, 및 하기 화학식 3으로 표현되는
모이어티와 하기 화학식 4로 표현되는 모이어티의 조합으로 이루어진 화합물 중
적어도 1종의 제2 화합물, 및

하기 화학식 5로 표현되는 적어도 1종의 제3 화합물

을 포함하는 유기 광전자 소자용 조성물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Z는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^a이고,

Z 중 적어도 하나는 N이고,

R¹ 내지 R⁶, 및 R^a는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된
C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는
비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

R¹ 내지 R⁶, 및 R^a는 각각 독립적으로 존재하거나, 인접한 기는 서로
연결되어 고리를 형성하고,

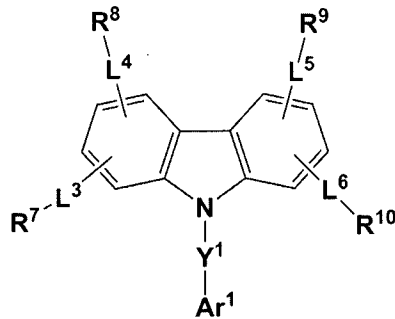
L¹ 및 L²는 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30
아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의
조합이고,

n1은 1 이고,

n2 및 n3은 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고,

1 ≤ n2 + n3 ≤ 2이고;

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

L^3 내지 L^6 , 및 Y^1 은 각각 독립적으로, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기, 또는 이들의 조합이고,

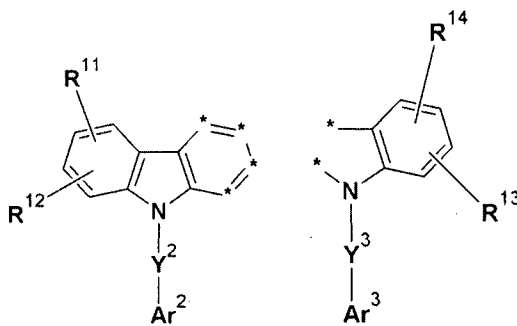
Ar^1 은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

R^7 내지 R^{10} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C50 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

R^7 내지 R^{10} 및 Ar^1 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 카바졸기를 포함하고,

[화학식 3]

[화학식 4]



상기 화학식 3 및 4에서,

Y^2 및 Y^3 는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

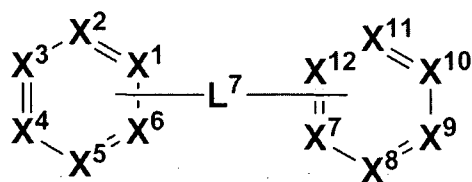
Ar^2 및 Ar^3 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고,

R^{11} 내지 R^{14} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C50 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고,

상기 화학식 3의 인접한 두 개의 *는 상기 화학식 4의 두 개의 *와 연결되어 융합고리를 형성하고 상기 화학식 3에서 융합고리를 형성하지 않은 *는 각각 독립적으로 CR^e 이고,

R^e 는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C12 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고;

[화학식 5]



상기 화학식 5에서,

X^1 내지 X^{12} 는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^d 이고,

X^1 내지 X^6 중 적어도 하나는 N이고,

X^7 내지 X^{12} 중 적어도 하나는 N이고,

R^d 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 히드록시기, 티올기, 또는 이들의 조합이고,

R^d 는 각각 독립적으로 존재하거나, 인접한 R^d 는 서로 연결되어 고리를 형성하고,

L^7 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

상기 화학식 1 내지 5의 "치환"은 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30

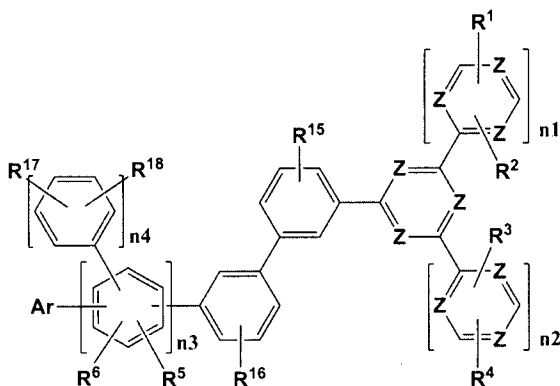
헤테로고리기, C1 내지 C20 알콕시기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

【청구항 2】

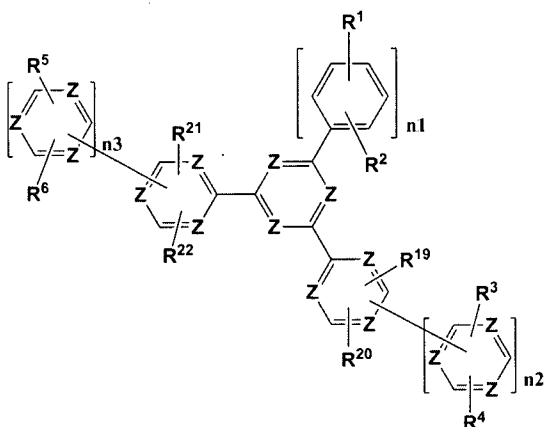
제1항에서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-I 내지 화학식 1-III 중 어느 하나로 표현되는 유기 광전자 소자용 조성물:

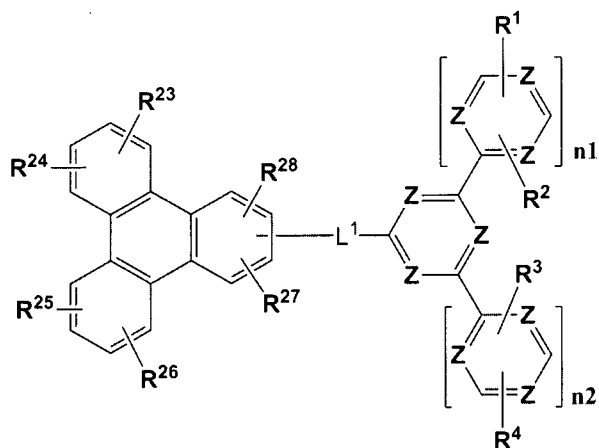
[화학식 1-I]



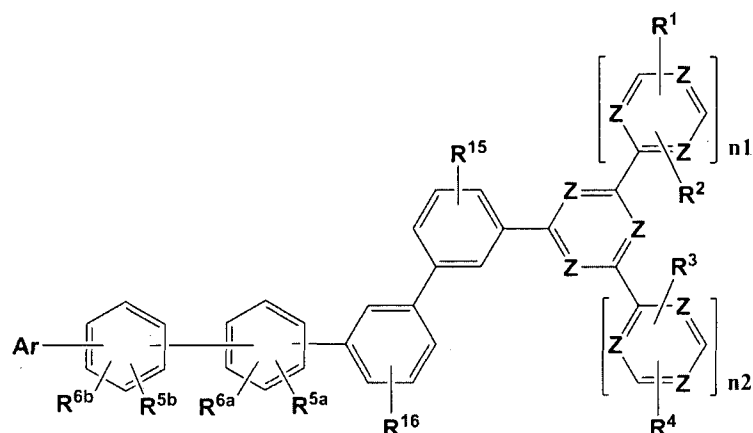
[화학식 1-II]



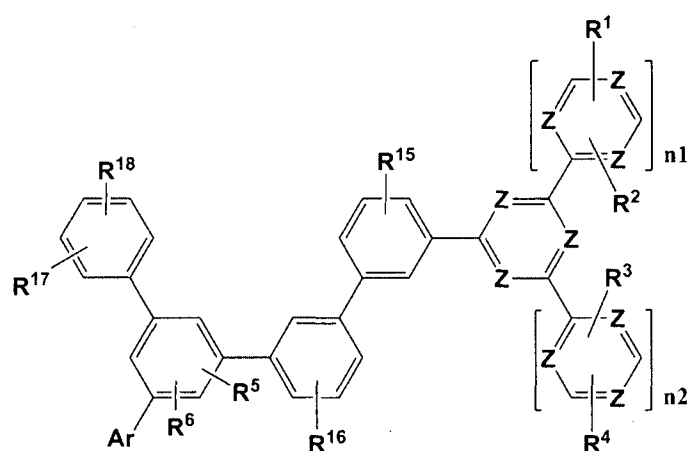
[화학식 1-III]



[화학식 1- I B]



[화학식 1- I C]



상기 화학식 1- I A 내지 1- I C에서,

Z는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^a이고,

Z 중 적어도 하나는 N 이고,

R¹ 내지 R⁶, R^a, R^{5a}, R^{6a}, R^{5b}, R^{6b}, 및 R¹⁵ 내지 R¹⁸는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 또는 이들의 조합이고,

R¹ 내지 R⁶, R^a, R^{5a}, R^{6a}, R^{5b}, R^{6b}, R¹⁷ 및 R¹⁸은 각각 독립적으로 존재하거나 서로 인접한 기는 서로 연결되어 고리를 형성하고,

Ar은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고,

n1은 1의 정수이고,

n2는 0 또는 1의 정수이고,

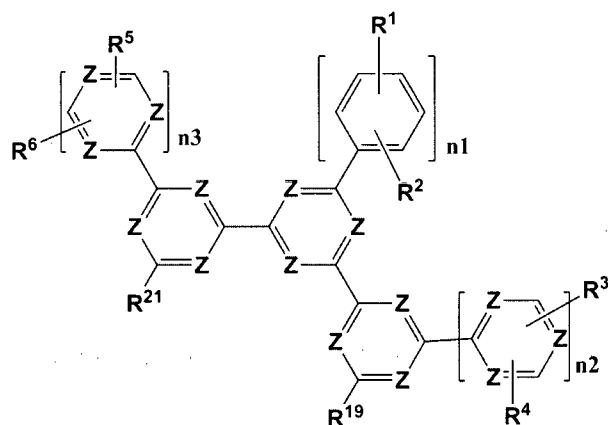
여기서, "치환"은 제1항에서 정의한 바와 같다.

【청구항 4】

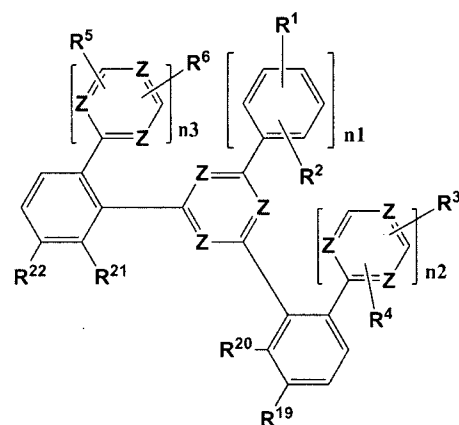
제2항에서,

상기 화학식 1-Ⅱ은 하기 화학식 1-ⅡA 또는 1-ⅡB로 표현되는 유기 광전자 소자용 조성물:

[화학식 1-ⅡA]



[화학식 1-ⅡB]



상기 화학식 1-ⅡA 및 1-ⅡB에서,

Z는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^a이고,

Z 중 적어도 하나는 N 이고,

R¹ 내지 R⁶, R¹⁹ 내지 R²², 및 R^a는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 또는 이들의 조합이고,

R¹ 내지 R⁶, R¹⁹ 내지 R²², 및 R^a는 각각 독립적으로 존재하거나 인접한 기는 서로 연결되어 고리를 형성하고,

n1은 1의 정수이고,

n2 및 n3은 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고,

1 ≤ n2 + n3 ≤ 2이고,

여기서, "치환"은 제1항에서 정의한 바와 같다.

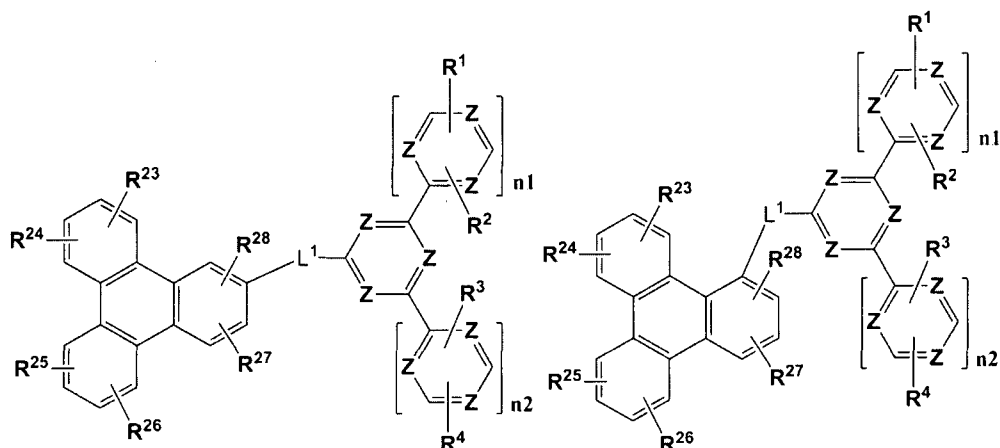
【청구항 5】

제2항에서,

상기 화학식 화학식 1-Ⅲ은 하기 화학식 1-ⅢA 또는 1-ⅢB로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[화학식 1-ⅢA]

[화학식 1-ⅢB]



상기 화학식 1-ⅢA 및 1-ⅢB에서,

Z는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^a이고,

Z 중 적어도 하나는 N 이고,

R¹ 내지 R⁴, R²³ 내지 R²⁸, 및 R^a는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 또는 이들의 조합이고,

R¹ 내지 R⁴, 및 R^a는 각각 독립적으로 존재하거나 인접한 기는 서로 연결되어 고리를 형성하고,

L¹은 단일결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 터페닐렌기이고,

n1은 1의 정수이고,

n2는 0 또는 1의 정수이고,

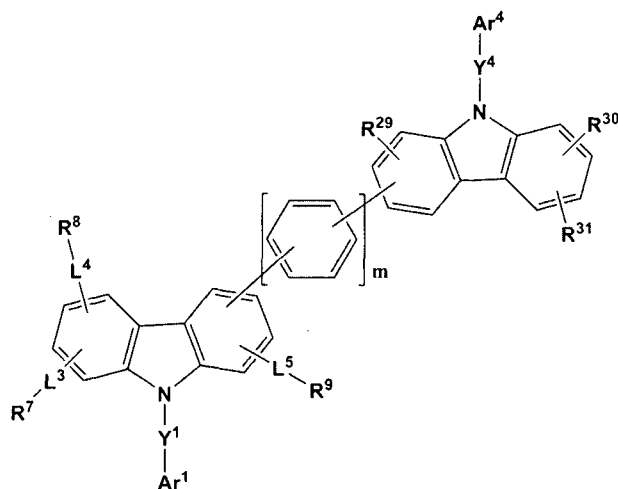
여기서, "치환"은 제1항에서 정의한 바와 같다.

【청구항 6】

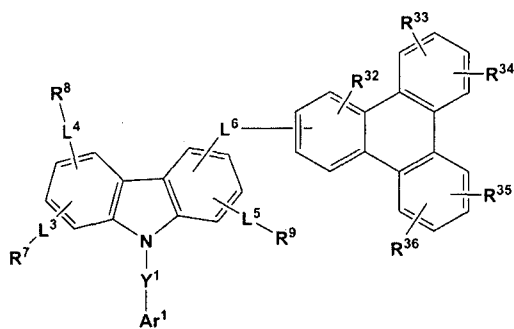
제1항에서,

상기 화학식 2는 하기 화학식 2-I 내지 2-Ⅲ 중 어느 하나로 표현되는 유기 광전자 소자용 조성물:

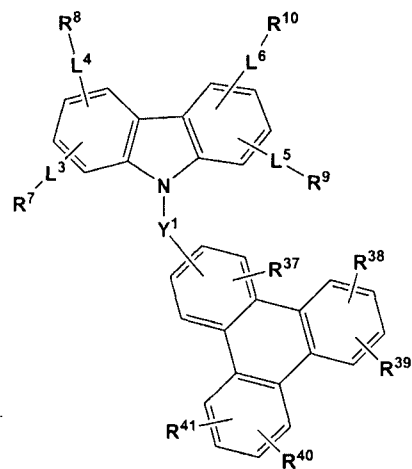
[화학식 2-I]



[화학식 2-II]



[화학식 2-III]



상기 화학식 2-I 내지 2-III에서,

L^3 내지 L^6 , Y^1 , 및 Y^4 은 각각 독립적으로, 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

Ar^1 및 Ar^4 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고,

R^7 내지 R^{10} , 및 R^{29} 내지 R^{41} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C50 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

m 은 0 내지 4의 정수 중 하나이고,

여기서, "치환"은 제1항에서 정의한 바와 같다.

【청구항 7】

제6항에서,

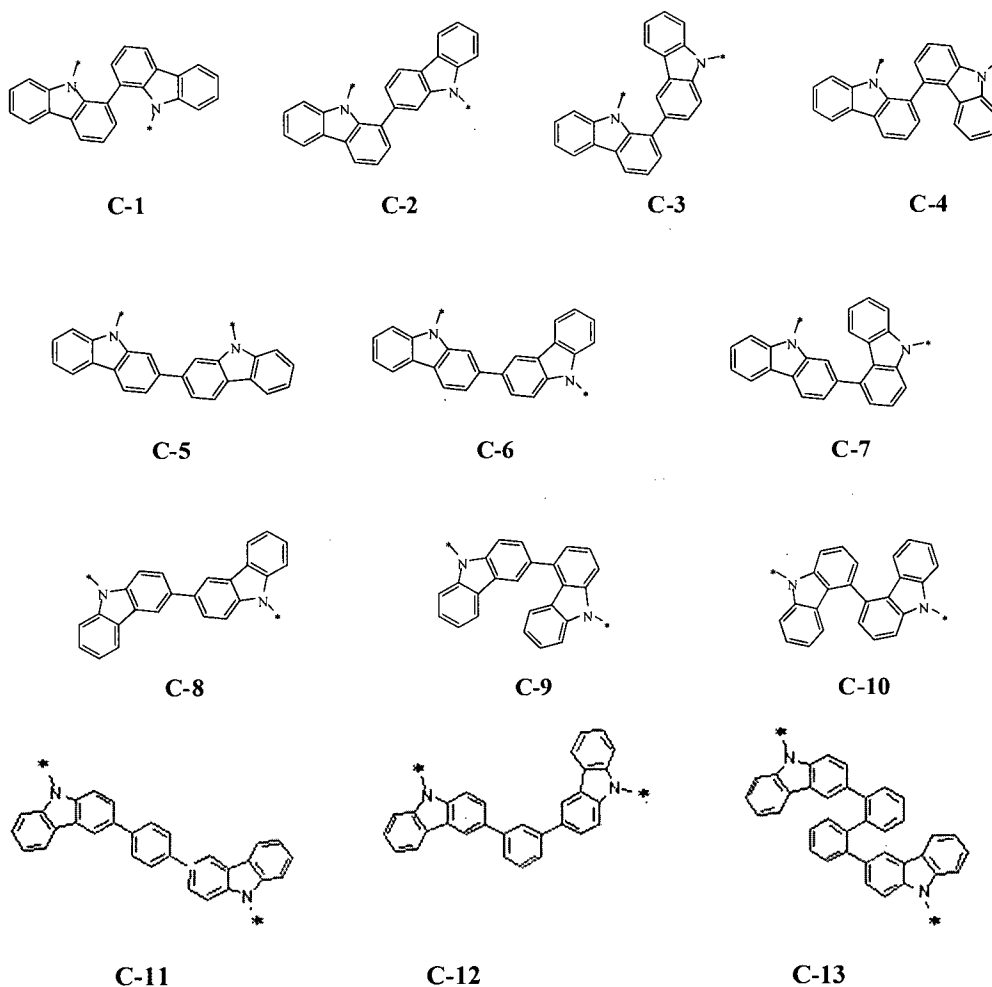
상기 화학식 2-I 내지 2-III의 Ar^1 및 Ar^4 은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸란일기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 또는 이들의 조합인 유기 광전자 소자용 조성물.

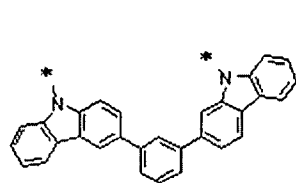
【청구항 8】

제6항에서,

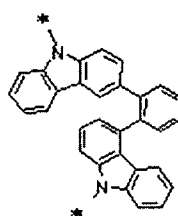
상기 화학식 2-I는 하기 그룹 3에 나열된 구조 중 하나이고, 상기 $*-Y^1$, Ar^1 , $*-Y^4$, Ar^4 는 하기 그룹 4에 나열된 치환기 중 하나인 유기 광전자 소자용 조성물:

[그룹 3]





C-14



C-15

[그룹 4]



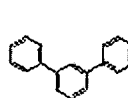
B-1



B-2



B-3



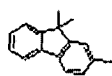
B-4



B-5



B-6



B-7



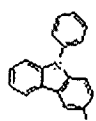
B-8



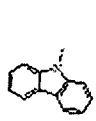
B-9



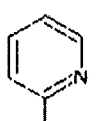
B-10



B-11



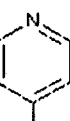
B-12



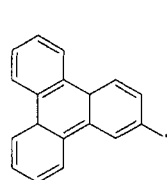
B-13



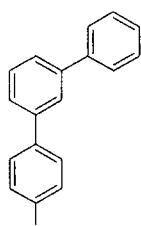
B-14



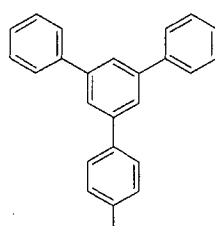
B-15



B-16



B-17



B-18

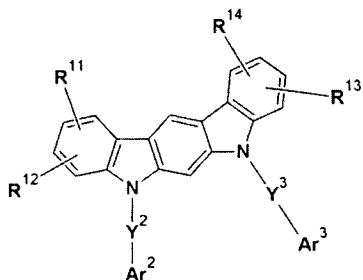
상기 그룹 3 및 그룹 4에서, *은 연결 지점이다.

【청구항 9】

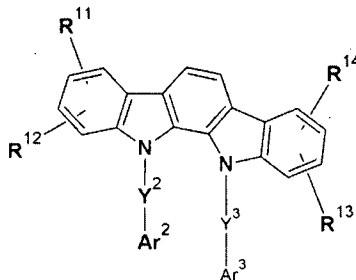
제1항에서,

상기 화학식 3으로 표현되는 모이어티와 상기 화학식 4로 표현되는 모이어티의 조합으로 이루어진 제2화합물은 하기 화학식 3-I 내지 3-V 중 적어도 하나로 표현되는 유기 광전자 소자용 조성물:

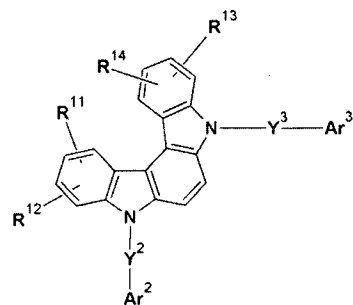
[화학식 3-I]



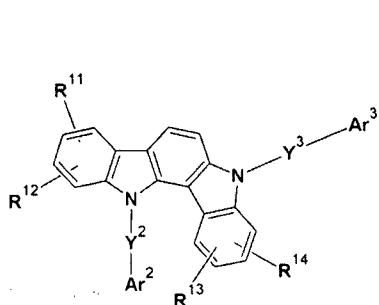
[화학식 3-II]



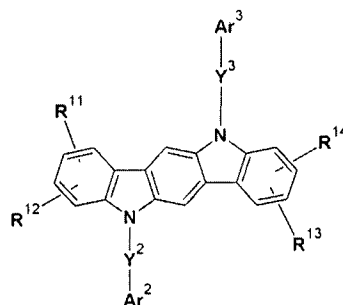
[화학식 3-III]



[화학식 3-VI]



[화학식 3-V]



상기 화학식 3-I 내지 3-V에서,

Y² 및 Y³는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C20 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

Ar² 및 Ar³는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

R¹¹ 내지 R¹⁴는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C50 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

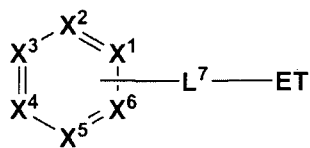
여기서, "치환"은 제1항에서 정의한 바와 같다.

【청구항 10】

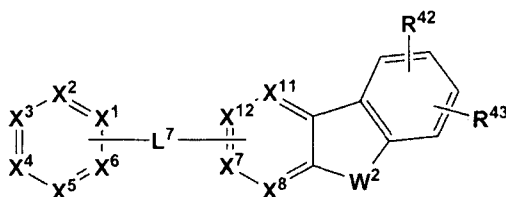
제1항에서,

상기 화학식 5는 하기 화학식 5-I 내지 5-III 중 어느 하나로 표현되는 유기 광전자 소자용 조성물:

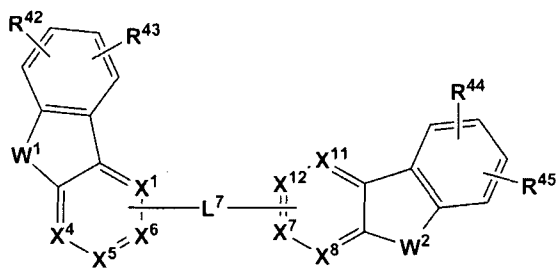
[화학식 5-I]



[화학식 5-II]



[화학식 5-III]



상기 화학식 5-I 내지 5-III에서,

X^1 내지 X^8 , X^{11} , 및 X^{12} 는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^d 이고,

X^1 , X^4 , X^5 및 X^6 중 적어도 하나는 N이고,

X^7 , X^8 , X^{11} 및 X^{12} 중 적어도 하나는 N이고,

W^1 및 W^2 는 각각 독립적으로 O 또는 S이고,

R^d 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 히드록시기, 티올기, 또는 이들의 조합이고,

R^d 는 각각 독립적으로 존재하거나, 인접한 R^d 는 서로 연결되어 고리를 형성하고,

R^{42} 내지 R^{45} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C50 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

L^7 은 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30

아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

ET는 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 또는 이들의 조합이고,

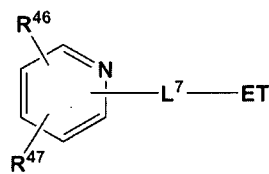
여기서, "치환"은 제1항에서 정의한 바와 같다.

【청구항 11】

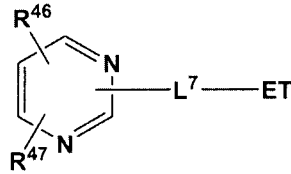
제10항에서,

상기 화학식 5-I은 하기 화학식 5-I-a 내지 5-I-f 중 어느 하나로 표현되는 유기 광전자 소자용 조성물:

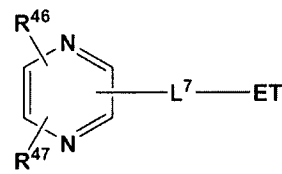
[화학식 5-I-a]



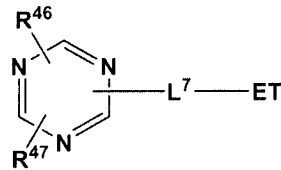
[화학식 5-I-b]



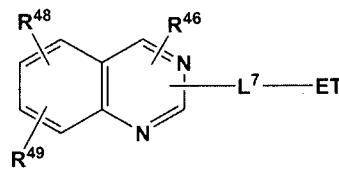
[화학식 5-I-c]



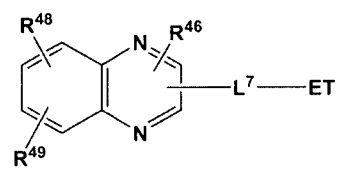
[화학식 5-I-d]



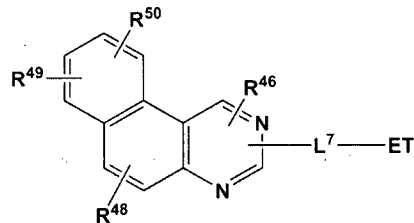
[화학식 5-I-e]



[화학식 5-I-f]



[화학식 5-I-f]



상기 화학식 5-I-a 내지 5-I-f에서,

R^{46} 내지 R^{50} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C50 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

L^7 은 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의

조합이고,

ET는 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 또는 이들의 조합이고,

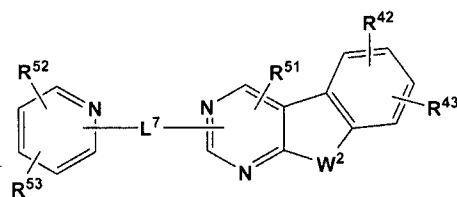
여기서, "치환"은 제1항에서 정의한 바와 같다.

【청구항 12】

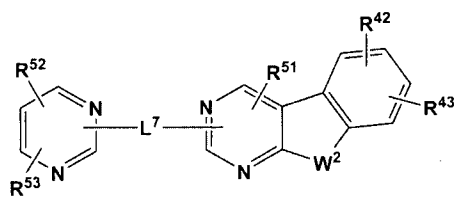
제10항에서,

상기 화학식 5-II는 하기 화학식 5-II-a 내지 5-II-n 중 어느 하나로 표현되는 유기 광전자 소자용 조성물:

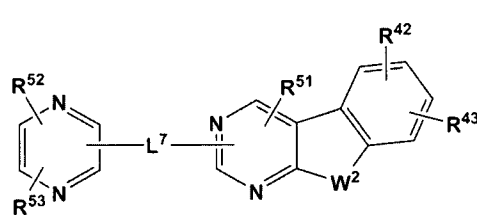
[화학식 5-II-a]



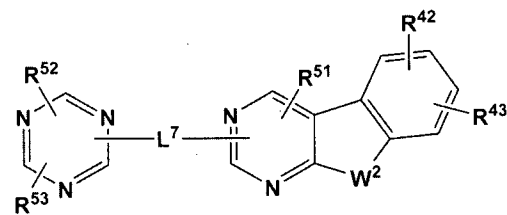
[화학식 5-II-b]



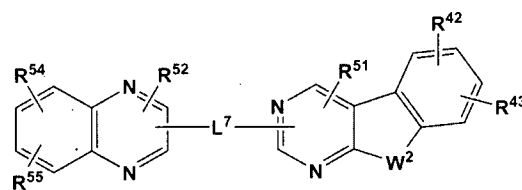
[화학식 5-II-c]



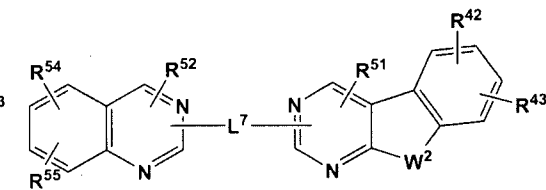
[화학식 5-II-d]



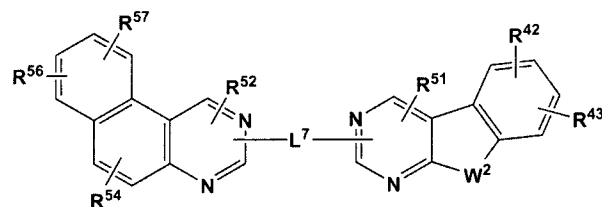
[화학식 5-II-e]



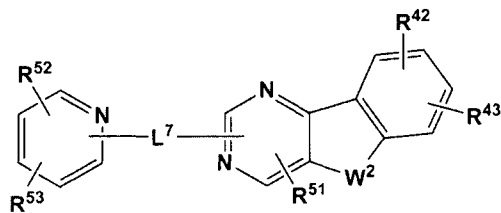
[화학식 5-II-f]



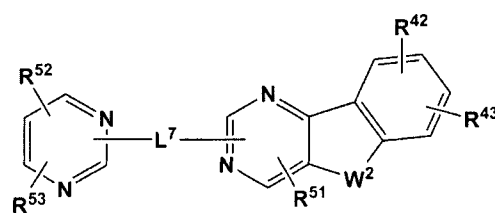
[화학식 5-II-g]



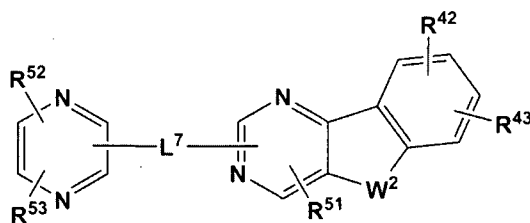
[화학식 5-II-h]



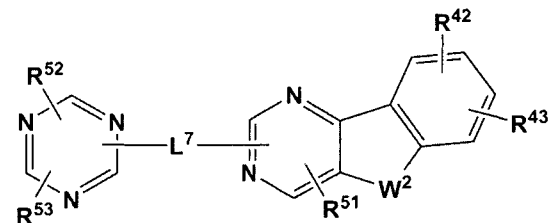
[화학식 5-II-i]



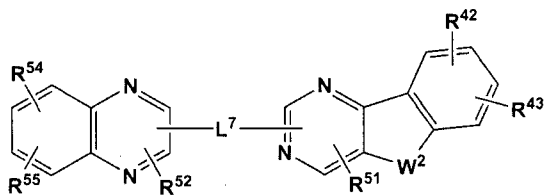
[화학식 5-II-j]



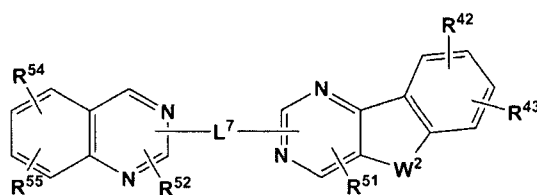
[화학식 5-II-k]



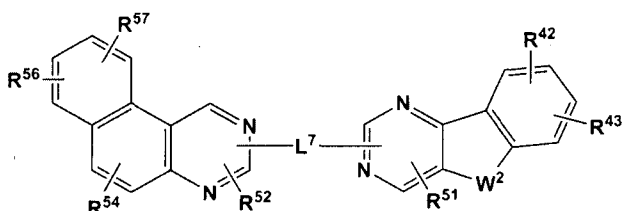
[화학식 5-II-l]



[화학식 5-II-m]



[화학식 5-II-n]



상기 화학식 5-II-a 내지 5-I-n에서,

W^2 는 O 또는 S이고,

R^{42} , R^{43} , R^{51} 내지 R^{57} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C50 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

L^7 은 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

ET는 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된

페난트롤리닐기, 또는 이들의 조합이고,

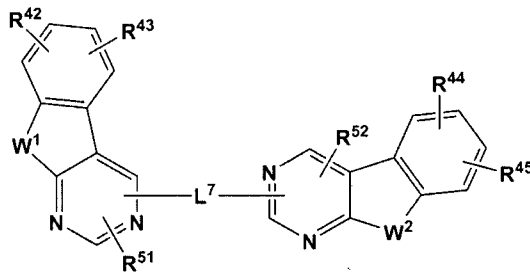
여기서, "치환"은 제1항에서 정의한 바와 같다.

【청구항 13】

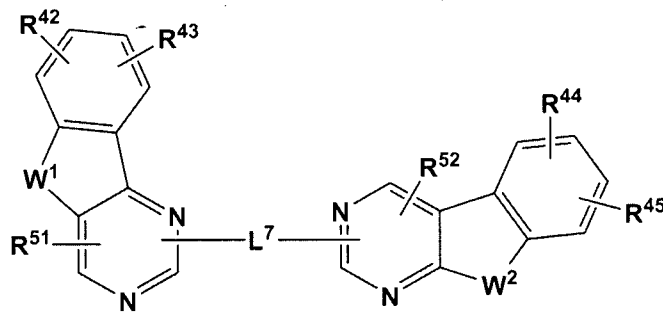
제10항에서,

상기 화학식 5-Ⅲ은 하기 화학식 5-Ⅲ-a 내지 5-Ⅲ-c 중 어느 하나로 표현되는 유기 광전자 소자용 조성물:

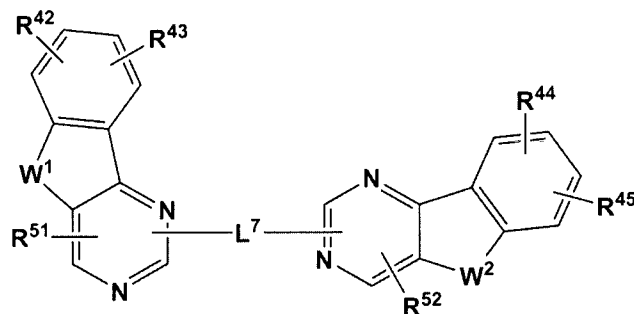
[화학식 5-Ⅲ-a]



[화학식 5-Ⅲ-b]



[화학식 5-Ⅲ-c]



상기 화학식 5-Ⅲ-a 내지 5-Ⅲ-c에서,

W^1 및 W^2 는 각각 독립적으로 O 또는 S이고,

R^{42} 내지 R^{45} , R^{51} , 및 R^{52} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C50 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C50 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

L^1 은 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

여기서, "치환"은 제1항에서 정의한 바와 같다.

【청구항 14】

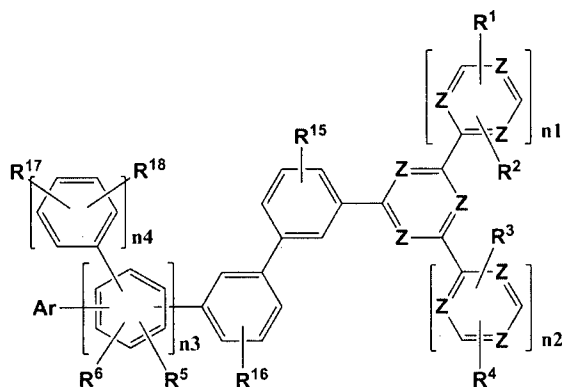
제1항에서,

상기 제1 화합물은 하기 화학식 1-I 또는 화학식 1-III로 표현되고,

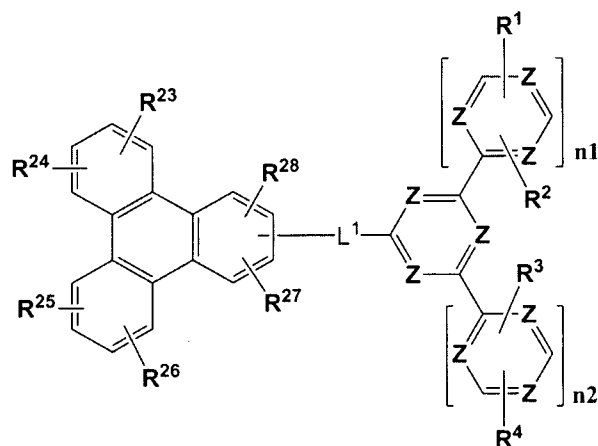
상기 제2 화합물은 하기 화학식 2-I로 표현되고,

상기 제3 화합물은 하기 화학식 5-I 또는 화학식 5-II로 표현되는 유기 광전자 소자용 조성물:

[화학식 1-I]



[화학식 1-III]



상기 화학식 1-I 및 1-III에서,

Z는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^a 이고,

Z 중 적어도 하나는 N 이고,

R^1 내지 R^6 , R^{15} 내지 R^{18} , R^{23} 내지 R^{28} , 및 R^a 는 각각 독립적으로 수소,

중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴기이고,

Ar은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

R^1 내지 R^6 , R^{15} 내지 R^{18} , R^{23} 내지 R^{28} , 및 R^a 는 각각 독립적으로 존재하거나 인접한 기는 서로 연결되어 고리를 형성하고,

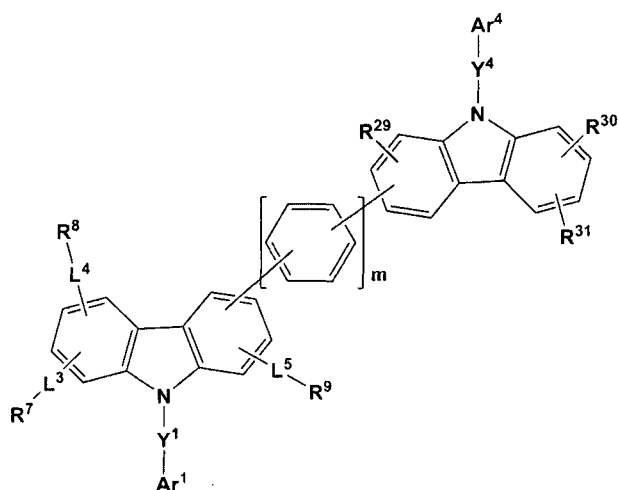
L^1 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 쿼터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 또는 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기이고,

$n1$ 은 1의 정수이고,

$n2$ 및 $n3$ 은 각각 독립적으로, 0 또는 1의 정수이고,

$n4$ 는 0 내지 2의 정수이고;

[화학식 2-I]



상기 화학식 2-I에서,

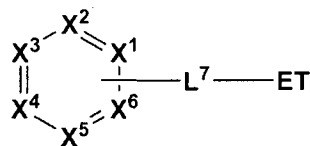
L^3 내지 L^5 , Y^1 , 및 Y^4 은 각각 독립적으로, 각각 독립적으로 단일 결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이고,

Ar^1 및 Ar^4 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고,

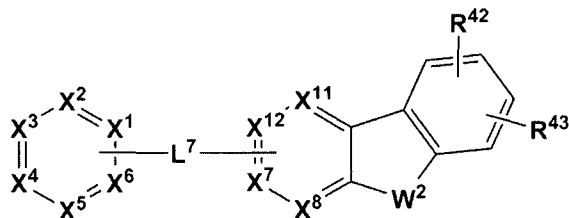
R^7 내지 R^9 및 R^{29} 내지 R^{31} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C50 아릴기이고,

m은 0 또는 1의 정수이고;

[화학식 5-I]



[화학식 5-II]



상기 화학식 5-I 및 5-II에서,

X^1 내지 X^8 , X^{11} , 및 X^{12} 는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^d 이고,

X^1 , X^4 , X^5 및 X^6 중 적어도 하나는 N이고,

X^7 , X^8 , X^{11} 및 X^{12} 중 적어도 하나는 N이고,

W^1 및 W^2 는 각각 독립적으로 O 또는 S이고,

R^{42} , R^{43} , 및 R^d 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

R^d 는 각각 독립적으로 존재하거나, 인접한 R^d 는 서로 연결되어 고리를 형성하고,

L^7 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 쿼터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 또는 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기이고,

ET는 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 또는 이들의 조합이고,

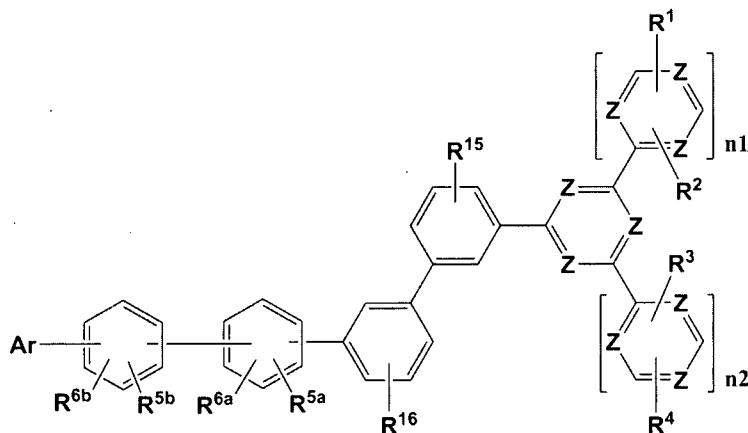
여기서, "치환"은 제1항에서 정의한 바와 같다.

【청구항 15】

제14항에서,

상기 제1 화합물은 하기 화학식 1- I B 또는 1-III A로 표현되는 유기 광전자 소자용 조성물:

[화학식 1- I B]



상기 화학식 1- I B에서,

Z는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^a이고,

Z 중 적어도 하나는 N 이고,

R¹ 내지 R⁴, R¹⁵, R¹⁶, R^{5a}, R^{6a}, R^{5b}, 및 R^{6b}는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴기이고,

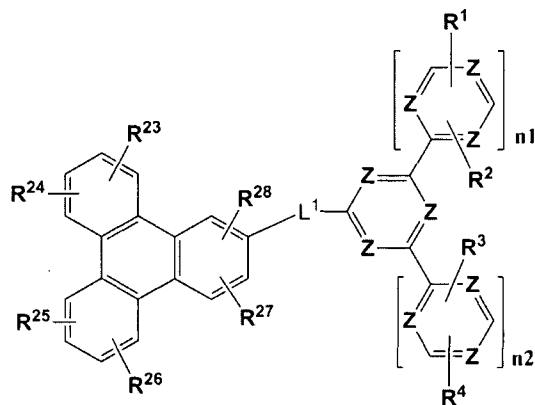
Ar은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

R^{5a} 및 R^{6a}, 그리고 R^{5b} 및 R^{6b}은 각각 독립적으로 존재하거나 인접한 기는 서로 연결되어 고리를 형성하고,

n₁은 1의 정수이고,

n₂은 0 또는 1의 정수이고;

[화학식 1-ⅢA]



상기 화학식 1-ⅢA에서,

Z는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^a이고,

Z 중 적어도 하나는 N 이고,

R¹ 내지 R⁴, R²³ 내지 R²⁸, 및 R^a는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C12 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 또는 이들의 조합이고,

R¹ 내지 R⁴, 및 R^a는 각각 독립적으로 존재하거나, 인접한 기는 서로 연결되어 고리를 형성하고,

L¹은 단일결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 쿼터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 또는 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기이고,

n1은 1의 정수이고,

n2는 0 또는 1의 정수이고;

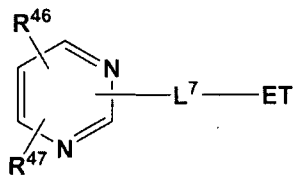
여기서, "치환"은 제1항에서 정의한 바와 같다.

【청구항 16】

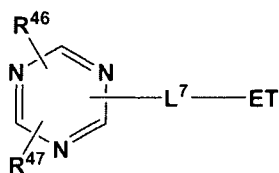
제14항에서,

상기 제3 화합물은 하기 화학식 5- I -b, 화학식 5- I -d, 또는 화학식 5-Ⅱ-d로 표현되는 유기 광전자 소자용 조성물:

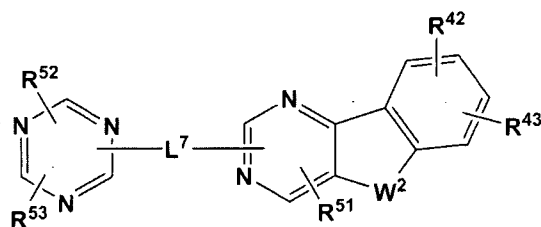
[화학식 5-I-b]



[화학식 5-I-d]



[화학식 5-II-k]



상기 화학식 5-I-b, 화학식 5-I-d, 및 화학식 5-II-k에서,

W^2 는 O 또는 S이고,

R^{42} , R^{43} , R^{46} , R^{47} , 및 R^{51} 내지 R^{53} 은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이고,

L^7 은 단일결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 쿼터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 또는 치환 또는 비치환된 펜탄트레닐렌기이고,

ET는 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 펜난트롤리닐기, 또는 이들의 조합이고,

여기서, "치환"은 제1항에서 정의한 바와 같다.

【청구항 17】

제1항에서,

인광 도펀트를 더 포함하는 유기광전자소자용 조성물.

【청구항 18】

서로 마주하는 애노드와 캐소드, 그리고

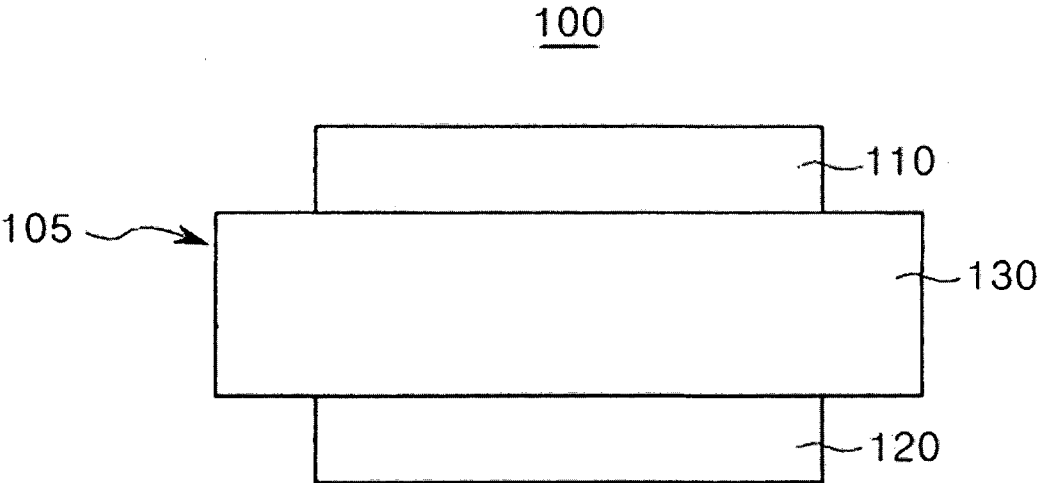
상기 애노드와 상기 캐소드 사이에 위치하는 적어도 1층의 유기층
을 포함하고,

상기 유기층은 제1항 내지 제17항 중 어느 한 항에 따른 유기 광전자
소자용 조성물을 포함하는 유기 광전자 소자.

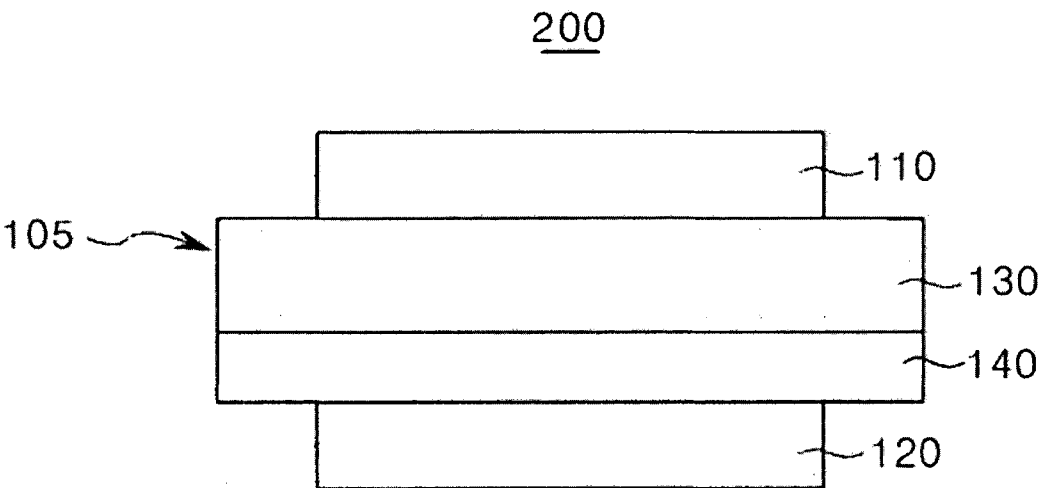
【청구항 19】

제18항에 따른 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치.

[Fig. 1]



[Fig. 2]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2016/004610**A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER*****C09K 11/06(2006.01)i, C07D 251/12(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i***

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C09K 11/06; H05B 33/12; C07D 213/06; C07D 251/24; C07D 251/14; C07D 213/127; C07D 253/02; C07D 251/12; H01L 51/00

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) & Keywords: organic optoelectronic device, host, triazine, carbazole

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	KR 10-2015-0028579 A (CHEIL INDUSTRIES INC.) 16 March 2015 See abstract, claims 1 to 18 and table 1.	1-19
A	WO 2014-185595 A1 (CHEIL INDUSTRIES INC.) 20 November 2014 See abstract, claims 1 to 13.	1-19
A	KR 10-2010-0131745 A (CHEIL INDUSTRIES INC.) 16 December 2010 See abstract, claims 1 to 16.	1-19
A	WO 2010-067894 A1 (CANON KABUSHIKI KAISHA) 17 June 2010 See abstract, claims 1 to 5.	1-19
A	KR 10-2014-0014959 A (PNH TECH.) 06 February 2014 See abstract, claims 1 to 8.	1-19
A	WO 2012-163465 A1 (MERCK PATENT GMBH.) 06 December 2012 See abstract, claims 1 to 12.	1-19
A	CN 101654430 A (PEKING UNIVERSITY) 24 February 2010 See abstract, claims 1 to 10.	1-19



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

“E” earlier application or patent but published on or after the international filing date

“L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

“O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

“P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

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

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

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

“&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

29 JULY 2016 (29.07.2016)

Date of mailing of the international search report

29 JULY 2016 (29.07.2016)

Name and mailing address of the ISA/KR

Korean Intellectual Property Office
Government Complex-Daejeon, 189 Seonsa-ro, Daejeon 302-701,
Republic of Korea

Facsimile No. 82-42-472-7140

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2016/004610

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2015-0028579 A	16/03/2015	KR 10-2016-0054448 A TW 201509915 A TW 1500604 B US 2016-0126472 A1 WO 2015-034125 A1	16/05/2016 16/03/2015 21/09/2015 05/05/2016 12/03/2015
WO 2014-185595 A1	20/11/2014	CN 105143398 A KR 10-2014-0135525 A TW 201444951 A US 2015-0340618 A1	09/12/2015 26/11/2014 01/12/2014 26/11/2015
KR 10-2010-0131745 A	16/12/2010	KR 10-1297162 B1	21/08/2013
WO 2010-067894 A1	17/06/2010	JP 2010-138121A US 2011-0240983 A1 US 8765270 B2	24/06/2010 06/10/2011 01/07/2014
KR 10-2014-0014959 A	06/02/2014	NONE	
WO 2012-163465 A1	06/12/2012	CN 103619986 A EP 2714841 A1 EP 2714841 B1 JP 2014-522569 A KR 10-2014-0048189 A US 2014-0088305 A1 US 9118022 B2	05/03/2014 09/04/2014 22/06/2016 04/09/2014 23/04/2014 27/03/2014 25/08/2015
CN 101654430 A	24/02/2010	CN 101654430 B	07/09/2011

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C09K 11/06(2006.01)i, C07D 251/12(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

C09K 11/06; H05B 33/12; C07D 213/06; C07D 251/24; C07D 251/14; C07D 213/127; C07D 253/02; C07D 251/12; H01L 51/00

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) & 키워드: 유기 광전자 소자, 호스트, 트리아진, 카바졸

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
A	KR 10-2015-0028579 A (제일모직주식회사) 2015.03.16 요약, 청구항 1 내지 18 및 표 1 참조.	1-19
A	WO 2014-185595 A1 (CHEIL INDUSTRIES INC.) 2014.11.20 요약, 청구항 1 내지 13 참조.	1-19
A	KR 10-2010-0131745 A (제일모직주식회사) 2010.12.16 요약, 청구항 1 내지 16 참조.	1-19
A	WO 2010-067894 A1 (CANON KABUSHIKI KAISHA) 2010.06.17 요약, 청구항 1 내지 5 참조.	1-19
A	KR 10-2014-0014959 A ((주)피엔에이치테크) 2014.02.06 요약, 청구항 1 내지 8 참조.	1-19
A	WO 2012-163465 A1 (MERCK PATENT GMBH) 2012.12.06 요약, 청구항 1 내지 12 참조.	1-19
A	CN 101654430 A (PEKING UNIVERSITY) 2010.02.24 요약, 청구항 1 내지 10 참조.	1-19

☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.

☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

“A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌

“T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌

“E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌

“X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.

“L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌

“Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.

“O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌

“&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

“P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

국제조사의 실제 완료일

2016년 07월 29일 (29.07.2016)

국제조사보고서 발송일

2016년 07월 29일 (29.07.2016)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소

대한민국 특허청
(35208) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)

팩스 번호 +82-42-481-8578

심사관

오세주

전화번호 +82-42-481-5596



국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2015-0028579 A	2015/03/16	KR 10-2016-0054448 A TW 201509915 A TW I500604 B US 2016-0126472 A1 WO 2015-034125 A1	2016/05/16 2015/03/16 2015/09/21 2016/05/05 2015/03/12
WO 2014-185595 A1	2014/11/20	CN 105143398 A KR 10-2014-0135525 A TW 201444951 A US 2015-0340618 A1	2015/12/09 2014/11/26 2014/12/01 2015/11/26
KR 10-2010-0131745 A	2010/12/16	KR 10-1297162 B1	2013/08/21
WO 2010-067894 A1	2010/06/17	JP 2010-138121A US 2011-0240983 A1 US 8765270 B2	2010/06/24 2011/10/06 2014/07/01
KR 10-2014-0014959 A	2014/02/06	없음	
WO 2012-163465 A1	2012/12/06	CN 103619986 A EP 2714841 A1 EP 2714841 B1 JP 2014-522569 A KR 10-2014-0048189 A US 2014-0088305 A1 US 9118022 B2	2014/03/05 2014/04/09 2016/06/22 2014/09/04 2014/04/23 2014/03/27 2015/08/25
CN 101654430 A	2010/02/24	CN 101654430 B	2011/09/07