

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2016 년 9 월 22 일 (22.09.2016)



(10) 국제공개번호
WO 2016/148425 A2

- (51) 국제특허분류:
C07D 307/91 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
C07D 333/76 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2016/002300
- (22) 국제출원일: 2016 년 3 월 8 일 (08.03.2016)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2015-0036231 2015 년 3 월 16 일 (16.03.2015) KR
- (71) 출원인: 덕산네오룩스 주식회사 (DUK SAN NEOLUX CO.,LTD.) [KR/KR]; 31027 충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32, Chungcheongnam-do (KR).
- (72) 발명자: 변윤선 (BYUN, Yun-sun); 41945 대구시 중구 달구벌대로 447 길 77, 107 동 2405 호 (삼덕동 3 가, 삼덕청아파트리슈빌아파트), Daegu (KR). 박정철 (PARK, Jungcheol); 16543 경기도 수원시 영통구 효원로 363, 105 동 1804 호 매탄 3 동 매탄위브하늘채 아파트,

Gyeonggi-do (KR). 윤진호 (YUN, Jinho); 31044 충청남도 천안시 서북구 성거읍 천흥 3 길 21 신비텔 13 동 405 호, Chungcheongnam-do (KR). 최승원 (CHOI, Seung-won); 16909 경기도 용인시 기흥구 연원로 42 번 길 2, 119 동 203 호 (마북동, 연원마을벽산아파트), Gyeonggi-do (KR). 김효진 (KIM, Hyojin); 31163 경상남도 천안시 서북구 불당 17 길 14, 113 동 1201 호 (불당동, 아이파크), Gyeongsangnam-do (KR). 최연희 (CHOI, Yeonhee); 31044 충청남도 천안시 서북구 성거읍 천흥 3 길 17 신비텔 9 동 405 호, Chungcheongnam-do (KR). 이규민 (LEE, Gyumin); 31027 충청남도 천안시 서북구 입장면 외유리 1 길 19-1, Chungcheongnam-do (KR).

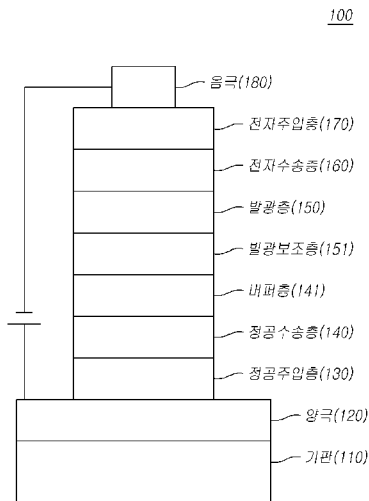
(74) 대리인: 김정은 (KIM, Jeongeun); 06235 서울시 강남구 테헤란로 16 길 13, 동원빌딩 210 호, Seoul (KR).

(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,

[다음 쪽 계속]

(54) Title: COMPOUND FOR ORGANIC ELECTRIC DEVICE, ORGANIC ELECTRIC DEVICE USING SAME, AND ELECTRONIC APPARATUS FOR SAME

(54) 발명의 명칭: 유기전기 소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치



- 110 ... Substrate
120 ... Positive electrode
130 ... Hole injection layer
140 ... Hole transport layer
141 ... Buffer layer
150 ... Light emitting layer
151 ... Light emitting auxiliary layer
160 ... Electron transport layer
170 ... Electron injection layer
180 ... Negative electrode

(57) Abstract: The present invention provides a compound represented by Chemical Formula 1. In addition, the present invention provides an organic electric device including a first electrode, a second electrode, and an organic layer between the first electrode and the second electrode, wherein the organic layer includes the compound represented by Chemical Formula 1. If the compound represented by Chemical Formula 1 is included in an organic layer of an organic electric device, the driving voltage can be reduced, and the light emitting efficiency, color purity, and lifespan can be improved.

(57) 요약서: 본 발명은 화학식 1 로 표시되는 화합물을 제공한다. 또한, 제 1 전극, 제 2 전극 및 상기 제 1 전극과 상기 제 2 전극 사이의 유기물층을 포함하는 유기전기소자를 제공하며, 상기 유기물층은 화학식 1 로 표시되는 화합물을 포함한다. 유기전기소자의 유기물층에 화학식 1 로 표시되는 화합물이 포함되면, 구동전압이 감소되고, 발광효율, 색순도 및 수명 등이 향상될 수 있다.



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).

공개:

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

명세서

발명의 명칭: 유기전기 소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치

기술분야

- [1] 본 발명은 유기전기소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치에 관한 것이다.

배경기술

- [2] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛 에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기전기소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물 층은 유기전기소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.
- [3] 유기전기소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광재료와 전하수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다.
- [4] 현재 휴대용 디스플레이 시장은 대면적 디스플레이로 그 크기가 증가하고 있는 추세이며, 이로 인해 기존 휴대용 디스플레이에서 요구하던 소비전력보다 더 큰 소비전력이 요구되고 있다. 따라서, 배터리라든 제한적인 전력 공급원을 가지고 있는 휴대용 디스플레이 입장에서는 소비전력이 중요한 요소가 되었고, 효율과 수명 문제 또한 반드시 해결해야 하는 중요한 요소이다.
- [5] 효율과 수명, 구동전압 등은 서로 연관이 있으며, 효율이 증가되면 상대적으로 구동전압이 떨어지고, 구동전압이 떨어지면서 구동시 발생하는 주울열(Joule heating)에 의한 유기물질의 결정화가 적어져 결과적으로 수명이 늘어나는 경향을 나타낸다. 하지만 상기 유기물층을 단순히 개선한다고 하여 효율을 극대화시킬 수는 없다. 왜냐하면 각 유기물층 간의 에너지 준위 및 T1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있기 때문이다.
- [6] 또한 최근 유기전기발광소자에 있어서 정공 수송층에서의 발광문제 및 구동전압 문제를 해결하기 위해서 정공 수송층과 발광층 사이에 발광보조층(다층의 정공수송층)이 존재하여야 하며, 각각의 발광층에 따른 서로 다른 발광 보조층의 개발이 필요한 시점이다.
- [7] 일반적으로 전자수송층에서 발광층으로 전자(electron)가 전달되고 정공(hole)이 정공수송층에서 발광층으로 전달되어 발광층 내에서 재조합(recombination)이 이루어져 엑시톤(exciton)을 형성하게 된다. 하지만 낮은

구동전압을 만들기 위해 정공 이동도(hole mobility)가 빠른 물질을 사용할 경우 양성 폴라론(Polaron)이 발광층과 정공수송층 계면에 쌓이게 되며, 이로 인해 계면열화가 발생하여, 수명 및 효율을 감소시키며, 또한 발광층 내 전하균형(Charge Balance)이 맞지 않아 발광층 내 잉여 폴라론(Polaron)이 발광물질의 약한 결합(bonding)을 공격하여 발광물질이 변형되므로 수명 및 효율 감소, 색순도 저하 등의 현상을 나타내고 있다.

- [8] 따라서 발광보조층은 상기 정공수송층과 발광층 사이에 존재하여 양성 폴라론(Polaron)이 발광층 계면에 쌓이는 것을 방지하기 위해 발광층과 정공수송층 사이의 알맞은 HOMO 값을 갖는 물질이어야 하며, 발광층 내 전하균형(Charge Balance)을 증가시키기 위해, 적당한 구동전압 범위 내(full device의 ble 소자 구동전압 범위 내) 정공 이동도(hole mobility)를 갖는 물질이어야 한다.
- [9] 하지만 이는 단순히 발광 보조층 물질의 코어에 대한 구조적 특성으로 이루어질 수 없으며, 발광 보조층 물질의 코어 및 sub-치환기의 특성 그리고 발광보조층과 정공수송층, 발광보조층과 발광층 간의 알맞은 조합이 이루어졌을 때 고효율 및 고수명의 소자가 구현될 수 있는 것이다.
- [10] 즉, 유기전기소자가 갖는 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질, 발광보조층 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하며 특히 발광보조층과 정공수송층의 재료에 대한 개발이 절실히 요구되고 있다.

발명의 상세한 설명

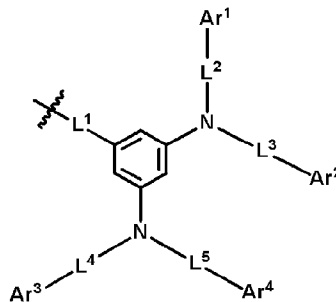
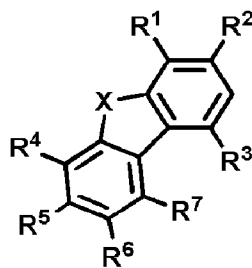
기술적 과제

- [11] 본 발명은 상기와 같은 종래의 문제점을 해결하기 위하여 제안된 것으로, 효율적인 전자저지능력 및 정공수송능력을 갖는 화합물을 제공함과 동시에, 이러한 화합물을 이용하여 소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압, 고내열성, 색순도 및 수명 등을 향상시킬 수 있는 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

- [12] 일 측면에서, 본 발명은 하기 화학식으로 표시되는 화합물을 제공한다. 하기 화학식은 코어(디벤조퓨란 또는 디벤조티오펜)와 2개의 아민기가 연결기로 결합된 화합물을 나타내며, 하기 화학식 1의 R¹ 내지 R³ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2이다.
- [13] <화학식 1> <화학식 2>

[14]



[15] 다른 측면에서, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공한다.

발명의 효과

[16] 본 발명에 따르면, 코어에 연결되는 연결기의 종류와, 연결기에 결합되는 아민기의 종류, 결합위치 및 개수 등을 한정된 특정 화합물을 유기전기소자의 재료로 이용함으로써, 발광층 내에 전하균형을 이루기에 용이한 호모(HOMO) 에너지 레벨과 높은 T1 값 등으로 인해, 유기전기소자의 발광효율, 내열성, 색순도, 수명 등을 향상시킬 수 있고 구동전압을 낮출 수 있다.

도면의 간단한 설명

[17] 도 1은 본 발명에 따른 유기전기발광소자의 예시도이다.

[18] [부호의 설명]

[19] 100: 유기전기소자 110: 기판

[20] 120: 제 1전극 130: 정공주입층

[21] 140: 정공수송층 141: 버퍼층

[22] 150: 발광층 151: 발광보조층

[23] 160: 전자수송층 170: 전자주입층

[24] 180: 제 2전극

발명의 실시를 위한 형태

[25] 이하, 본 발명의 실시예를 첨부된 도면을 참조하여 상세하게 설명한다.

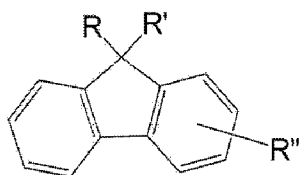
[26] 각 도면의 구성요소들에 참조부호를 부가함에 있어서, 동일한 구성요소들에 대해서는 비록 다른 도면상에 표시되더라도 가능한 한 동일한 부호를 가지도록 하고 있음에 유의해야 한다. 또한, 본 발명을 설명함에 있어, 관련된 공지 구성 또는 기능에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명은 생략한다.

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

"연결", "결합" 또는 "접속"될 수도 있다고 이해되어야 할 것이다.

- [28] 또한, 층, 막, 영역, 판 등의 구성 요소가 다른 구성 요소 "위에" 또는 "상에" 있다고 하는 경우, 이는 다른 구성 요소 "바로 위에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 구성 요소가 있는 경우도 포함할 수 있다고 이해되어야 할 것이다. 반대로, 어떤 구성 요소가 다른 부분 "바로 위에" 있다고 하는 경우에는 중간에 또 다른 부분이 없는 것을 뜻한다고 이해되어야 할 것이다.
- [29] 본 명세서 및 첨부된 청구의 범위에서 사용된 바와 같이, 달리 언급하지 않는 한, 하기 용어의 의미는 하기와 같다.
- [30] 본 명세서에서 사용된 용어 "할로" 또는 "할로젠"은 다른 설명이 없는 한 불소(F), 브롬(Br), 염소(Cl) 또는 요오드(I)이다.
- [31] 본 발명에 사용된 용어 "알킬" 또는 "알킬기"는 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수의 단일결합을 가지며, 직쇄 알킬기, 분지쇄 알킬기, 사이클로알킬(지환족)기, 알킬-치환된 사이클로알킬기, 사이클로알킬-치환된 알킬기를 비롯한 포화 지방족 작용기의 라디칼을 의미한다.
- [32] 본 발명에 사용된 용어 "할로알킬기" 또는 "할로젠알킬기"는 다른 설명이 없는 한 할로젠으로 치환된 알킬기를 의미한다.
- [33] 본 발명에 사용된 용어 "알켄일기" 또는 "알킨일기"는 다른 설명이 없는 한 각각 2 내지 60의 탄소수의 이중결합 또는 삼중결합을 가지며, 직쇄형 또는 측쇄형 사슬기를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [34] 본 발명에 사용된 용어 "시클로알킬"은 다른 설명이 없는 한 3 내지 60의 탄소수를 갖는 고리를 형성하는 알킬을 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [35] 본 발명에 사용된 용어 "알콕실기", "알콕시기", 또는 "알킬옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 알킬기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [36] 본 발명에 사용된 용어 "아릴옥실기" 또는 "아릴옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 아릴기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [37] 본 발명에 사용된 용어 "플루오렌일기" 또는 "플루오렌일렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 하기 구조에서 R, R' 및 R"이 모두 수소인 1가 또는 2가 작용기를 의미하며, "치환된 플루오렌일기" 또는 "치환된 플루오렌일렌기"는 치환기 R, R', R" 중 적어도 하나가 수소 이외의 치환기인 것을 의미하며, R과 R'이 서로 결합되어 이들이 결합된 탄소와 함께 스파이로 화합물을 형성한 경우를 포함한다.

[38]

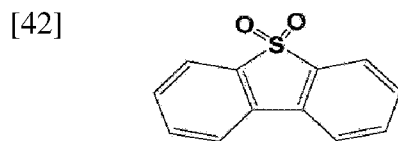


[39] 본 발명에 사용된 용어 "아릴기" 및 "아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 6

내지 60의 탄소수를 가지며, 이에 제한되는 것은 아니다. 본 발명에서 아릴기 또는 아릴렌기는 단일고리형, 고리집합체, 접합된 여러 고리계, 스파이로 화합물 등을 포함한다.

- [40] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로고리기"는 "헤테로아릴기" 또는 "헤테로아릴렌기"와 같은 방향족 고리뿐만 아니라 비방향족 고리도 포함하며, 다른 설명이 없는 한 각각 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 탄소수 2 내지 60의 고리를 의미하나 여기에 제한되는 것은 아니다. 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로원자"는 다른 설명이 없는 한 N, O, S, P 또는 Si를 나타내며, 헤테로고리기는 헤테로원자를 포함하는 단일고리형, 고리집합체, 접합된 여러 고리계, 스파이로 화합물 등을 의미한다.

- [41] 또한 "헤테로고리기"는, 고리를 형성하는 탄소 대신 SO₂를 포함하는 고리도 포함할 수 있다. 예컨대, "헤테로고리기"는 다음 화합물을 포함한다.

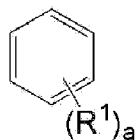


- [43] 본 발명에서 사용된 용어 "고리"는 단일환 및 다환을 포함하며, 탄화수소고리는 물론 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 헤테로고리를 포함하고, 방향족 및 비방향족 고리를 포함한다.
- [44] 본 발명에서 사용된 용어 "다환"은 바이페닐, 터페닐 등과 같은 고리 집합체(ring assemblies), 접합된(fused) 여러 고리계 및 스파이로 화합물을 포함하며, 방향족뿐만 아니라 비방향족도 포함하고, 탄화수소고리는 물론 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 헤테로고리를 포함한다.
- [45] 본 발명에서 사용된 용어 "고리 집합체(ring assemblies)"는 둘 또는 그 이상의 고리계(단일고리 또는 접합된 고리계)가 단일결합이나 또는 이중결합을 통해서 서로 직접 연결되어 있고 이와 같은 고리 사이의 직접 연결의 수가 이 화합물에 들어 있는 고리계의 총 수보다 1개가 적은 것을 의미한다. 고리 집합체는 동일 또는 상이한 고리계가 단일결합이나 이중결합을 통해 서로 직접 연결될 수 있다.
- [46] 본 발명에서 사용된 용어 "접합된 여러 고리계"는 적어도 두개의 원자의 공유하는 접합된(fused) 고리 형태를 의미하며, 둘 이상의 탄화수소류의 고리계가 접합된 형태 및 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 헤테로고리계가 적어도 하나 접합된 형태 등을 포함한다. 이러한 접합된 여러 고리계는 방향족고리, 헤테로방향족고리, 지방족 고리 또는 이들 고리의 조합일 수 있다.
- [47] 본 발명에서 사용된 용어 "스파이로 화합물"은 '스파이로 연결(spiro union)'을 가지며, 스파이로 연결은 2개의 고리가 오로지 1개의 원자를 공유함으로써 이루어지는 연결을 의미한다. 이때, 두 고리에 공유된 원자를 '스파이로 원자'라 하며, 한 화합물에 들어 있는 스파이로 원자의 수에 따라 이들을 각각

'모노스파이로-', '다이스파이로-', '트라이스파이로-' 화합물이라 한다.

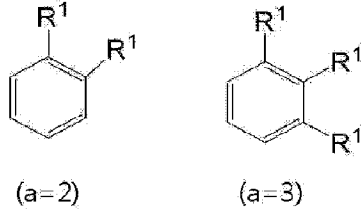
- [48] 또한 접두사가 연속으로 명명되는 경우 먼저 기재된 순서대로 치환기가 나열되는 것을 의미한다. 예를 들어, 아릴알콕시기의 경우 아릴기로 치환된 알콕시기를 의미하며, 알콕시카르보닐기의 경우 알콕시기로 치환된 카르보닐기를 의미하며, 또한 아릴카르보닐알켄일기의 경우 아릴카르보닐기로 치환된 알켄일기를 의미하며 여기서 아릴카르보닐기는 아릴기로 치환된 카르보닐기이다.
- [49] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용된 용어 "치환 또는 비치환된"에서 "치환"은 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C_1 - C_{20} 의 알킬기, C_1 - C_{20} 의 알콕시기, C_1 - C_{20} 의 알킬아민기, C_1 - C_{20} 의 알킬티오펜기, C_6 - C_{20} 의 아릴티오펜기, C_2 - C_{20} 의 알켄일기, C_2 - C_{20} 의 알킨일기, C_3 - C_{20} 의 시클로알킬기, C_6 - C_{20} 의 아릴기, 중수소로 치환된 C_6 - C_{20} 의 아릴기, C_8 - C_{20} 의 아릴알켄일기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, 및 O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2 - C_{20} 의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환됨을 의미하며, 이들 치환기에 제한되는 것은 아니다.
- [50] 본 명세서에서 각 기호 및 그 치환기의 예로 예시되는 아릴기, 아릴렌기, 헤테로고리기 등에 해당하는 '기 이름'은 '가수를 반영한 기의 이름'을 기재할 수도 있지만, '모체화합물 명칭'으로 기재할 수도 있다. 예컨대, 아릴기의 일종인 '페난트렌'의 경우, 1가의 '기'는 '페난트릴(기)'로 2가의 기는 '페난트릴렌(기)' 등과 같이 가수를 구분하여 기의 이름을 기재할 수도 있지만, 가수와 상관없이 모체 화합물 명칭인 '페난트렌'으로 기재할 수도 있다. 유사하게, 피리미딘의 경우에도, 가수와 상관없이 '피리미딘'으로 기재하거나, 1가인 경우에는 피리미딘일(기), 2가의 경우에는 피리미딘일렌(기) 등과 같이 해당 가수의 '기의 이름'으로 기재할 수도 있다.
- [51] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용되는 화학식은 하기 화학식의 지수 정의에 의한 치환기 정의와 동일하게 적용된다.

[52]



- [53] 여기서, a 가 0의 정수인 경우 치환기 R^1 은 부존재하며, a 가 1의 정수인 경우 하나의 치환기 R^1 은 벤젠 고리를 형성하는 탄소 중 어느 하나의 탄소에 결합하며, a 가 2 또는 3의 정수인 경우 각각 다음과 같이 결합하며 이때 R^1 은 서로 동일하거나 다를 수 있으며, a 가 4 내지 6의 정수인 경우 이와 유사한 방식으로 벤젠 고리의 탄소에 결합하며, 한편 벤젠 고리를 형성하는 탄소에 결합된 수소의 표시는 생략한다.

[54]



[55] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기소자에 대한 예시도이다.

[56] 도 1을 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기소자(100)는 기판(110) 상에 형성된 제 1전극(120), 제 2전극(180) 및 제 1전극(120)과 제 2전극(180) 사이에 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 유기물층을 구비한다. 이때, 제 1전극(120)은 애노드(양극)이고, 제 2전극(180)은 캐소드(음극)일 수 있으며, 인버트형의 경우에는 제 1전극이 캐소드이고 제 2전극이 애노드일 수 있다.

[57] 유기물층은 제 1전극(120) 상에 순차적으로 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160) 및 전자주입층(170)을 포함할 수 있다. 이때, 이들 층 중 적어도 하나가 생략되거나, 정공저지층, 전자저지층, 발광보조층(151), 전자수송보조층, 버퍼층(141) 등을 더 포함할 수도 있고, 전자수송층(160) 등이 정공저지층의 역할을 할 수도 있을 것이다.

[58] 또한, 미도시하였지만, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기소자는 제 1전극과 제 2전극 중 적어도 일면 중 상기 유기물층과 반대되는 일면에 형성된 보호층 또는 광효율 개선층(Capping layer)을 더 포함할 수 있다.

[59] 상기 유기물층에 적용되는 본 발명의 일 실시예에 따른 화합물은 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광보조층(151), 전자수송보조층, 전자수송층(160), 전자주입층(170), 광효율개선층 등의 재료로 사용되거나, 발광층(150)의 호스트 또는 도펀트 재료로 사용될 수 있을 것이다. 예컨대, 본 발명의 화합물은 발광층(150), 정공수송층(140) 및/또는 발광보조층(151) 재료로 사용될 수 있으며, 바람직하게는 정공수송층(140) 및/또는 발광보조층(151) 재료로 사용될 수 있다.

[60] 한편, 동일한 모핵일지라도 어느 위치에 어느 치환기를 결합시키냐에 따라 밴드갭(band gap), 전기적 특성, 계면 특성 등이 달라질 수 있으므로, 코어의 선택 및 이에 결합된 서브(sub)-치환체의 조합에 대한 연구가 필요하며, 특히 각 유기물층 간의 에너지 준위 및 T_1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있다.

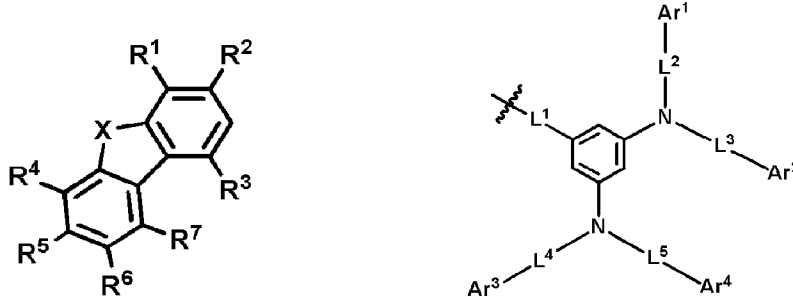
[61] 이미 설명한 것과 같이, 일반적으로 유기전기 발광소자에 있어 정공수송층에서의 발광 문제를 해결하기 위해서는 정공수송층과 발광층 사이에 발광보조층이 형성하는 것이 바람직하며, 각각의 발광층(R, G, B)에 따른 서로 다른 발광보조층의 개발이 필요하다.

[62] 한편, 발광보조층의 경우 정공수송층 및 발광층(호스트)과의 상호관계를 파악해야하므로 유사한 코어를 사용하더라도 사용되는 유기물층이 달라지면 그 특징을 유추하기는 매우 어려울 것이다.

- [63] 따라서, 본 발명에서는 화학식 1로 표시되는 화합물을 사용하여 정공수송층 및/또는 발광보조층을 형성함으로써 각 유기물층 간의 에너지 레벨 및 T_1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등을 최적화하여 유기전기소자의 수명 및 효율을 동시에 향상시킬 수 있다.
- [64] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기발광소자는 다양한 증착법(deposition)을 이용하여 제조될 수 있을 것이다. PVD나 CVD 등의 증착 방법을 사용하여 제조될 수 있는데, 예컨대, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극(120)을 형성하고, 그 위에 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160) 및 전자주입층(170)을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극(180)으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 또한, 정공수송층(140)과 발광층(150) 사이에 발광보조층(151)을, 발광층(150)과 전자수송층(160) 사이에 전자수송보조층을 추가로 더 형성할 수 있다.
- [65] 또한, 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 용액 공정 또는 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정, 롤투롤 공정, 닥터 블레이딩 공정, 스크린 프린팅 공정, 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다. 본 발명에 따른 유기물층은 다양한 방법으로 형성될 수 있으므로, 그 형성방법에 의해 본 발명의 권리범위가 제한되는 것은 아니다.
- [66] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.
- [67] WOLED(White Organic Light Emitting Device)는 고해상도 실현이 용이하고 공정성이 우수한 한편, 기존의 LCD의 칼라필터 기술을 이용하여 제조될 수 있는 이점이 있다. 주로 백라이트 장치로 사용되는 백색 유기발광소자에 대한 다양한 구조들이 제안되고 특허화되고 있다. 대표적으로, R(Red), G(Green), B(Blue) 발광부들을 상호평면적으로 병렬배치(side-by-side) 방식, R, G, B 발광층이 상하로 적층되는 적층(stack) 방식이 있고, 청색(B) 유기발광층에 의한 전계발광과 이로부터의 광을 이용하여 무기형광체의 자발광(photo-luminescence)을 이용하는 색변환물질(color conversion material, CCM) 방식 등이 있는데, 본 발명은 이러한 WOLED에도 적용될 수 있을 것이다.
- [68] 또한, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기소자는 유기전기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체, 유기트랜지스터, 단색 또는 백색 조명용 소자 중 하나일 수 있다.
- [69] 본 발명의 다른 실시예는 상술한 본 발명의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치와, 이 디스플레이장치를 제어하는 제어부를 포함하는 전자장치를 포함할 수 있다. 이때, 전자장치는 현재 또는 장래의 유무선 통신단말일 수 있으며, 휴대폰 등의 이동 통신 단말기, PDA, 전자사전, PMP, 리모콘, 네비게이션, 게임기, 각종 TV, 각종 컴퓨터 등 모든 전자장치를

포함한다.

- [70] 이하, 본 발명의 일 측면에 따른 화합물에 대하여 설명한다.
 [71] 본 발명의 일 측면에 따른 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.
 [72] <화학식 1> <화학식 2>
 [73]



- [74] 상기 화학식 1 및 2에서 각 기호는 아래와 같이 정의된다.
 [75] 화학식 1에서, X는 O 또는 S이다.
 [76] R¹ 내지 R³는 서로 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로젠; 시아노기; 나이트로기; C₆-C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁-C₅₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₁-C₃₀의 알콕실기; C₆-C₃₀의 아릴옥시기; 및 화학식 2로 이루어진 군에서 선택될 수 있다. 단, R¹ 내지 R³ 중 적어도 하나는 상기 화학식 2이다.
 [77] R¹ 내지 R³가 아릴기인 경우에는 바람직하게는 C₆-C₃₀의 아릴기일 수 있고, 더욱 바람직하게는 C₆-C₁₂의 아릴기일 수 있으며, 알킬기인 경우에는 바람직하게는 C₁-C₁₀의 알킬기, 더욱 바람직하게는 C₁-C₄의 알킬기일 수 있고, 알콕실기인 경우에는 바람직하게는 C₁-C₁₀의 알콕실기, 더욱 바람직하게는 C₁-C₄의 알콕실기일 수 있다. R¹ 내지 R³는 예시적으로 수소, 페닐, 페닐피리미딘, 메톡시, 에톡시, 시아노, 메틸 등일 수 있다.
 [78] R⁴ 내지 R⁷은 서로 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로젠; 시아노기; 나이트로기; C₆-C₆₀의 아릴기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁-C₅₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₁-C₃₀의 알콕실기; 및 C₆-C₃₀의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택될 수 있으며, R⁴ 내지 R⁷는 선택적으로 이웃한 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다. 단, R⁴ 내지 R⁷에서 다이벤조퓨릴기 및 다이벤조싸이엔일기는 제외된다.
 [79] R⁴ 내지 R⁷가 아릴기인 경우에는 바람직하게는 C₆-C₃₀의 아릴기, 더욱 바람직하게는 C₆-C₁₈의 아릴기일 수 있고, 헤테로고리기인 경우에는 바람직하게는 C₂-C₃₀의 헤테로고리기, 더욱 바람직하게는 C₂-C₉의 헤테로고리기일 수 있고, 알킬기인 경우에는 바람직하게는 C₁-C₁₀ 등의 알킬기, 보다 바람직하게는 C₁-C₄의 알킬기일 수 있으며, R⁴ 내지 R⁷는 예시적으로 수소,

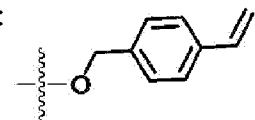
중수소, *tert*-부틸, 페닐, 나프틸, 터페닐, 페난트릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴 등일 수 있다.

- [80] R^4 내지 R^7 이 이웃한 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다'는 것은, R^4 와 R^5 끼리, R^5 와 R^6 끼리 및 R^6 과 R^7 끼리 중 적어도 한쌍이 서로 결합하여 이들이 결합된 벤젠환과 함께 고리를 형성할 수 있는 것을 의미한다. 이때, 각 이웃한 기끼리 중 적어도 한쌍의 기끼리 서로 독립적으로 고리를 형성할 수 있으므로, 예컨대 R^4 와 R^5 끼리는 고리를 형성하고 나머지 R^5 내지 R^7 은 고리를 형성하지 않을 수 있다.
- [81] R^4 와 R^5 끼리, R^5 와 R^6 끼리 또는 R^6 과 R^7 끼리 서로 결합하여 형성되는 고리는 통상 5 내지 8원환이지만, 바람직하게는 5 또는 6원환, 보다 바람직하게는 6원환이다. 이때, 형성된 고리는 방향족환 또는 지방족환일 수 있고, 방향족환인 경우 방향족 탄화수소환 또는 방향족 복소환일 수 있도 있지만, 바람직하게는 방향족 탄화수소환이다. 또한, 이웃한 기끼리 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 지환족 고리, 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수도 있다. 바람직하게는, R^4 와 R^5 끼리, R^5 와 R^6 끼리 또는 R^6 과 R^7 끼리 서로 결합하여 형성되는 고리는 벤젠환일 수 있으며, 이들이 결합된 벤젠링과 함께 나프탈렌, 페난트렌 등을 형성할 수 있다.
- [82] 상기 화학식 2에서, L^1 내지 L^5 는 서로 독립적으로 단일결합; C_6-C_{60} 의 아릴렌기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기; 플루오렌일렌기; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리기; 및 C_1-C_{60} 의 지방족 탄화수소기로 이루어진 군에서 선택될 수 있고, 이들 각각(단일결합 제외)은 중수소; 할로젠; 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; C_1-C_{20} 의 알킬싸이오기; C_1-C_{20} 의 알콕실기; C_1-C_{20} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_6-C_{20} 의 아릴기; 중수소로 치환된 C_6-C_{20} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{20} 의 헤테로고리기; C_3-C_{20} 의 시클로알킬기; C_7-C_{20} 의 아릴알킬기; 및 C_8-C_{20} 의 아릴알켄일기;로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.
- [83] L^1 내지 L^5 가 아릴렌기인 경우 바람직하게는 C_6-C_{30} 의 아릴렌기, 보다 바람직하게는 C_6-C_{12} 의 아릴렌기일 수 있고, 예시적으로 페닐렌, 나프틸렌, 바이페닐렌 등일 수 있다. L^1 내지 L^5 가 헤테로고리기인 경우, 바람직하게는 C_2-C_{30} 의 헤테로고리기, 더욱 바람직하게는 C_2-C_{12} 의 헤테로고리기일 수 있고, 예시적으로 피리딘, 벤조싸이오펜, 벤조퓨란, 다이벤조싸이오펜, 다이벤조퓨란 등일 수 있으며, L^1 내지 L^5 가 플루오렌일렌기인 경우, 9,9-다이메틸-9H-플루오렌일렌일 수 있다.
- [84] Ar^1 내지 Ar^4 는 서로 독립적으로 C_6-C_{60} 의 아릴기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기;

플루오렌일기; C_6-C_{60} 의 방향족 고리와 C_3-C_{60} 의 지방족 고리의 융합고리기; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; 및 C_6-C_{30} 의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

- [85] Ar^1 내지 Ar^4 가 아릴기인 경우, 바람직하게는 C_6-C_{30} 의 아릴기, 더욱 바람직하게는 C_6-C_{18} 의 아릴기일 수 있고, 예시적으로 페닐, 바이페닐, 터페닐, 나프틸, 파이렌일, 페난트릴, 트리페닐렌일 등일 수 있다. Ar^1 내지 Ar^4 가 플루오렌일기인 경우, 9,9-다이메틸-9H-플루오렌일, 9,9-다이페닐-9H-플루오렌일, 9,9'-스파이로바이플루오렌일, 스파이로벤조플루오렌-7,9'-플루오렌일 등일 수 있다. Ar^1 내지 Ar^4 가 헤테로고리기인 경우, 바람직하게는 C_2-C_{30} 의 헤테로고리기, 더욱 바람직하게는 C_2-C_{12} 의 헤테로고리기일 수 있고, 예시적으로 피리딘, 이소퀴놀린, 벤조퀴놀린, 카바졸, 벤조카바졸, 벤조싸이오펜, 다이벤조싸이오펜, 벤조나프토싸이오펜, 다이벤조퓨란, 트리메틸실레인, 트리페닐실레인 등일 수 있다. Ar^1 내지 Ar^4 가 알킬기인 경우, 바람직하게는 C_1-C_{10} 의 알킬기, 더욱 바람직하게는 C_1-C_4 의 알킬기일 수 있고, 예시적으로 메틸 등일 수 있다. Ar^1 내지 Ar^4 가 알켄일기인 경우, 바람직하게는 C_1-C_{10} 의 알켄일기, 더욱 바람직하게는 C_1-C_4 의 알켄일기일 수 있고, 예시적으로 에텐일, 프로펜일 등일 수 있다. Ar^1 내지 Ar^4 가 알콕실기인 경우, 바람직하게는 C_1-C_{10} 의 알콕실기, 더욱 바람직하게는 C_1-C_4 의 알콕실기일 수 있고, 예시적으로 메톡실, 부톡실, tert-부톡실 등일 수 있다.

- [86] 상기 화학식 1에서 각 기호가 아릴기, 플루오렌일기, 헤테로고리기, 융합고리기, 알킬기, 알켄일기, 알킨일기, 알콕시기, 또는 아릴옥시기인 경우, 이들 각각은 중수소; 할로젠; C_1-C_{20} 의 알킬기 또는 C_6-C_{20} 의 아릴기로 치환 또는 비치환된 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; C_1-C_{20} 의 알킬싸이오기; C_1-C_{20} 의 알콕실기; C_1-C_{20} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_6-C_{20} 의 아릴기; 중수소로 치환된 C_6-C_{20} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{20} 의 헤테로고리기; C_3-C_{20} 의 시클로알킬기; C_7-C_{20} 의 아릴알킬기; 및 C_8-C_{20} 의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고, 이들 각 치환기는 더 치환될 수도 있는데, 예컨대 알킬기로 치환된 아릴기인 경우, 치환기인 알킬기는 알켄일아릴알콕실기(예:



)로 더 치환될 수 있다.

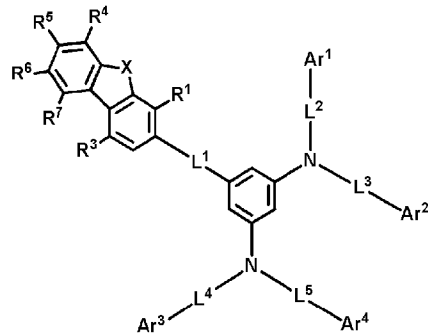
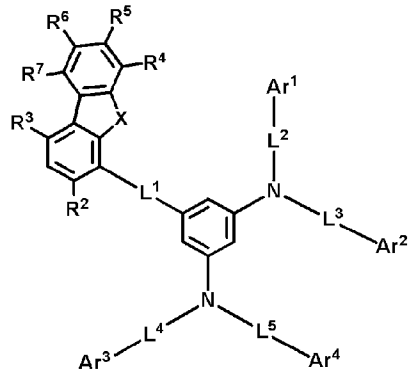
- [87] 상기 화학식 1의 R^1 내지 R^3 중 적어도 하나가 상기 화학식 2로 표현되는 화합물인 경우, 정공특성을 가지는 코어(벤조퓨란 또는 벤조티오펜)와 연결되는 연결기에 치환되는 아민기의 종류, 결합위치 및 개수에 따라 에너지 준위(HOMO, LUMO), T1 값, 열적 안정성, 정공 이동도의 차이가 발생한다.

- [88] 상기 화학식 1에서, R^1 , R^2 또는 R^3 가 화학식 2인 경우 상기 화학식 1은 하기

화학식 3 내지 화학식 5 중 하나로 표시될 수 있다.

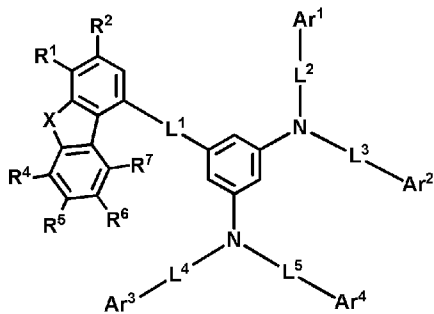
[89] <화학식 3> <화학식 4>

[90]



[91] <화학식 5>

[92]

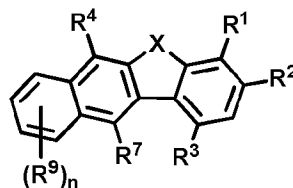
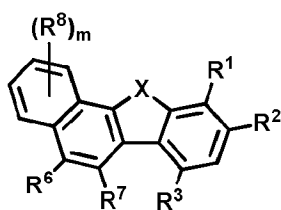


[93] 상기 화학식 3 내지 화학식 5에서, X, R¹ 내지 R⁷, Ar¹ 내지 Ar⁵, 및 L¹ 내지 L⁵는 화학식 1 및 화학식 2에서 정의된 것과 같다.

[94] 화학식 1에서, R⁴ 내지 R⁷은 이웃한 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있는데, 적어도 한쌍의 이웃한 기끼리 서로 결합하여 방향족 고리, 특히 벤젠링을 형성할 경우 하기 화학식 6 내지 화학식 9 중 하나로 표시될 수 있다. 구체적으로 하기 화학식 6은 화학식 1에서 이웃한 R⁴와 R⁵끼리, 화학식 7은 이웃한 R⁵와 R⁶끼리, 화학식 8은 이웃한 R⁶과 R⁷끼리, 화학식 9는 이웃한 R⁴와 R⁵끼리 및 이웃한 R⁶과 R⁷끼리 서로 결합하여 벤젠링을 형성한 경우이며, 이웃한 기끼리 벤젠링을 형성할 경우 이들이 결합된 벤젠링과 함께 나프탈렌 또는 페난트렌을 형성할 수 있다.

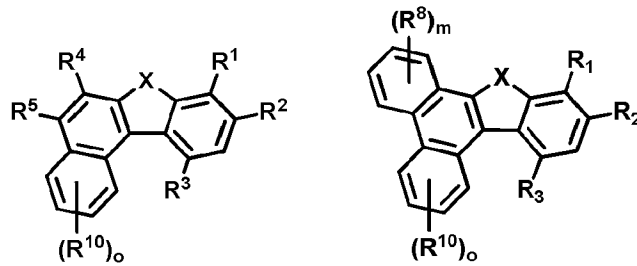
[95] <화학식 6> <화학식 7>

[96]



[97] <화학식 8> <화학식 9>

[98]

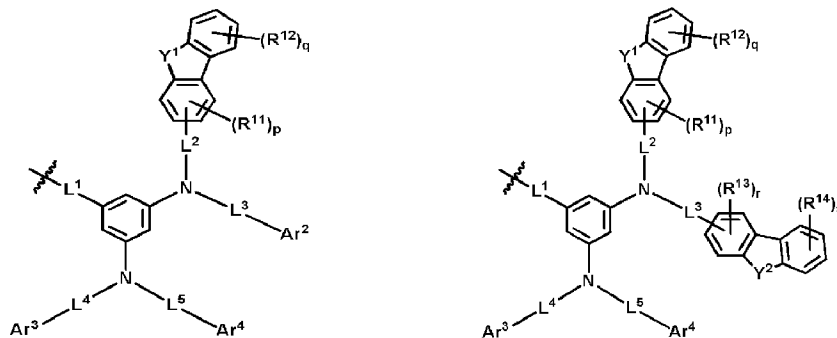


[99] 상기 화학식 6 내지 화학식 9에서, X, R¹ 내지 R⁷은 화학식 1에서 정의된 것과 동일하며, R⁸ 내지 R¹⁰은 서로 독립적으로 중수소; 삼중수소; 할로젠; 시아노기; 나이트로기; C₆-C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁-C₅₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₁-C₃₀의 알콕실기; 및 C₆-C₃₀의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다. 또한, 상기 화학식에서, m, n 및 o는 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, 이들 각각이 2 이상의 정수인 경우 R⁸ 내지 R¹⁰은 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 예컨대, m이 3인 경우 복수의 R⁸은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[100] 바람직하게는, 상기 화학식 2는 하기 화학식 10 내지 14 중 하나로 표시될 수 있다.

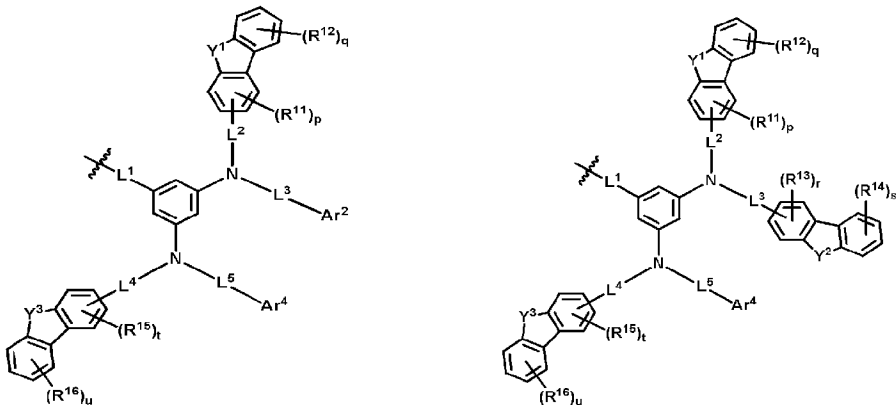
[101] <화학식 10> <화학식 11>

[102]



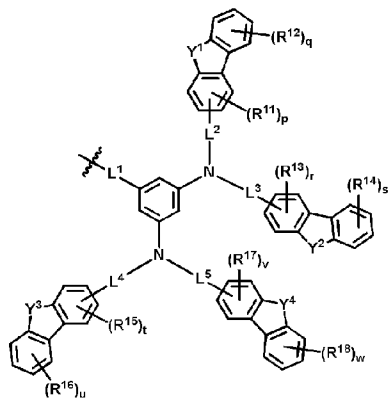
[103] <화학식 12> <화학식 13>

[104]



[105] <화학식 14>

[106]



[107] 상기 화학식 10 내지 화학식 14에서, Ar^2 내지 Ar^4 , L^1 내지 L^5 는 화학식 2에서 정의된 것과 동일하며, Y^1 내지 Y^4 는 서로 독립적으로 S, O, $C(R^a)(R^b)$ 또는 $N(R^c)$ 이고, 이때 R^a 내지 R^c 는 서로 독립적으로 C_6-C_{60} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; 및 C_6-C_{30} 의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택될 수 있고, 선택적으로 R^a 및 R^b 는 서로 결합하여 이들이 결합된 탄소와 함께 스파이로 화합물을 형성할 수 있는데, 예시적으로 9,9'-스파이로바이플루오렌을 형성할 수 있다.

[108] 또한, 상기 화학식에서, R^{11} 내지 R^{18} 은 서로 독립적으로 중수소; 삼중수소; 할로젠; 시아노기; 나이트로기; C_6-C_{60} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; C_6-C_{30} 의 아릴옥시기; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다. 또는, R^{11} 내지 R^{18} 은 선택적으로 이웃한 R^{11} 끼리, R^{12} 끼리, R^{13} 끼리, R^{14} 끼리, R^{15} 끼리, R^{16} 끼리, R^{17} 끼리 및 R^{18} 끼리 중 적어도 한쌍이 서로 결합하여 적어도 하나의 고리를 형성할 수 있는데, 예컨대 R^{11} 과 R^{12} 끼리는 고리를 형성하고 나머지 R^{13} 내지 R^{18} 은 고리를 형성하지 않을 수 있다.

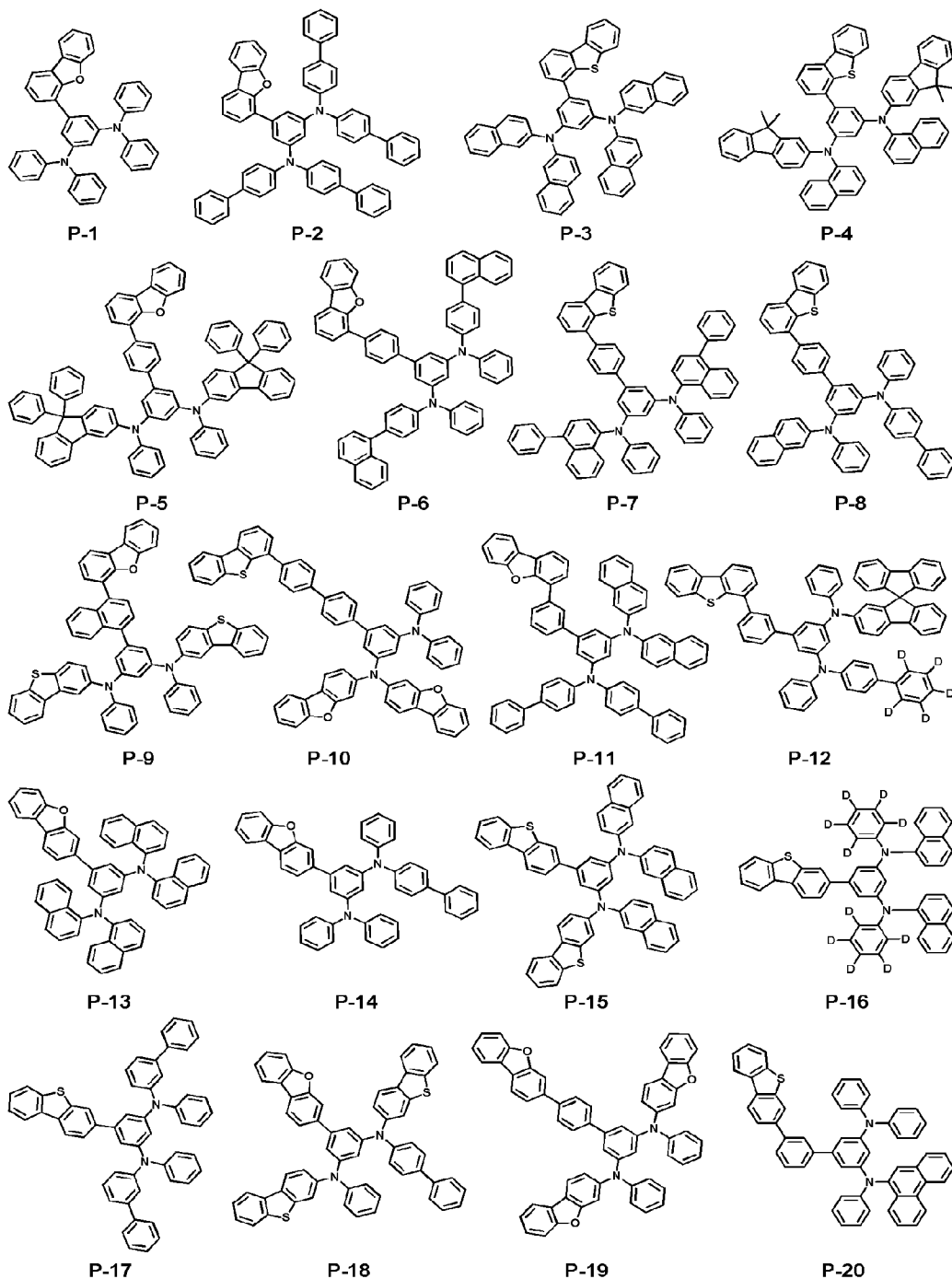
[109] R^{13} 끼리, R^{14} 끼리, R^{15} 끼리, R^{16} 끼리, R^{17} 끼리 또는 R^{18} 끼리 서로 결합하여 형성되는 고리는 통상 5 내지 8원환이지만, 바람직하게는 5 또는 6원환, 보다 바람직하게는 6원환이다. 이때, 형성된 고리는 방향족환 또는 지방족환일 수 있고, 방향족환인 경우 방향족 탄화수소환 또는 방향족 복소환일 수 있으나, 바람직하게는 방향족 탄화수소환이다. 또한, 이웃한 기끼리 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 지환족 고리, 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수도 있다. 바람직하게는, R^{13} 끼리, R^{14} 끼리, R^{15} 끼리, R^{16} 끼리, R^{17} 끼리 또는 R^{18} 끼리 서로 결합하여 형성하는 고리는 벤젠환일 수 있으며, 이들이 결합된 벤젠링과 함께 나프탈렌 등을 형성할 수 있다.

[110] 상기 화학식에서, p, r, t 및 v는 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수이며, 이들

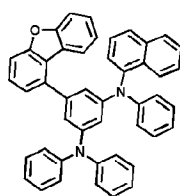
각각이 2 이상의 정수인 경우, R^{11} , R^{13} , R^{15} 및 R^{17} 은 각각 서로 동일하거나 상이하며, q , s , u 및 w 는 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, 이들 각각이 2 이상의 정수인 경우, R^{12} , R^{14} , R^{16} 및 R^{18} 은 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[111]

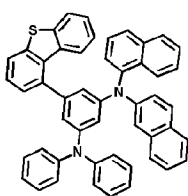
[112]



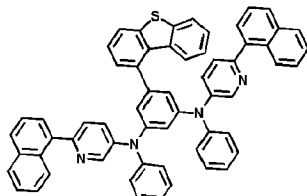
[113]



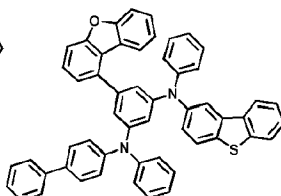
P-21



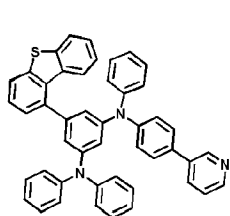
P-22



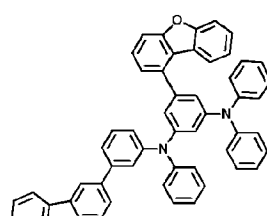
P-23



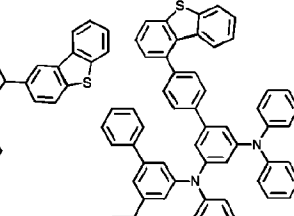
P-24



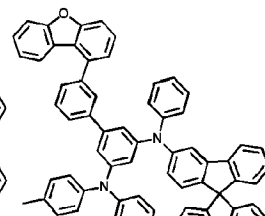
P-25



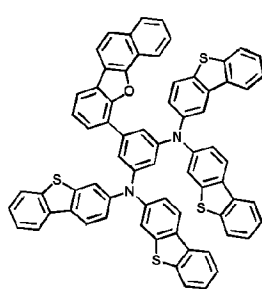
P-26



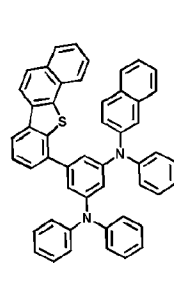
P-27



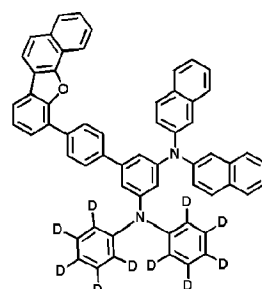
P-28



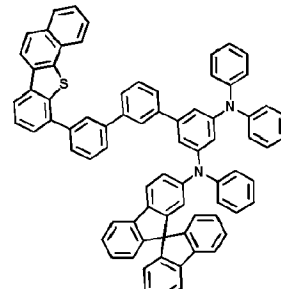
P-29



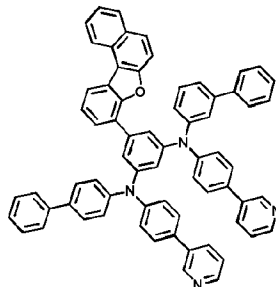
P-30



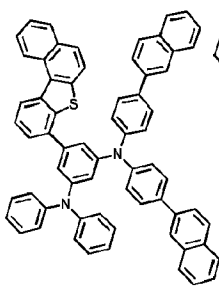
P-31



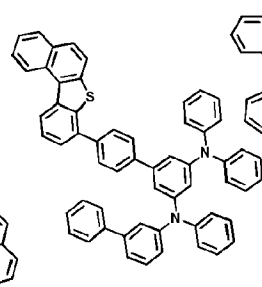
P-32



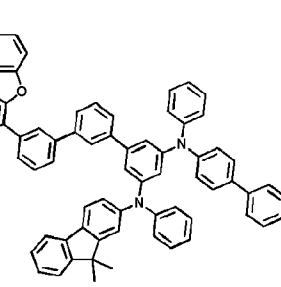
P-33



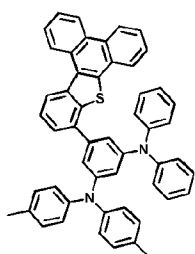
P-34



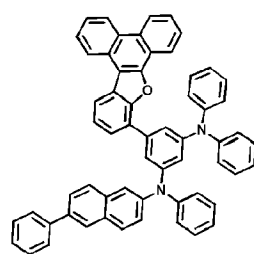
P-35



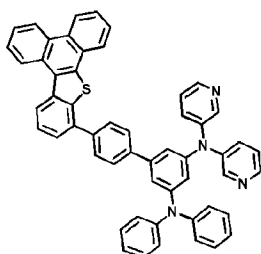
P-36



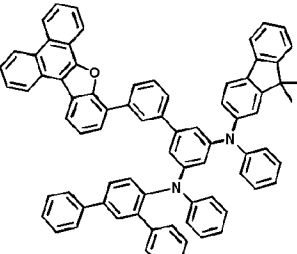
P-37



P-38

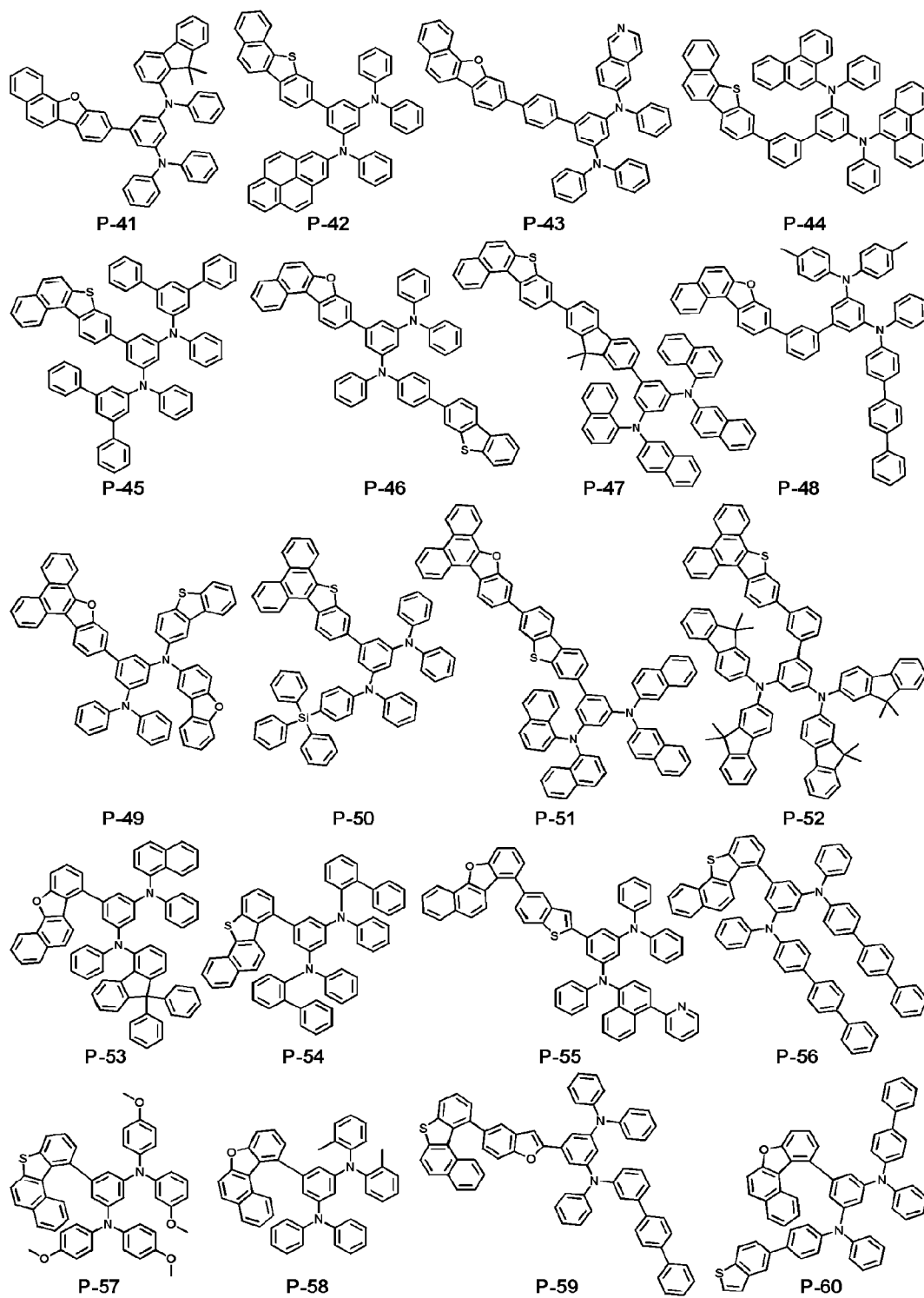


P-39

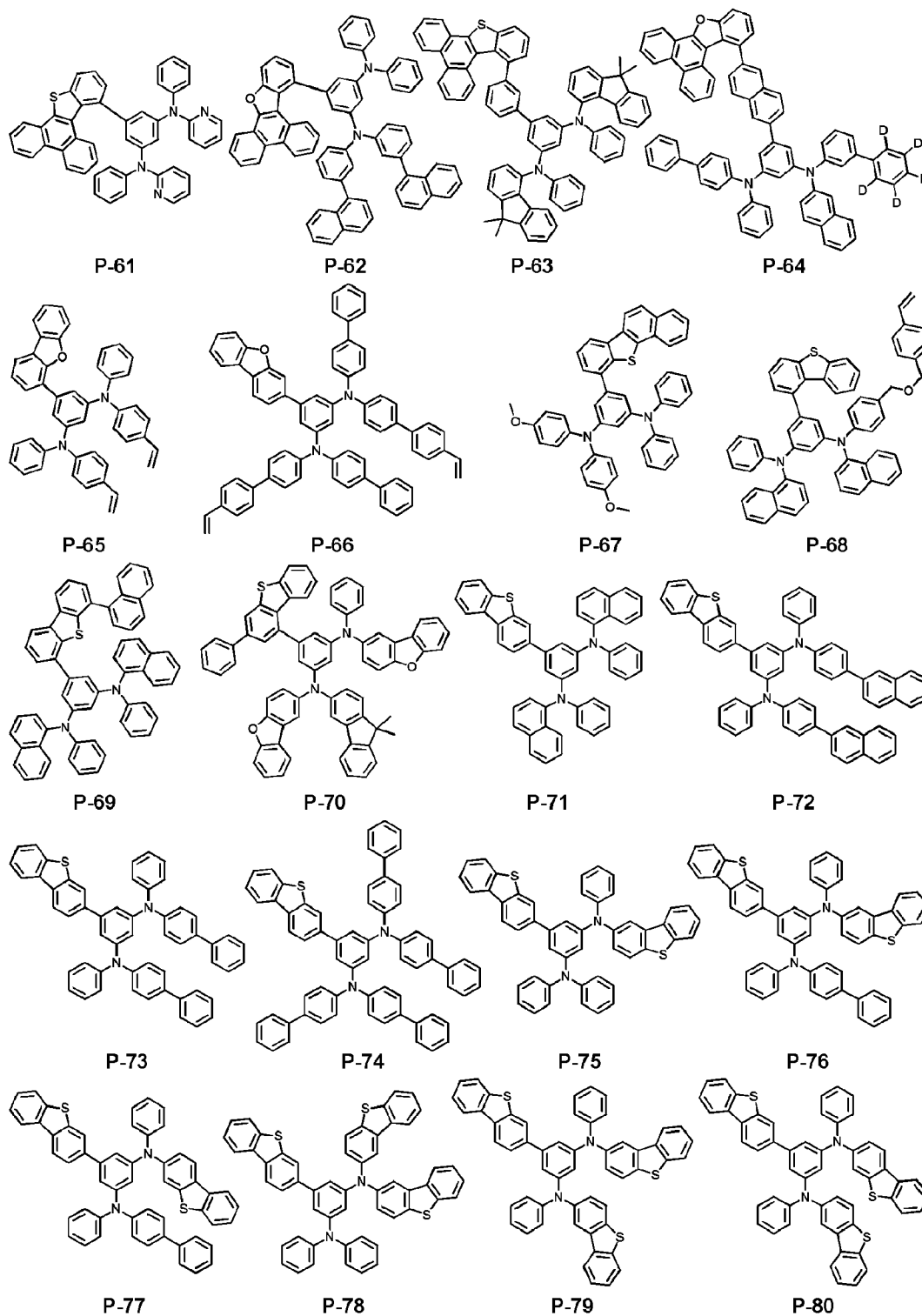


P-40

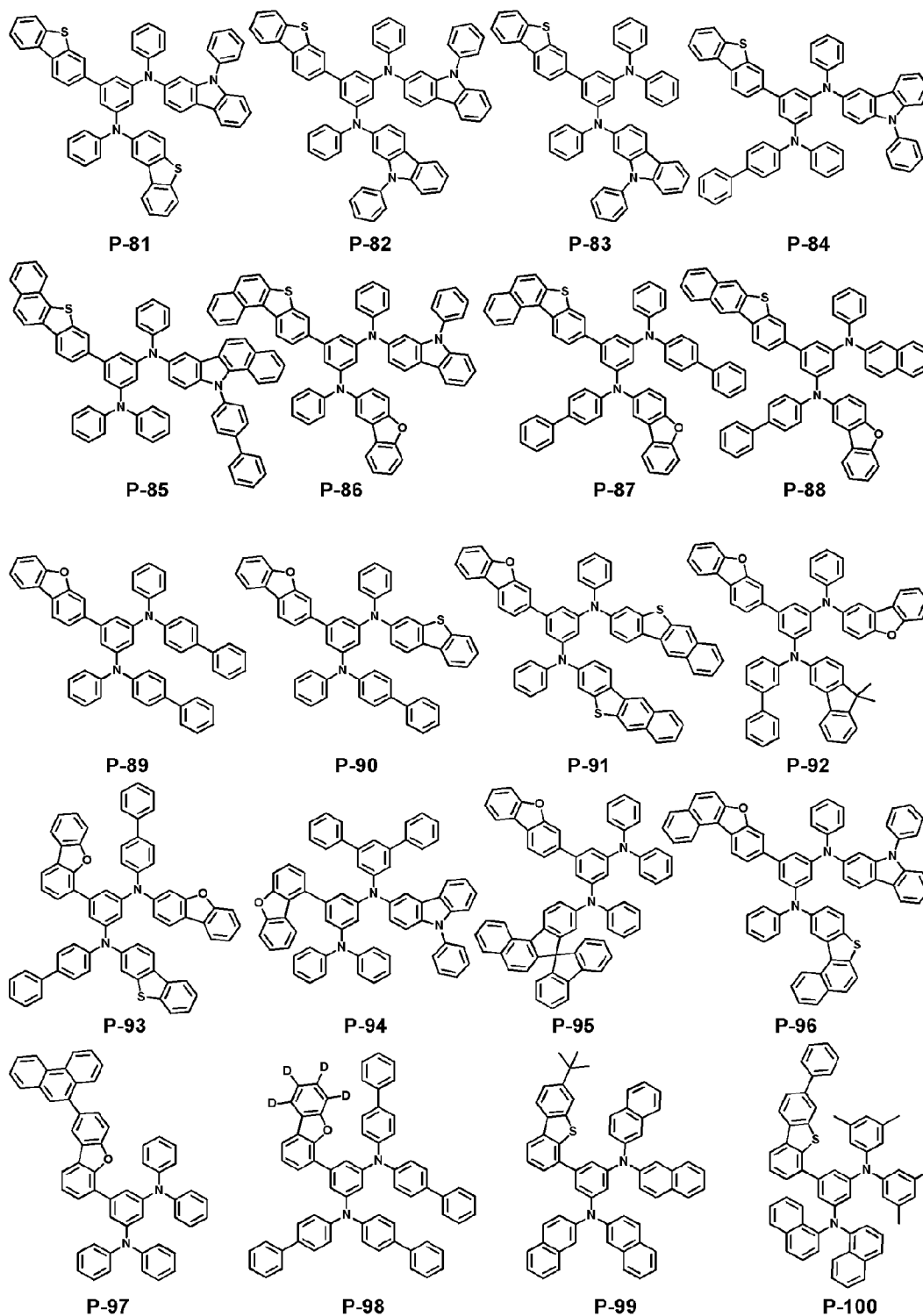
[114]



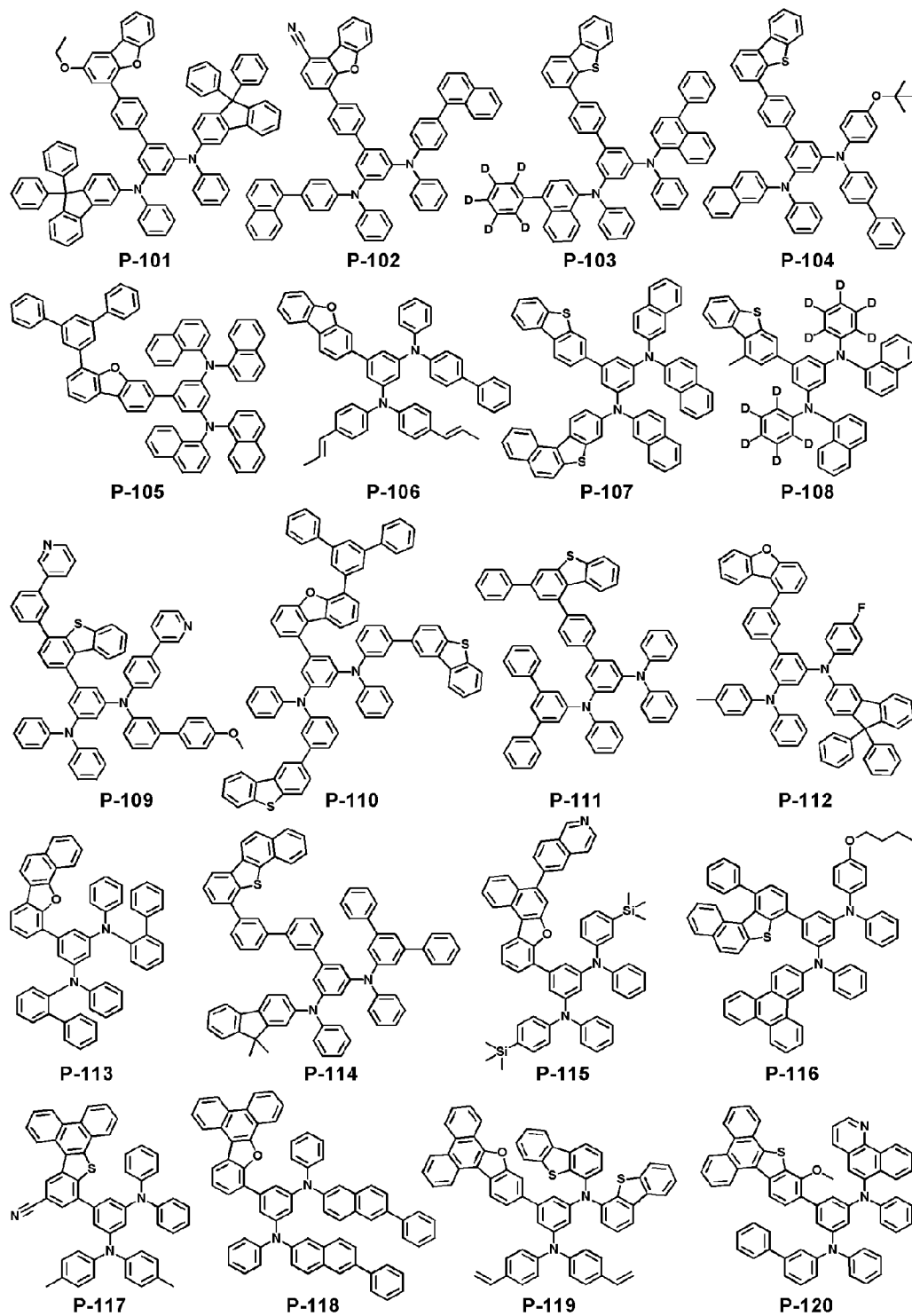
[115]



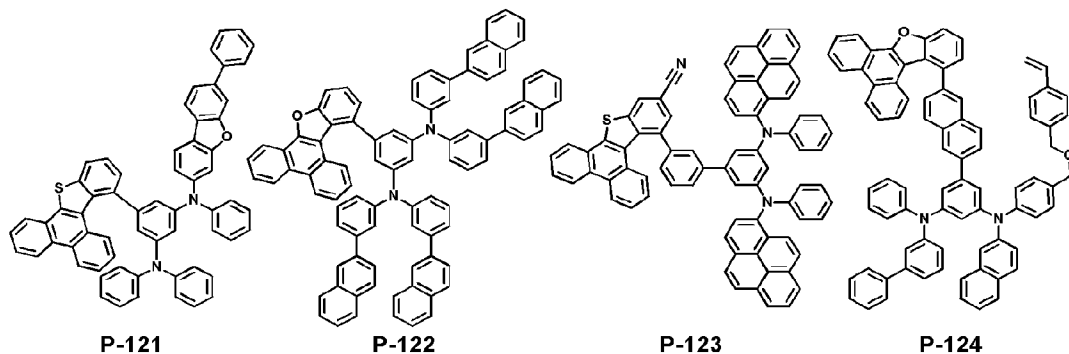
[116]



[117]



[118]



[119] 본 발명의 다른 측면에서, 본 발명은 제 1전극; 제 2전극; 및 상기 제 1전극과 제 2전극 사이에 형성된 유기물층;을 포함하는 유기전기소자를 제공하며, 이때 상기 유기물층 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송보조층, 전자수송층 및 전자주입층 중 적어도 하나이며, 이러한 유기물층에는 상기 화합물 중 적어도 하나가 포함될 수 있다. 즉, 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 1종 단독 화합물 또는 2종 이상의 혼합물로 형성될 수 있다.

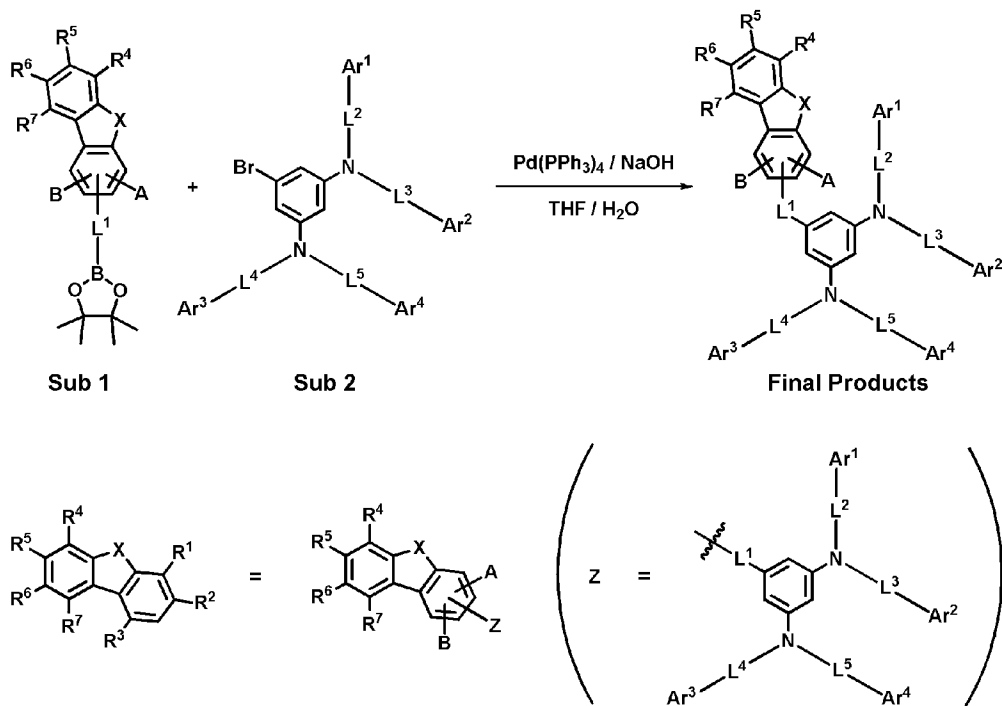
[120] 이하에서, 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물의 합성에 및 유기전기소자의 제조에 관하여 실시예를 들어 구체적으로 설명하지만, 본 발명이 하기의 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[121] 합성예

[122] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물(final products)은 하기 반응식 1과 같이 Sub 1과 Sub 2를 반응시켜 합성되나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[123] <반응식 1>

[124]



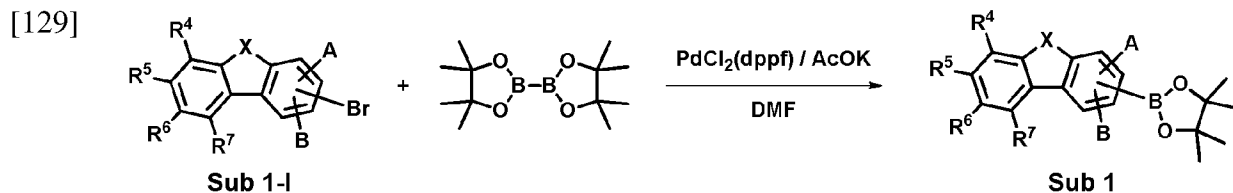
[125] X, R¹ 내지 R⁷, Ar¹ 내지 Ar⁴, L¹ 내지 L⁵는 상기 화학식 1 및 화학식 2에서 정의된 것과 동일하며, A, B, Z는 서로 독립적으로 상기 R¹ 내지 R³ 중에서 선택되는

하나이고, A와 B와 Z는 각각 서로 상이할 수 있다.

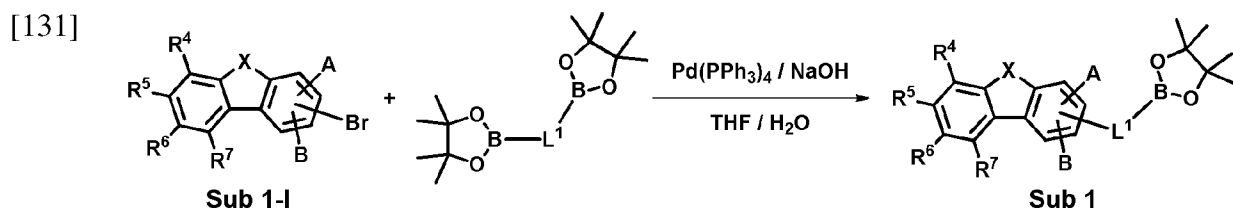
[126] **1. Sub 1의 합성**

[127] 상기 반응식 1의 Sub 1은 하기 반응식 2 내지 반응식 5의 반응경로에 의해 합성될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

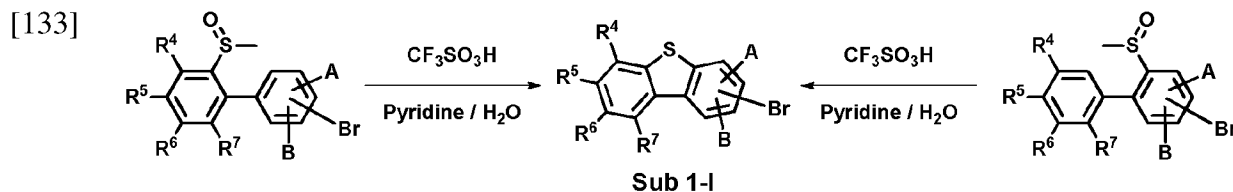
[128] <반응식 2> L¹이 단일결합인 경우



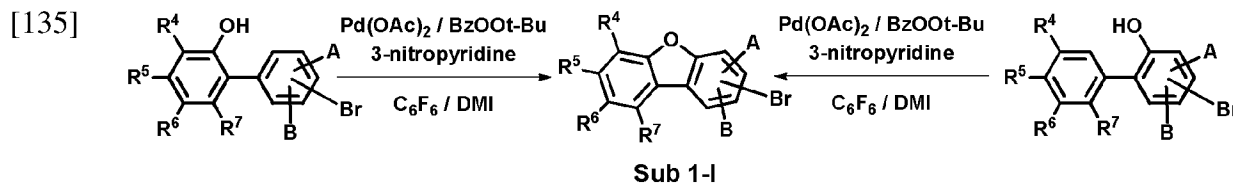
[130] <반응식 3> L¹이 단일결합이 아닌 경우



[132] <반응식 4> X가 S인 경우



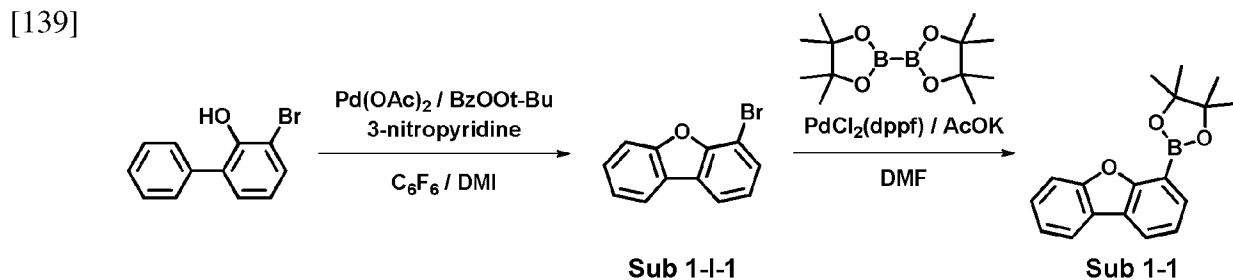
[134] <반응식 5> X가 O인 경우



[136] Sub 1에 속하는 구체적인 화합물의 합성예는 다음과 같다.

[137] **1. Sub 1-1 합성예**

[138] <반응식 6>



[140] **(1) Sub 1-I-1 합성**

[141] 출발물질인 3-bromo-[1,1'-biphenyl]-2-ol (32.42 g, 130.15 mmol)를 둥근바닥플라스크에 Pd(OAc)₂ (2.92 g, 13.01 mmol), 3-nitropyridine (1.62 g, 13.01

mmol)과 함께 넣고 C_6F_6 (195ml), DMI (130ml)로 녹인 후, *tert*-butyl peroxybenzoate (50.56 g, 260.30 mmol)를 첨가하고 90°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2 와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$ 로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 15.76 g (수율: 49%)를 얻었다.

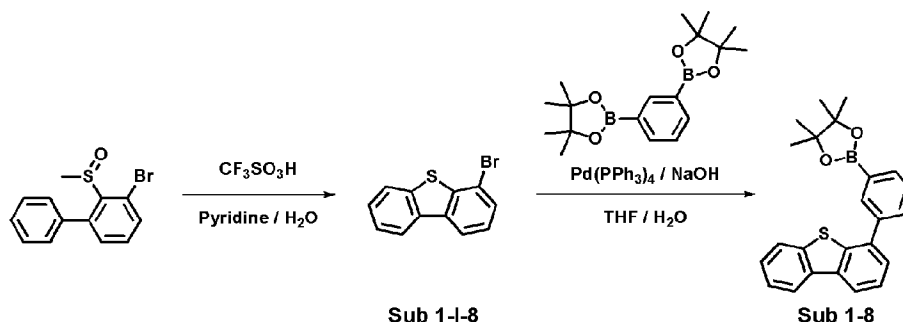
[142] **(2) Sub 1-1 합성**

[143] 상기 Sub 1-I-1 (15.76 g, 63.78 mmol)를 둥근바닥플라스크에 DMF (320ml)로 녹인 후에, Bis(pinacolato)diboron (17.82 g, 70.16 mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (1.56 g, 1.91 mmol), KOAc (18.78 g, 191.35 mmol)를 첨가하고 90°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 증류를 통해 DMF를 제거하고 CH_2Cl_2 와 물로 추출하였다. 유기층을 $MgSO_4$ 로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 15.38 g (수율: 82%)를 얻었다.

[144] **2. Sub 1-8 합성예**

[145] <반응식 7>

[146]



[147] **(1) Sub 1-I-8 합성**

[148] 출발물질인 3-bromo-2-(methylsulfinyl)-1,1'-biphenyl (20.03 g, 67.85 mmol)를 둥근바닥플라스크에 triflic acid (90ml, 1017.82 mmol)와 함께 넣고 상온에서 24시간 동안 교반한 뒤, pyridine 수용액 (1190ml, pyridine : H_2O = 1 : 5)을 천천히 적가하고 30분 동안 환류 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2 와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$ 로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 14.46 g (수율: 81%)를 얻었다.

[149] **(2) Sub 1-8 합성**

[150] 상기 Sub 1-I-8 (14.46 g, 54.95 mmol)를 둥근바닥플라스크에 THF (190ml)로 녹인 후에, 1,3-bis(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzene (19.95 g, 60.44 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (2.10 g, 1.81 mmol), NaOH (7.25 g, 181.33 mmol), 물 (95ml)을 첨가하고 80°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2 와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$ 로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 13.37 g (수율: 63%)을 얻었다.

[151] **3. Sub 1-10 합성예**

[152] <반응식 8>

[167] <반응식 11>

Sub 1-1-24

Sub 1-24

Chemical reaction scheme showing the synthesis of Sub 1-35:

Starting material: 2-(4-bromophenyl)-5-methyl-2H-benzothien[3,2-b:4',3'-d]pyridine

Reaction 1: $\text{CF}_3\text{SO}_3\text{H}$ / Pyridine / H_2O

Intermediate: 2-(4-bromophenyl)-5-methyl-2H-benzothien[3,2-b:4',3'-d]pyridine

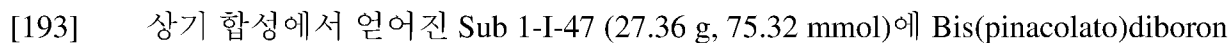
Reaction 2: $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ / NaOH / THF / H_2O

Reagent: 4,4'-bis(pinacolato)benzophenone

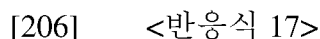
Product: Sub 1-35

[179] 상기 Sub 1-I-35 (26.67 g, 85.15 mmol)에 2,2'-(9,9-dimethyl-9H-fluorene-2,7-diyl)bis(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane) (41.79 g, 93.67 mmol), Pd(PPh₃)₄ (3.25 g, 2.81 mmol), NaOH (11.24 g, 281.00 mmol), THF (300ml), 물 (150ml)을 첨가하고 상기 Sub 1-8 합성법을 사용하여 생성물

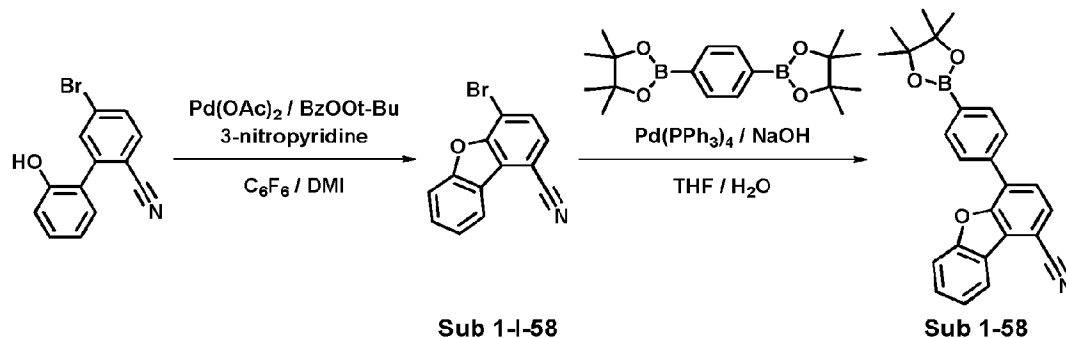
[182]



[196]



[207]

[208] **(1) Sub 1-I-58 합성**

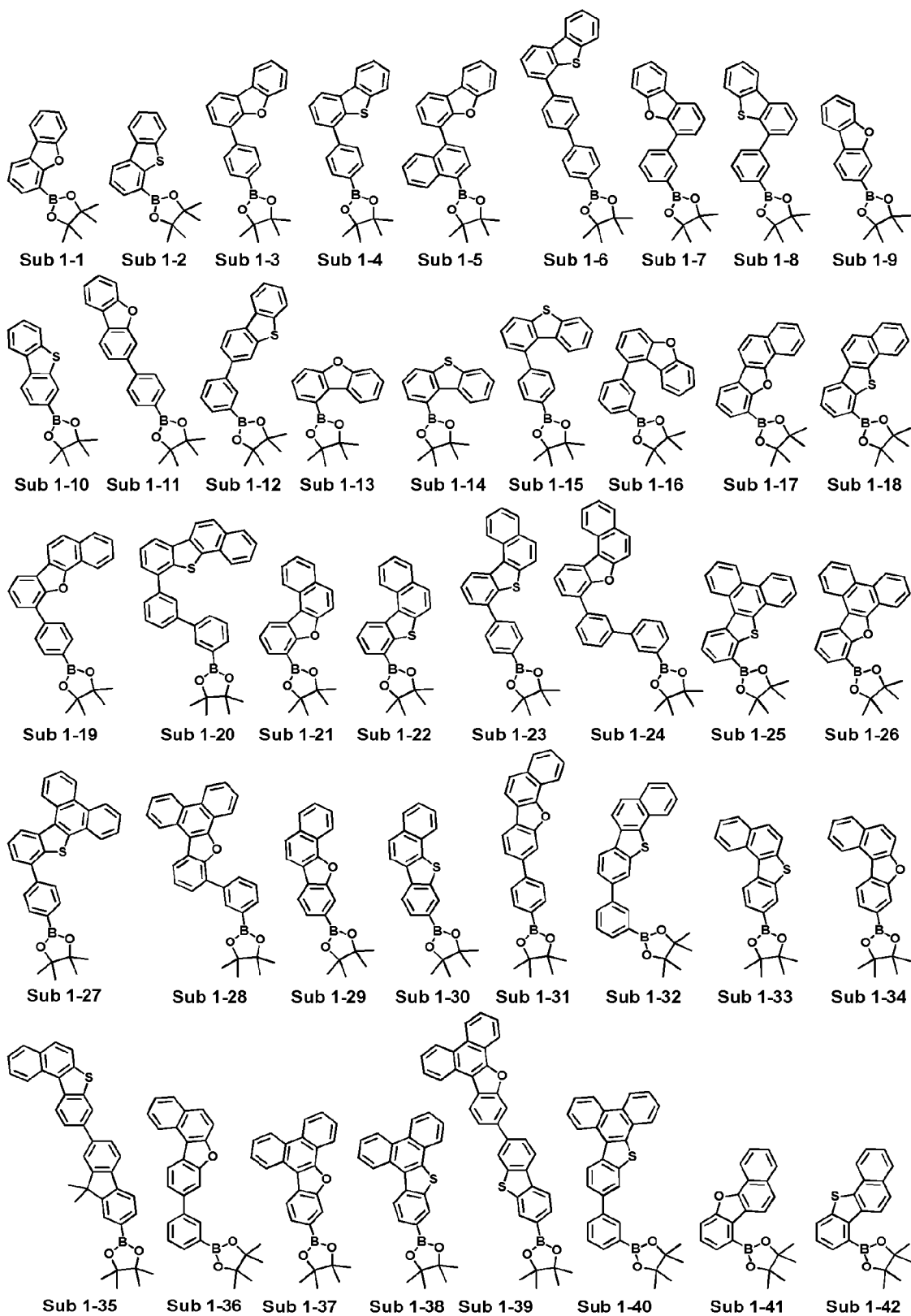
[209] 출발물질인 5-bromo-2'-hydroxy-[1,1'-biphenyl]-2-carbonitrile (49.25 g, 179.67 mmol)에 Pd(OAc)₂ (4.03 g, 17.97 mmol), 3-nitropyridine (2.23 g, 17.97 mmol), *tert*-butyl peroxybenzoate (69.80 g, 359.34 mmol), C₆F₆ (270ml), DMI (180ml)를 상기 Sub 1-I-1 합성법을 사용하여 생성물 19.07 g (수율: 39%)를 얻었다.

[210] **(2) Sub 1-58 합성**

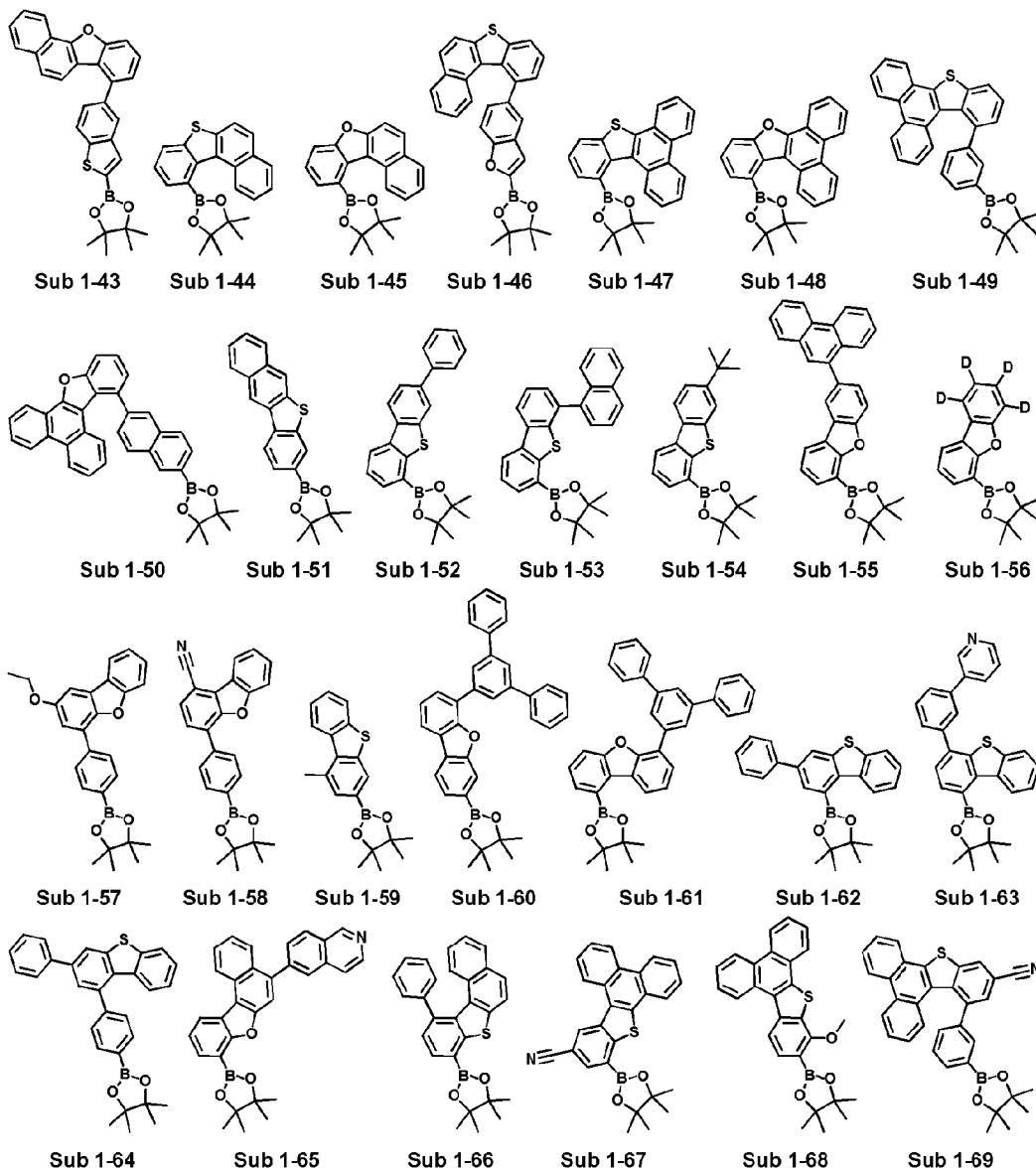
[211] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-I-58 (19.07 g, 70.08 mmol)에 1,4-bis(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzene (25.44 g, 77.09 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.67 g, 2.31 mmol), NaOH (9.25 g, 231.28 mmol), THF (240ml), 물 (120ml)을 첨가하고 상기 Sub 1-8 합성법을 사용하여 생성물 14.96 g (수율: 54%)을 얻었다.

[212] 한편, Sub 1에 속하는 화합물은 아래와 같은 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니며, 표 1은 Sub 1에 속하는 화합물의 FD-MS 값을 나타낸 것이다.

[213]



[214]



[215]

[표 1]

[216]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 1-1	m/z=294.14(C ₁₈ H ₁₉ BO ₃ =294.15)	Sub 1-2	m/z=310.12(C ₁₈ H ₁₉ BO ₂ S=310.22)
Sub 1-3	m/z=370.17(C ₂₄ H ₂₃ BO ₃ =370.25)	Sub 1-4	m/z=386.15(C ₂₄ H ₂₃ BO ₂ S=386.31)
Sub 1-5	m/z=420.19(C ₂₈ H ₂₅ BO ₃ =420.31)	Sub 1-6	m/z=462.18(C ₃₀ H ₂₇ BO ₂ S=462.41)
Sub 1-7	m/z=370.17(C ₂₄ H ₂₃ BO ₃ =370.25)	Sub 1-8	m/z=386.15(C ₂₄ H ₂₃ BO ₂ S=386.31)
Sub 1-9	m/z=294.14(C ₁₈ H ₁₉ BO ₃ =294.15)	Sub 1-10	m/z=310.12(C ₁₈ H ₁₉ BO ₂ S=310.22)
Sub 1-11	m/z=370.17(C ₂₄ H ₂₃ BO ₃ =370.25)	Sub 1-12	m/z=386.15(C ₂₄ H ₂₃ BO ₂ S=386.31)
Sub 1-13	m/z=294.14(C ₁₈ H ₁₉ BO ₃ =294.15)	Sub 1-14	m/z=310.12(C ₁₈ H ₁₉ BO ₂ S=310.22)
Sub 1-15	m/z=386.15(C ₂₄ H ₂₃ BO ₂ S=386.31)	Sub 1-16	m/z=370.17(C ₂₄ H ₂₃ BO ₃ =370.25)
Sub 1-17	m/z=344.16(C ₂₂ H ₂₁ BO ₃ =344.21)	Sub 1-18	m/z=360.14(C ₂₂ H ₂₁ BO ₂ S=360.28)
Sub 1-19	m/z=420.19(C ₂₈ H ₂₅ BO ₃ =420.31)	Sub 1-20	m/z=512.20(C ₃₄ H ₂₉ BO ₂ S=512.47)
Sub 1-21	m/z=344.16(C ₂₂ H ₂₁ BO ₃ =344.21)	Sub 1-22	m/z=360.14(C ₂₂ H ₂₁ BO ₂ S=360.28)
Sub 1-23	m/z=436.17(C ₂₈ H ₂₅ BO ₂ S=436.37)	Sub 1-24	m/z=496.22(C ₃₄ H ₂₉ BO ₃ =496.40)
Sub 1-25	m/z=410.15(C ₂₆ H ₂₃ BO ₂ S=410.34)	Sub 1-26	m/z=394.17(C ₂₆ H ₂₃ BO ₃ =394.27)
Sub 1-27	m/z=486.18(C ₃₂ H ₂₇ BO ₂ S=486.43)	Sub 1-28	m/z=470.21(C ₃₂ H ₂₇ BO ₃ =470.37)
Sub 1-29	m/z=344.16(C ₂₂ H ₂₁ BO ₃ =344.21)	Sub 1-30	m/z=360.14(C ₂₂ H ₂₁ BO ₂ S=360.28)
Sub 1-31	m/z=420.19(C ₂₈ H ₂₅ BO ₃ =420.31)	Sub 1-32	m/z=436.17(C ₂₈ H ₂₅ BO ₂ S=436.37)
Sub 1-33	m/z=360.14(C ₂₂ H ₂₁ BO ₂ S=360.28)	Sub 1-34	m/z=344.16(C ₂₂ H ₂₁ BO ₃ =344.21)
Sub 1-35	m/z=552.23(C ₃₇ H ₃₃ BO ₂ S=552.53)	Sub 1-36	m/z=420.19(C ₂₈ H ₂₅ BO ₃ =420.31)
Sub 1-37	m/z=394.17(C ₂₆ H ₂₃ BO ₃ =394.27)	Sub 1-38	m/z=410.15(C ₂₆ H ₂₃ BO ₂ S=410.34)
Sub 1-39	m/z=576.19(C ₃₈ H ₂₉ BO ₃ S=576.51)	Sub 1-40	m/z=486.18(C ₃₂ H ₂₇ BO ₂ S=486.43)
Sub 1-41	m/z=344.16(C ₂₂ H ₂₁ BO ₃ =344.21)	Sub 1-42	m/z=360.14(C ₂₂ H ₂₁ BO ₂ S=360.28)
Sub 1-43	m/z=476.16(C ₃₀ H ₂₅ BO ₃ S=476.39)	Sub 1-44	m/z=360.14(C ₂₂ H ₂₁ BO ₂ S=360.28)
Sub 1-45	m/z=344.16(C ₂₂ H ₂₁ BO ₃ =344.21)	Sub 1-46	m/z=476.16(C ₃₀ H ₂₅ BO ₃ S=476.39)
Sub 1-47	m/z=410.15(C ₂₆ H ₂₃ BO ₂ S=410.34)	Sub 1-48	m/z=394.17(C ₂₆ H ₂₃ BO ₃ =394.27)
Sub 1-49	m/z=486.18(C ₃₂ H ₂₇ BO ₂ S=486.43)	Sub 1-50	m/z=520.22(C ₃₆ H ₂₉ BO ₃ =520.42)
Sub 1-51	m/z=360.14(C ₂₂ H ₂₁ BO ₂ S=360.28)	Sub 1-52	m/z=386.15(C ₂₄ H ₂₃ BO ₂ S=386.31)
Sub 1-53	m/z=436.17(C ₂₈ H ₂₅ BO ₂ S=436.37)	Sub 1-54	m/z=366.18(C ₂₂ H ₂₇ BO ₂ S=366.32)
Sub 1-55	m/z=470.21(C ₃₂ H ₂₇ BO ₃ =470.37)	Sub 1-56	m/z=298.17(C ₁₈ H ₁₅ D ₄ BO ₃ =298.18)
Sub 1-57	m/z=414.20(C ₂₆ H ₂₇ BO ₄ =414.30)	Sub 1-58	m/z=395.17(C ₂₅ H ₂₂ BNO ₃ =395.26)
Sub 1-59	m/z=324.14(C ₁₉ H ₂₁ BO ₂ S=324.24)	Sub 1-60	m/z=522.24(C ₃₆ H ₃₁ BO ₃ =522.44)
Sub 1-61	m/z=522.24(C ₃₆ H ₃₁ BO ₃ =522.44)	Sub 1-62	m/z=386.15(C ₂₄ H ₂₃ BO ₂ S=386.31)
Sub 1-63	m/z=463.18(C ₂₉ H ₂₆ BNO ₂ S=463.40)	Sub 1-64	m/z=462.18(C ₃₀ H ₂₇ BO ₂ S=462.41)
Sub 1-65	m/z=471.20(C ₃₁ H ₂₆ BNO ₃ =471.35)	Sub 1-66	m/z=436.17(C ₂₈ H ₂₅ BO ₂ S=436.37)
Sub 1-67	m/z=435.15(C ₂₇ H ₂₂ BNO ₂ S=435.35)	Sub 1-68	m/z=440.16(C ₂₇ H ₂₅ BO ₃ S=440.36)
Sub 1-69	m/z=511.18(C ₃₃ H ₂₆ BNO ₂ S=511.44)		

[217]

II. Sub 2의 합성

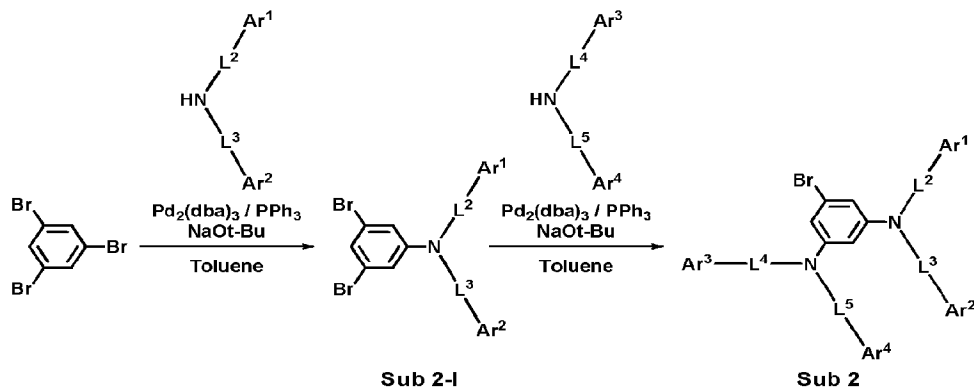
[218]

상기 반응식 1의 Sub 2는 하기 반응식 15의 반응경로에 의해 합성될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[219]

<반응식 18>

[220]

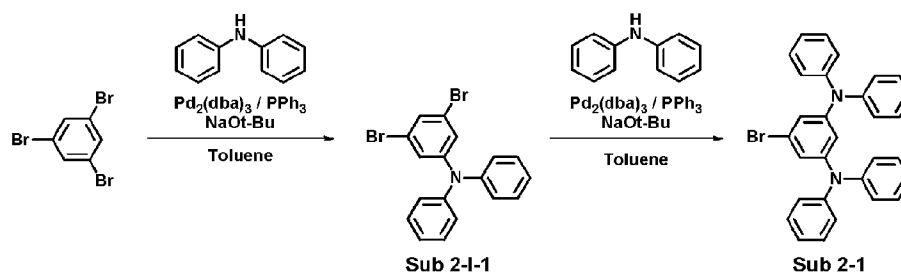


[221] Sub 2에 속하는 구체적인 화합물의 합성예는 다음과 같다.

[222] **1. Sub 2-1 합성예**

[223] <반응식 19>

[224]

[225] **(1) Sub 2-I-1 합성**

[226] 출발물질인 diphenylamine (25.74 g, 152.11 mmol)을 둥근바닥플라스크에 toluene (880ml)으로 녹인 후에, 1,3,5-tribromobenzene (62.25 g, 197.74 mmol), Pd₂(dba)₃ (4.18 g, 4.56 mmol), PPh₃ (3.19 g, 12.17 mmol), NaOt-Bu (58.48 g, 608.44 mmol)을 첨가하고 80°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 27.59 g (수율: 45%)를 얻었다.

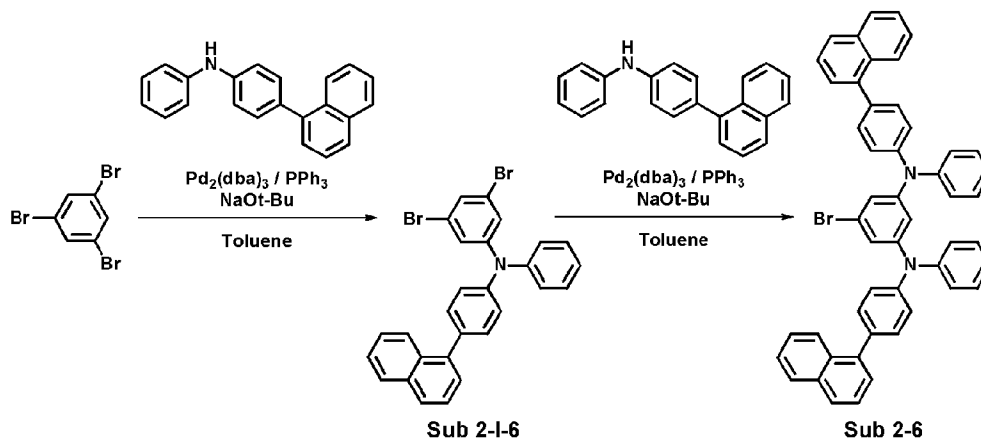
[227] **(2) Sub 2-1 합성**

[228] diphenylamine (8.91 g, 52.65 mmol)을 둥근바닥플라스크에 toluene (300ml)으로 녹인 후에, Sub 2-I-1 (27.59 g, 68.45 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.45 g, 1.58 mmol), PPh₃ (1.10 g, 4.21 mmol), NaOt-Bu (20.24 g, 210.61 mmol)을 첨가하고 80°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 12.16 g (수율: 47%)를 얻었다.

[229] **2. Sub 2-6 합성예**

[230] <반응식 20>

[231]



[232] (1) Sub 2-I-6 합성

[233] 출발물질인 4-(naphthalen-1-yl)-N-phenylaniline (35.43 g, 119.95 mmol), 1,3,5-tribromobenzene (49.09 g, 155.93 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (3.30 g, 3.60 mmol), PPh_3 (2.52 g, 9.60 mmol), NaOt-Bu (46.11 g, 479.79 mmol), toluene (690ml)을 상기 Sub 2-I-1 합성법을 사용하여 생성물 34.92 g (수율: 55%)를 얻었다.

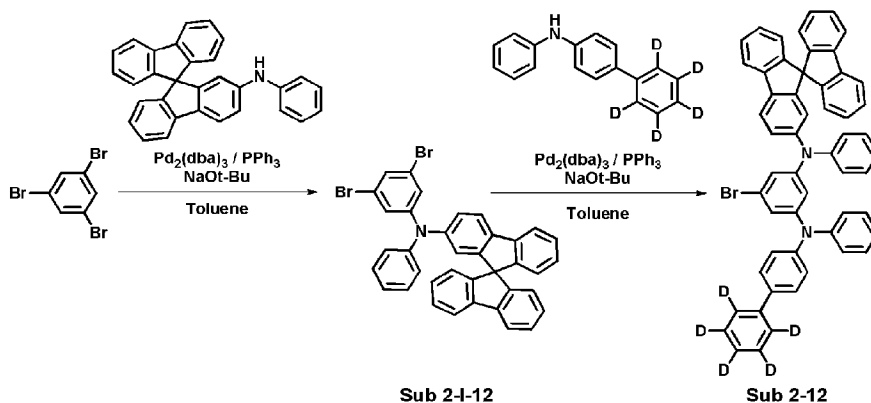
[234] (2) Sub 2-6 합성

[235] 4-(naphthalen-1-yl)-N-phenylaniline (14.99 g, 50.75 mmol), Sub 2-I-6 (34.92 g, 65.97 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.39 g, 1.52 mmol), PPh_3 (1.06 g, 4.06 mmol), NaOt-Bu (19.51 g, 202.99 mmol), toluene (290ml)을 상기 Sub 2-1 합성법을 사용하여 생성물 18.12 g (수율: 48%)를 얻었다.

[236] 2. Sub 2-12 합성예

[237] <반응식 21>

[238]



[239] (1) Sub2-I-12 합성

[240] 출발물질인 N-phenyl-9,9'-spirobi[fluoren]-2-amine (38.57 g, 94.65 mmol), 1,3,5-tribromobenzene (38.73 g, 123.04 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.60 g, 2.84 mmol), PPh_3 (1.99 g, 7.57 mmol), NaOt-Bu (36.39 g, 378.59 mmol), toluene (540ml)을 상기 Sub 2-I-1 합성법을 사용하여 생성물 29.14 g (수율: 48%)를 얻었다.

[241] (2) Sub 2-12 합성

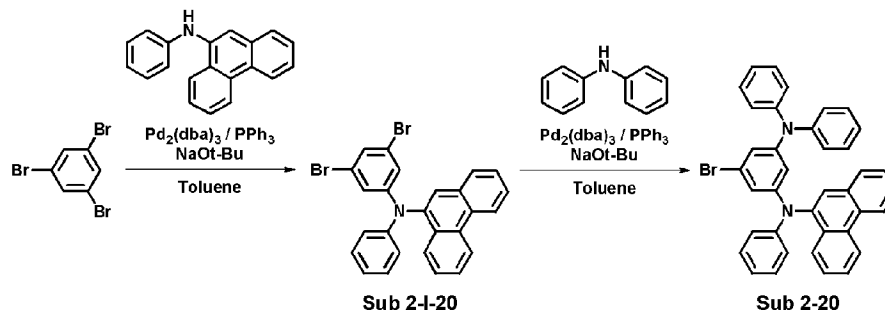
[242] N-phenyl-[1,1'-biphenyl]-2',3',4',5',6'-d₅-4-amine (8.75 g, 34.95 mmol), Sub 2-I-12

(29.14 g, 45.44 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.96 g, 1.05 mmol), PPh_3 (0.73 g, 2.80 mmol), NaOt-Bu (13.44 g, 139.80 mmol), toluene (200ml)을 상기 Sub 2-1 합성법을 사용하여 생성물 15.59 g (수율: 55%)를 얻었다.

[243] **3. Sub 2-20 합성예**

[244] <반응식 22>

[245]



[246] **(1) Sub 2-I-20 합성**

[247] 출발물질인 N-phenylphenanthren-9-amine (32.67 g, 121.30 mmol), 1,3,5-tribromobenzene (49.64 g, 157.69 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (3.33 g, 3.64 mmol), PPh_3 (2.55 g, 9.70 mmol), NaOt-Bu (46.63 g, 485.19 mmol), toluene (700ml)을 상기 Sub 2-I-1 합성법을 사용하여 생성물 28.69 g (수율: 47%)를 얻었다.

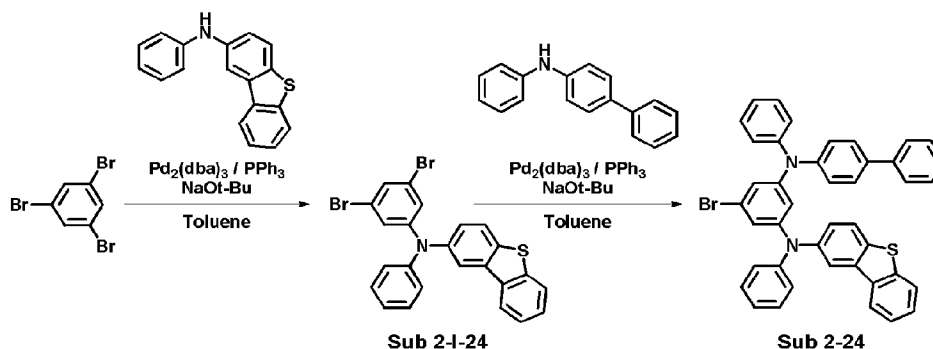
[248] **(2) Sub 2-20 합성**

[249] diphenylamine (7.42 g, 43.85 mmol), Sub 2-I-20 (28.69 g, 57.00 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.20 g, 1.32 mmol), PPh_3 (0.92 g, 3.51 mmol), NaOt-Bu (16.86 g, 175.39 mmol), toluene (250ml)을 상기 Sub 2-1 합성법을 사용하여 생성물 12.97 g (수율: 50%)를 얻었다.

[250] **4. Sub 2-24 합성예**

[251] <반응식 23>

[252]



[253] **(1) Sub 2-I-24 합성**

[254] 출발물질인 N-phenyldibenzo[b,d]thiophen-2-amine (66.57 g, 241.75 mmol), 1,3,5-tribromobenzene (98.93 g, 314.27 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (6.64 g, 7.25 mmol), PPh_3 (5.07 g, 19.34 mmol), NaOt-Bu (92.94 g, 966.99 mmol), toluene (1390ml)을 상기 Sub 2-I-1 합성법을 사용하여 생성물 61.56 g (수율: 50%)를 얻었다.

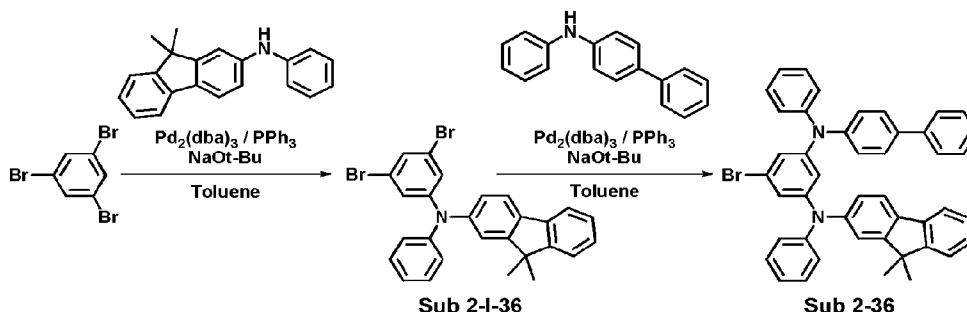
[255] **(2) Sub 2-24 합성**

[256] N-phenyl-[1,1'-biphenyl]-4-amine (22.81 g, 92.98 mmol), Sub 2-I-24 (61.56 g, 120.87 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.55 g, 2.79 mmol), PPh_3 (1.95 g, 7.44 mmol), NaOt-Bu (35.75 g, 371.92 mmol), toluene (540ml)을 상기 Sub 2-1 합성법을 사용하여 생성물 36.33 g (수율: 58%)를 얻었다.

[257] **5. Sub 2-36 합성예**

[258] <반응식 24>

[259]



[260] (1) Sub2-I-36 합성

[261] 출발물질인 9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluoren-2-amine (44.07 g, 154.43 mmol), 1,3,5-tribromobenzene (63.20 g, 200.75 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (4.24 g, 4.63 mmol), PPh_3 (3.24 g, 12.35 mmol), NaOt-Bu (59.37 g, 617.70 mmol), toluene (890ml)을 상기 Sub 2-I-1 합성법을 사용하여 생성물 39.29 g (수율: 49%)를 얻었다.

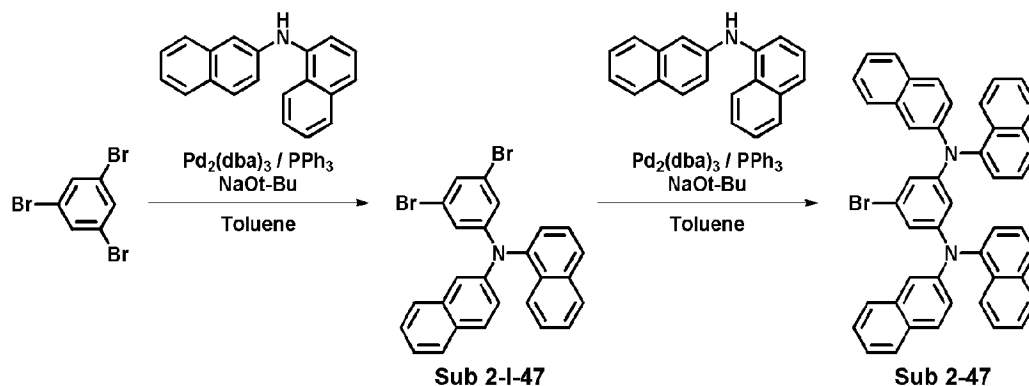
[262] (2) Sub 2-36 합성

[263] N-phenyl-[1,1'-biphenyl]-4-amine (14.28 g, 58.21 mmol), Sub 2-I-36 (39.29 g, 75.67 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.60 g, 1.75 mmol), PPh_3 (1.22 g, 4.66 mmol), NaOt-Bu (22.38 g, 232.84 mmol), toluene (340ml)을 상기 Sub 2-1 합성법을 사용하여 생성물 21.09 g (수율: 53%)를 얻었다.

[264] **6. Sub 2-47 합성예**

[265] <반응식 25>

[266]



[267] (1) Sub2-I-47 합성

[268] 출발물질인 N-(naphthalen-2-yl)naphthalen-1-amine (41.38 g, 153.63 mmol), 1,3,5-tribromobenzene (62.87 g, 199.73 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (4.22 g, 4.61 mmol), PPh_3 (3.22 g, 12.29 mmol), NaOt-Bu (59.06 g, 614.54 mmol), toluene (880ml)을 상기 Sub

2-I-1 합성법을 사용하여 생성물 37.11 g (수율: 48%)를 얻었다.

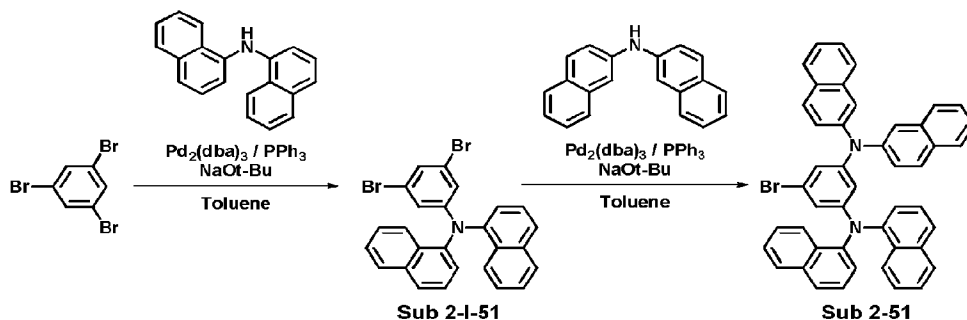
[269] **(2) Sub 2-47 합성**

[270] N-(naphthalen-2-yl)naphthalen-1-amine (15.28 g, 56.73 mmol), Sub 2-I-47 (37.11 g, 73.75 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.56 g, 1.70 mmol), PPh_3 (1.19 g, 4.54 mmol), NaOt-Bu (21.81 g, 226.93 mmol), toluene (330ml)을 상기 Sub 2-1 합성법을 사용하여 생성물 20.01 g (수율: 51%)를 얻었다.

[271] **7. Sub 2-51 합성예**

[272] <반응식 26>

[273]



[274] **(1) Sub 2-I-51 합성**

[275] 출발물질인 di(naphthalen-1-yl)amine (40.03 g, 148.62 mmol), 1,3,5-tribromobenzene (60.82 g, 193.21 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (4.08 g, 4.46 mmol), PPh_3 (3.12 g, 11.89 mmol), NaOt-Bu (57.14 g, 594.49 mmol), toluene (860ml)을 상기 Sub 2-I-1 합성법을 사용하여 생성물 36.65 g (수율: 49%)를 얻었다.

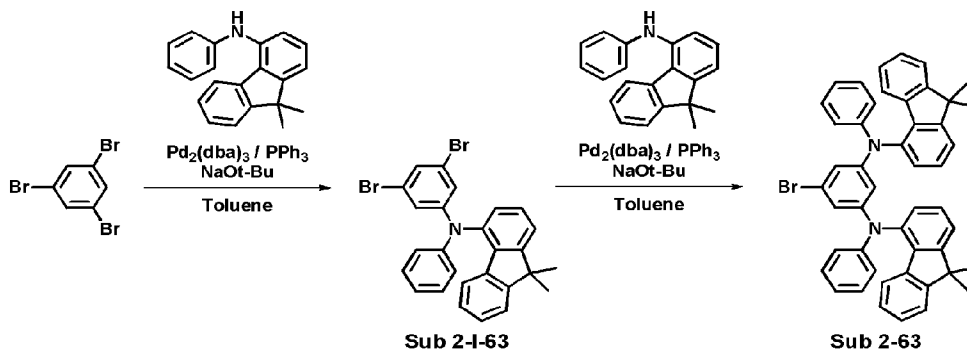
[276] **(2) Sub 2-51 합성**

[277] di(naphthalen-2-yl)amine (15.09 g, 56.03 mmol), Sub 2-I-51 (36.65 g, 72.83 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.54 g, 1.68 mmol), PPh_3 (1.18 g, 4.48 mmol), NaOt-Bu (21.54 g, 224.10 mmol), toluene (320ml)을 상기 Sub 2-1 합성법을 사용하여 생성물 20.54 g (수율: 53%)를 얻었다.

[278] **8. Sub 2-63 합성예**

[279] <반응식 27>

[280]



[281] **(1) Sub 2-I-63 합성**

[282] 출발물질인 9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluoren-4-amine (42.99 g, 150.64 mmol), 1,3,5-tribromobenzene (61.65 g, 195.83 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (4.14 g, 4.52 mmol), PPh_3

(3.16 g, 12.05 mmol), NaOt-Bu (57.91 g, 602.57 mmol), toluene (870ml)을 상기 Sub 2-I-1 합성법을 사용하여 생성물 35.98 g (수율: 46%)를 얻었다.

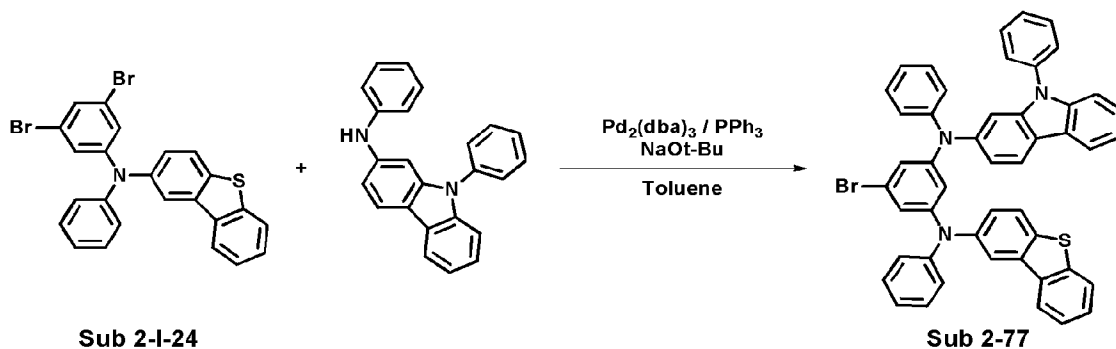
[283] (2)Sub 2-63 합성

[284] 9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluoren-4-amine (15.21 g, 53.30 mmol), Sub 2-I-63 (35.98 g, 69.29 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.46 g, 1.60 mmol), PPh₃ (1.12 g, 4.26 mmol), NaOt-Bu (20.49 g, 213.19 mmol), toluene (310ml)을 상기 Sub 2-1 합성법을 사용하여 생성물 18.52 g (수율: 48%)를 얻었다.

[285] **10. Sub 2-77 합성예**

[286] <반응식 28>

[287]

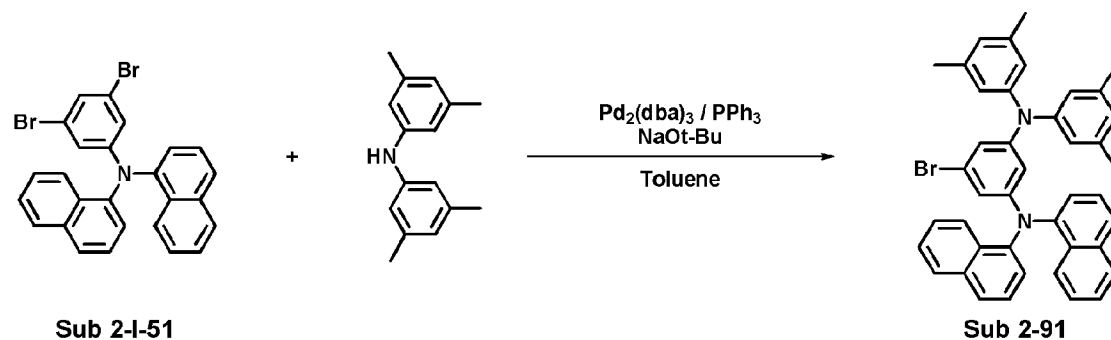


[288] N,9-diphenyl-9H-carbazol-2-amine (18.63 g, 55.71 mmol), Sub 2-I-24 (36.88 g, 72.42 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.53 g, 1.67 mmol), PPh₃ (1.17 g, 4.46 mmol), NaOt-Bu (21.42 g, 222.84 mmol), toluene (320ml)을 상기 Sub 2-1 합성법을 사용하여 생성물 22.95 g (수율: 54%)를 얻었다.

[289] **11. Sub 2-91 합성예**

[290] <반응식 29>

[291]

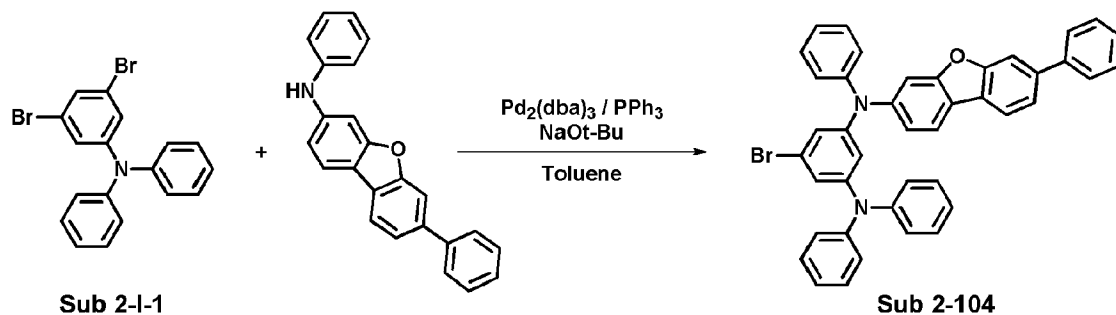


[292] bis(3,5-dimethylphenyl)amine (11.88 g, 52.72 mmol), Sub 2-I-51 (34.49 g, 68.54 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.45 g, 1.58 mmol), PPh₃ (1.11 g, 4.22 mmol), NaOt-Bu (20.27 g, 210.89 mmol), toluene (300ml)을 상기 Sub 2-1 합성법을 사용하여 생성물 15.71 g (수율: 46%)를 얻었다.

[293] **12. Sub 2-104 합성예**

[294] <반응식 30>

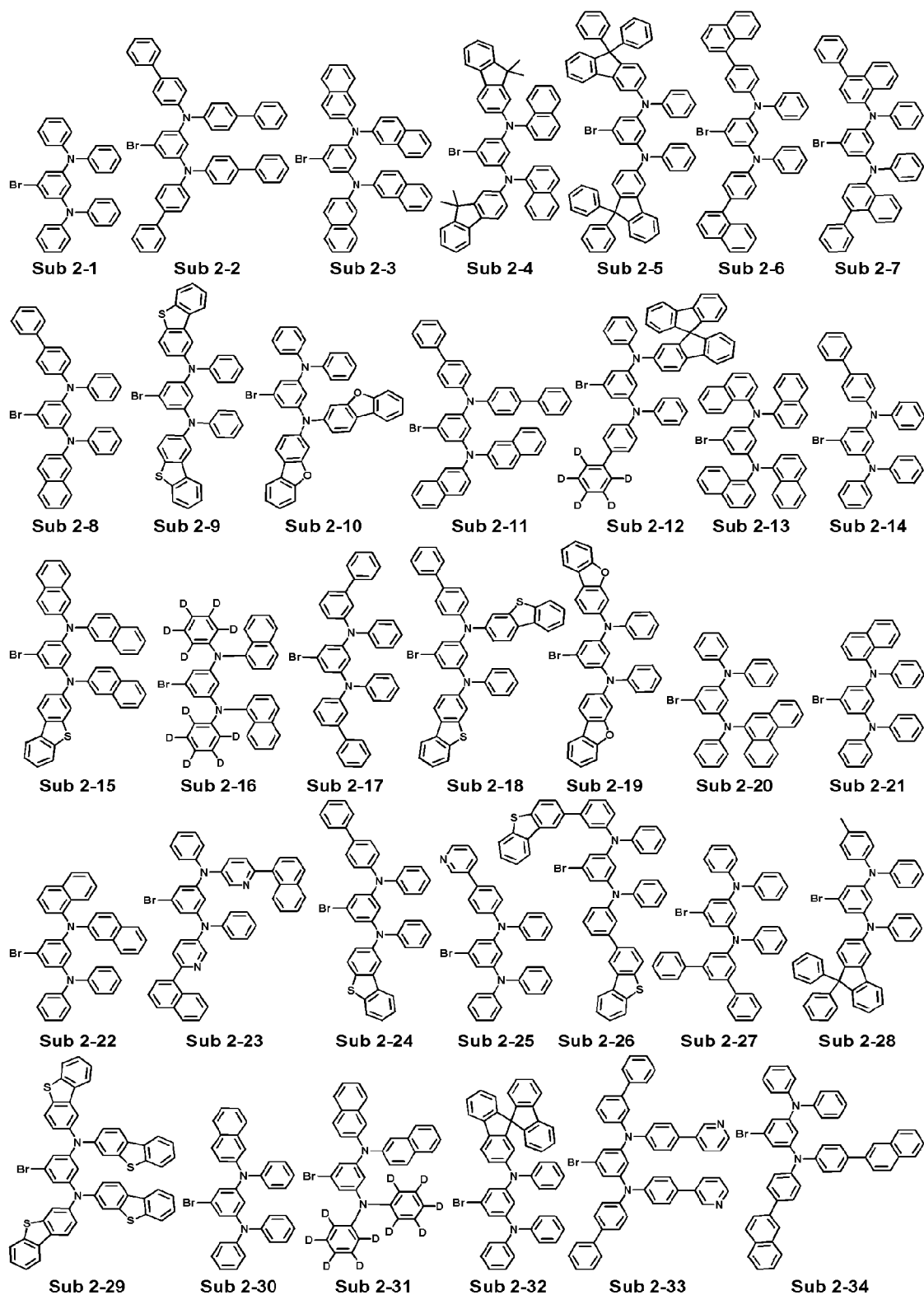
[295]



[296] N,7-diphenyldibenzo[b,d]furan-3-amine (16.92 g, 50.45 mmol), Sub 2-I-1 (26.44 g, 65.58 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.39 g, 1.51 mmol), PPh_3 (1.06 g, 4.04 mmol), NaOt-Bu (19.39 g, 201.79 mmol), toluene (290ml)을 상기 Sub 2-1 합성법을 사용하여 생성물 17.58 g (수율: 53%)를 얻었다.

[297] 한편, Sub 2에 속하는 화합물은 아래와 같은 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니며, 표 2는 Sub 2에 속하는 화합물의 FD-MS 값을 나타낸 것이다.

[298]



Sub 2-35

Sub 2-36

Sub 2-37

Sub 2-38

Sub 2-39

Sub 2-40

Sub 2-41

Sub 2-42

Sub 2-43

Sub 2-44

Sub 2-45

Sub 2-46

Sub 2-47

Sub 2-48

Sub 2-49

Sub 2-50

Sub 2-51

Sub 2-52

Sub 2-53

Sub 2-54

Sub 2-55

Sub 2-56

Sub 2-57

Sub 2-58

Sub 2-59

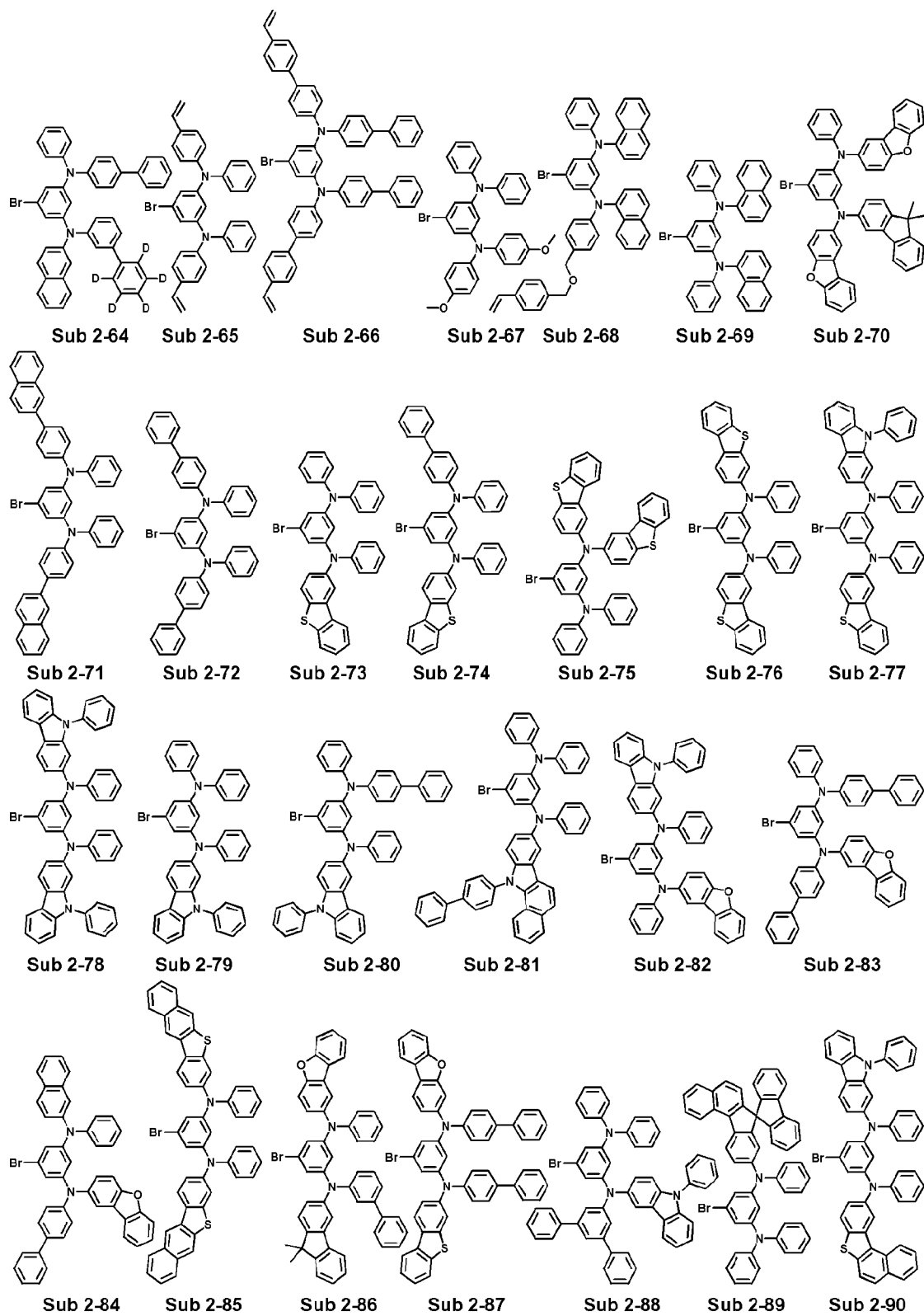
Sub 2-60

Sub 2-61

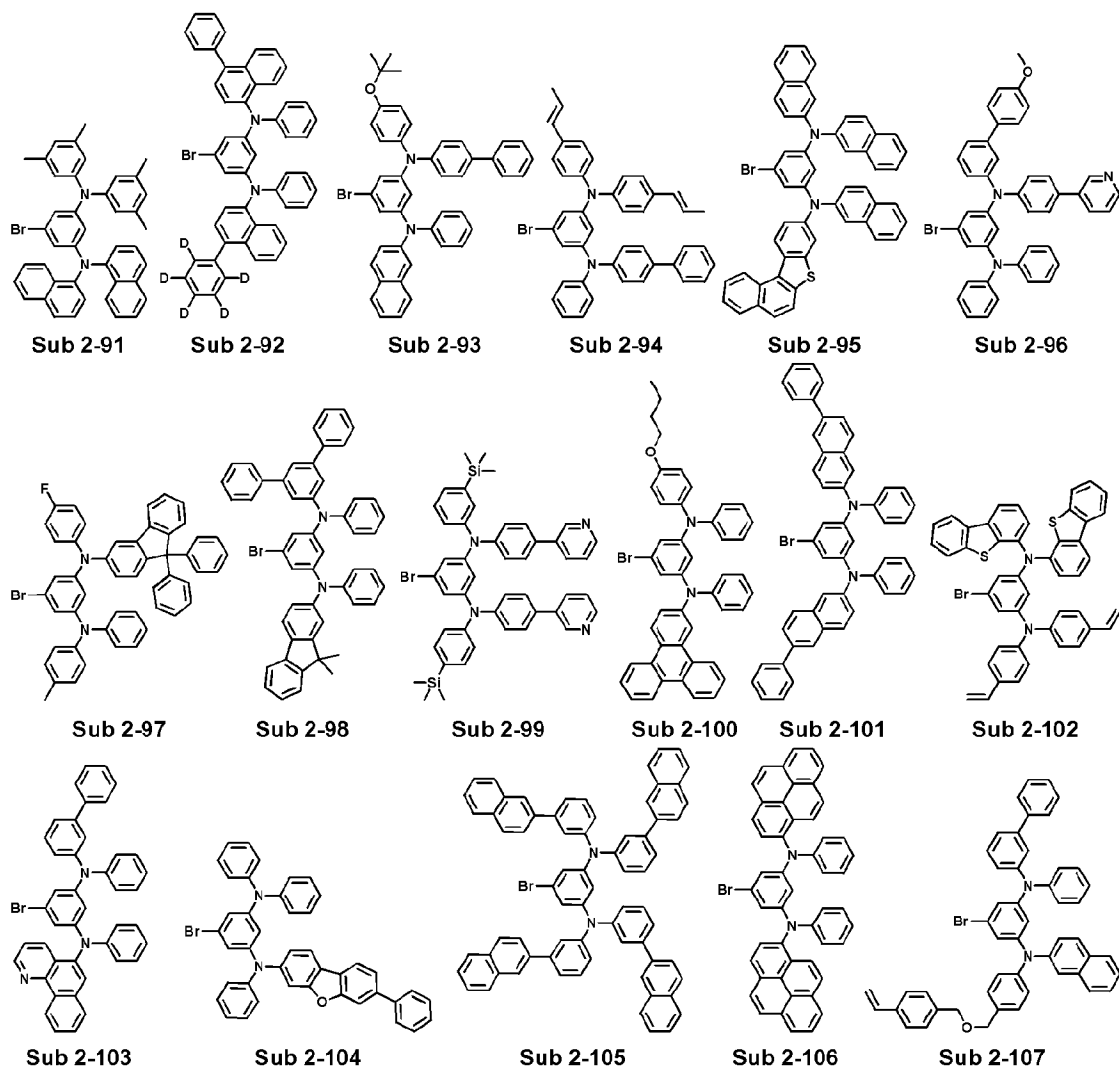
Sub 2-62

Sub 2-63

[300]



[301]



[302]

[표 2]

[303]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 2-1	m/z=490.10(C ₃₀ H ₂₃ BrN ₂ =491.42)	Sub 2-2	m/z=794.23(C ₅₄ H ₃₉ BrN ₂ =795.80)
Sub 2-3	m/z=690.17(C ₄₆ H ₃₁ BrN ₂ =691.66)	Sub 2-4	m/z=822.26(C ₅₆ H ₄₃ BrN ₂ =823.86)
Sub 2-5	m/z=970.29(C ₆₈ H ₄₇ BrN ₂ =972.02)	Sub 2-6	m/z=742.20(C ₅₀ H ₃₅ BrN ₂ =743.73)
Sub 2-7	m/z=742.20(C ₅₀ H ₃₅ BrN ₂ =743.73)	Sub 2-8	m/z=616.15(C ₄₀ H ₂₉ BrN ₂ =617.58)
Sub 2-9	m/z=702.08(C ₄₂ H ₂₇ BrN ₂ S ₂ =703.71)	Sub 2-10	m/z=670.13(C ₄₂ H ₂₇ BrN ₂ O ₂ =671.58)
Sub 2-11	m/z=742.20(C ₅₀ H ₃₅ BrN ₂ =743.73)	Sub 2-12	m/z=809.25(C ₅₅ H ₃₂ D ₅ BrN ₂ =810.83)
Sub 2-13	m/z=690.17(C ₄₆ H ₃₁ BrN ₂ =691.66)	Sub 2-14	m/z=566.14(C ₃₆ H ₂₇ BrN ₂ =567.52)
Sub 2-15	m/z=746.14(C ₄₈ H ₃₁ BrN ₂ S=747.74)	Sub 2-16	m/z=600.20(C ₃₈ H ₁₇ D ₁₀ BrN ₂ =601.60)
Sub 2-17	m/z=642.17(C ₄₂ H ₃₁ BrN ₂ =643.61)	Sub 2-18	m/z=778.11(C ₄₈ H ₃₁ BrN ₂ S ₂ =779.81)
Sub 2-19	m/z=670.13(C ₄₂ H ₂₇ BrN ₂ O ₂ =671.58)	Sub 2-20	m/z=590.14(C ₃₈ H ₂₇ BrN ₂ =591.54)
Sub 2-21	m/z=540.12(C ₃₄ H ₂₅ BrN=541.48)	Sub 2-22	m/z=590.14(C ₃₈ H ₂₇ BrN ₂ =591.54)
Sub 2-23	m/z=744.19(C ₄₈ H ₃₃ BrN ₄ =745.71)	Sub 2-24	m/z=672.12(C ₄₂ H ₂₉ BrN ₂ S=673.66)
Sub 2-25	m/z=567.13(C ₃₅ H ₂₆ BrN ₃ =568.51)	Sub 2-26	m/z=854.14(C ₅₄ H ₃₅ BrN ₂ S ₂ =855.90)
Sub 2-27	m/z=642.17(C ₄₂ H ₃₁ BrN ₂ =643.63)	Sub 2-28	m/z=744.21(C ₅₀ H ₃₇ BrN ₂ =745.75)
Sub 2-29	m/z=914.06(C ₅₄ H ₃₁ BrN ₂ S ₄ =916.00)	Sub 2-30	m/z=540.12(C ₃₄ H ₂₅ BrN ₂ =541.48)
Sub 2-31	m/z=600.20(C ₃₈ H ₁₇ D ₁₀ BrN ₂ =601.60)	Sub 2-32	m/z=728.18(C ₄₉ H ₃₃ BrN ₂ =729.70)
Sub 2-33	m/z=796.22(C ₅₂ H ₃₇ BrN ₄ =797.78)	Sub 2-34	m/z=742.20(C ₅₀ H ₃₅ BrN ₂ =743.73)
Sub 2-35	m/z=566.14(C ₃₆ H ₂₇ BrN ₂ =567.52)	Sub 2-36	m/z=682.20(C ₄₅ H ₃₃ BrN ₂ =683.68)
Sub 2-37	m/z=518.14(C ₃₂ H ₂₇ BrN ₂ =519.47)	Sub 2-38	m/z=616.15(C ₄₀ H ₂₉ BrN ₂ =617.58)
Sub 2-39	m/z=492.09(C ₂₈ H ₂₁ BrN ₄ =493.40)	Sub 2-40	m/z=758.23(C ₅₁ H ₃₉ BrN ₂ =759.77)
Sub 2-41	m/z=606.17(C ₃₉ H ₃₁ BrN ₂ =607.58)	Sub 2-42	m/z=614.14(C ₄₀ H ₂₇ BrN ₂ =615.56)
Sub 2-43	m/z=541.12(C ₃₃ H ₂₄ BrN ₃ =542.47)	Sub 2-44	m/z=690.17(C ₄₆ H ₃₁ BrN ₂ =691.66)
Sub 2-45	m/z=794.23(C ₅₄ H ₃₉ BrN ₂ =795.80)	Sub 2-46	m/z=672.12(C ₄₂ H ₂₉ BrN ₂ S=673.66)
Sub 2-47	m/z=690.17(C ₄₆ H ₃₁ BrN ₂ =691.66)	Sub 2-48	m/z=670.20(C ₄₄ H ₃₃ BrN ₂ =671.67)
Sub 2-49	m/z=686.10(C ₄₂ H ₂₇ BrN ₂ OS=687.65)	Sub 2-50	m/z=748.19(C ₄₈ H ₃₇ BrN ₂ Si=749.81)
Sub 2-51	m/z=690.17(C ₄₆ H ₃₁ BrN ₂ =691.66)	Sub 2-52	m/z=954.35(C ₆₆ H ₅₅ BrN ₂ =956.06)
Sub 2-53	m/z=780.21(C ₅₃ H ₃₇ BrN ₂ =781.78)	Sub 2-54	m/z=642.17(C ₄₂ H ₃₁ BrN ₂ =643.61)
Sub 2-55	m/z=617.15(C ₃₉ H ₂₈ BrN ₃ =618.56)	Sub 2-56	m/z=794.23(C ₅₄ H ₃₉ BrN ₂ =795.80)
Sub 2-57	m/z=610.15(C ₃₄ H ₃₁ BrN ₂ O ₄ =611.52)	Sub 2-58	m/z=518.14(C ₃₂ H ₂₇ BrN ₂ =519.47)
Sub 2-59	m/z=642.17(C ₄₂ H ₃₁ BrN ₂ =643.61)	Sub 2-60	m/z=698.14(C ₄₄ H ₃₁ BrN ₂ S=699.70)
Sub 2-61	m/z=492.09(C ₂₈ H ₂₁ BrN ₄ =493.40)	Sub 2-62	m/z=742.20(C ₅₀ H ₃₅ BrN ₂ =743.73)
Sub 2-63	m/z=722.23(C ₄₈ H ₃₉ BrN ₂ =723.74)	Sub 2-64	m/z=697.21(C ₄₆ H ₂₈ D ₅ BrN ₂ =698.70)
Sub 2-65	m/z=542.14(C ₃₄ H ₂₇ BrN ₂ =543.50)	Sub 2-66	m/z=846.26(C ₅₈ H ₄₃ BrN ₂ =847.88)
Sub 2-67	m/z=550.13(C ₃₂ H ₂₇ BrN ₂ O ₂ =551.47)	Sub 2-68	m/z=736.21(C ₄₈ H ₃₇ BrN ₂ O=737.72)
Sub 2-69	m/z=590.14(C ₃₈ H ₂₇ BrN ₂ =591.54)	Sub 2-70	m/z=786.19(C ₅₁ H ₃₅ BrN ₂ O ₂ =787.74)

[304]

Sub 2-71	m/z=742.20(C ₅₀ H ₃₅ BrN ₂ =743.73)	Sub 2-72	m/z=642.17(C ₄₂ H ₃₁ BrN ₂ =643.61)
Sub 2-73	m/z=596.09(C ₃₆ H ₂₅ BrN ₂ S=597.57)	Sub 2-74	m/z=672.12(C ₄₂ H ₂₉ BrN ₂ S=673.66)
Sub 2-75	m/z=702.08(C ₄₂ H ₂₇ BrN ₂ S ₂ =703.71)	Sub 2-76	m/z=702.08(C ₄₂ H ₂₇ BrN ₂ S ₂ =703.71)
Sub 2-77	m/z=761.15(C ₄₈ H ₃₂ BrN ₃ S=762.76)	Sub 2-78	m/z=820.22(C ₅₄ H ₃₇ BrN ₄ =821.80)
Sub 2-79	m/z=655.16(C ₄₂ H ₃₀ BrN ₃ =656.61)	Sub 2-80	m/z=731.19(C ₄₈ H ₃₄ BrN ₃ =732.71)
Sub 2-81	m/z=781.21(C ₅₂ H ₃₆ BrN ₃ =782.77)	Sub 2-82	m/z=745.17(C ₄₈ H ₃₂ BrN ₃ O=746.69)
Sub 2-83	m/z=732.18(C ₄₈ H ₃₃ BrN ₂ O=733.69)	Sub 2-84	m/z=706.16(C ₄₆ H ₃₁ BrN ₂ O=707.66)
Sub 2-85	m/z=802.11(C ₅₀ H ₃₁ BrN ₂ S ₂ =803.83)	Sub 2-86	m/z=772.21(C ₅₁ H ₃₇ BrN ₂ O=773.76)
Sub 2-87	m/z=838.17(C ₅₄ H ₃₅ BrN ₂ OS=839.84)	Sub 2-88	m/z=807.22(C ₅₄ H ₃₈ BrN ₃ =808.80)
Sub 2-89	m/z=778.20(C ₅₃ H ₃₅ BrN ₂ =779.76)	Sub 2-90	m/z=811.17(C ₅₂ H ₃₄ BrN ₃ S=812.82)
Sub 2-91	m/z=646.20(C ₄₂ H ₃₅ BrN ₂ =647.64)	Sub 2-92	m/z=747.23(C ₅₀ H ₃₀ D ₅ BrN ₂ =748.76)
Sub 2-93	m/z=688.21(C ₄₄ H ₃₇ BrN ₂ O=689.68)	Sub 2-94	m/z=646.20(C ₄₂ H ₃₅ BrN ₂ =647.64)
Sub 2-95	m/z=796.15(C ₅₂ H ₃₃ BrN ₂ S=797.80)	Sub 2-96	m/z=673.17(C ₄₂ H ₃₂ BrN ₃ O=674.63)
Sub 2-97	m/z=762.20(C ₅₀ H ₃₆ BrFN ₂ =763.74)	Sub 2-98	m/z=758.23(C ₅₁ H ₃₉ BrN ₂ =759.77)
Sub 2-99	m/z=788.24(C ₄₆ H ₄₅ BrN ₄ Si ₂ =789.95)	Sub 2-100	m/z=712.21(C ₄₆ H ₃₇ BrN ₂ O=713.70)
Sub 2-101	m/z=742.20(C ₅₀ H ₃₅ BrN ₂ =743.73)	Sub 2-102	m/z=754.11(C ₄₆ H ₃₁ BrN ₂ S ₂ =755.79)
Sub 2-103	m/z=667.16(C ₄₃ H ₃₀ BrN ₃ =668.62)	Sub 2-104	m/z=656.15(C ₄₂ H ₂₉ BrN ₂ O=657.60)
Sub 2-105	m/z=994.29(C ₇₀ H ₄₇ BrN ₂ =996.04)	Sub 2-106	m/z=738.17(C ₅₀ H ₃₁ BrN ₂ =739.70)
Sub 2-107	m/z=762.22(C ₅₀ H ₃₉ BrN ₂ O=763.76)		

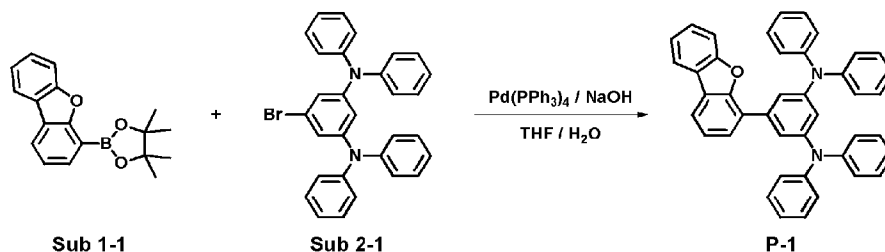
[305] **III. Product 합성**

[306] Sub 1 (1 당량)을 둥근바닥플라스크에 THF로 녹인 후에, Sub 2 (1 당량), Pd(PPh₃)₄ (0.03 당량), NaOH (3 당량), H₂O를 첨가하고 80°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 최종 생성물 (final product)를 얻었다.

[307] **1. P-1 합성예**

[308] <반응식 31>

[309]

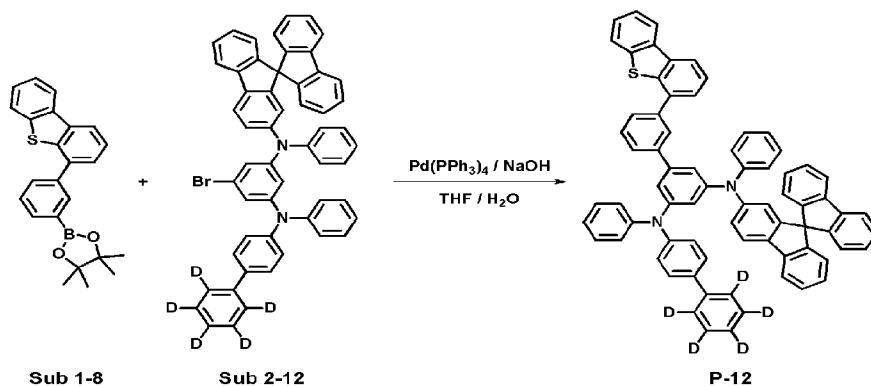


[310] 상기 Sub 1-1 (6.83 g, 23.23 mmol)를 둥근바닥플라스크에 THF (80ml)로 녹인 후에, Sub 2-1 (11.42 g, 23.23 mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.81 g, 0.70 mmol), NaOH (2.79 g, 69.69 mmol), 물 (40ml)을 첨가하고 80°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 10.08 g (수율: 75%)을 얻었다.

[311] **2. P-12 합성예**

[312] <반응식 32>

[313]

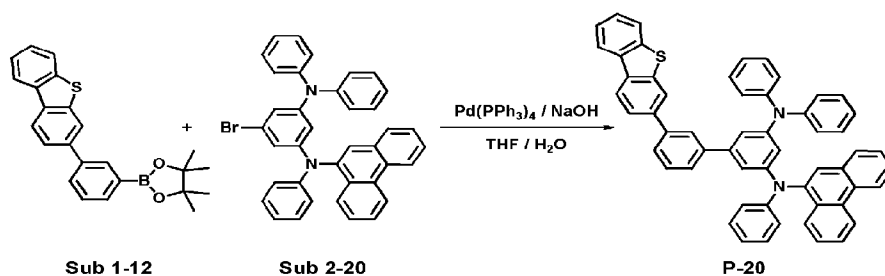


[314] 상기 Sub 1-8 (6.40 g, 16.56 mmol)에 Sub 2-12 (13.43 g, 16.56 mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.57 g, 0.50 mmol), NaOH (1.99 g, 46.69 mmol), THF (60ml), 물 (30ml)을 첨가하고 상기 P-1 합성법을 사용하여 생성물 10.66 g (수율: 65%)을 얻었다.

[315] **3. P-20 합성예**

[316] <반응식 33>

[317]

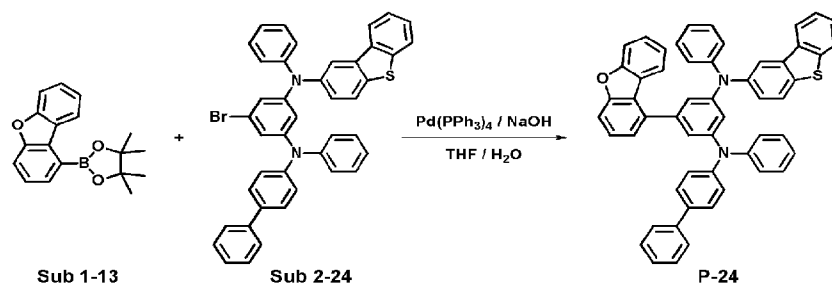


[318] 상기 Sub 1-12 (7.09 g, 18.34 mmol)에 Sub 2-20 (10.85 g, 18.34 mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.64 g, 0.55 mmol), NaOH (2.20 g, 55.03 mmol), THF (60ml), 물 (30ml)을 첨가하고 상기 P-1 합성법을 사용하여 생성물 11.32 g (수율: 80%)을 얻었다.

[319] **4. P-24 합성예**

[320] <반응식 34>

[321]

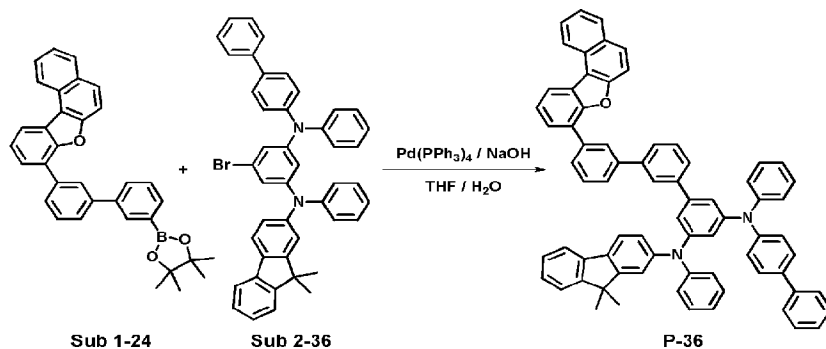


[322] 상기 Sub 1-13 (8.64 g, 29.36 mmol)에 Sub 2-24 (19.78 g, 29.36 mmol), Pd(PPh₃)₄ (1.02 g, 0.88 mmol), NaOH (3.52 g, 88.08 mmol), THF (100ml), 물 (50ml)을 첨가하고 상기 P-1 합성법을 사용하여 생성물 14.08 g (수율: 63%)을 얻었다.

[323] **5. P-36 합성예**

[324] <반응식 35>

[325]

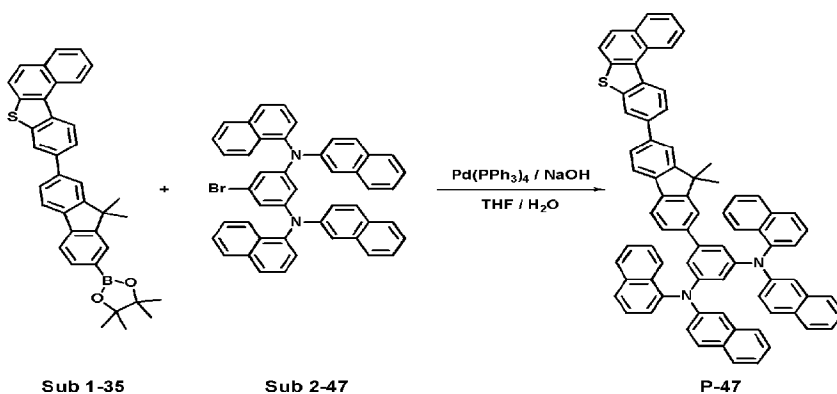


[326] 상기 Sub 1-24 (12.42 g, 25.02 mmol)에 Sub 2-36 (17.10 g, 25.02 mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.87 g, 0.75 mmol), NaOH (3.00 g, 75.05 mmol), THF (80ml), 물 (40ml)을 첨가하고 상기 P-1 합성법을 사용하여 생성물 12.17 g (수율: 50%)을 얻었다.

[327] **6. P-47 합성에**

[328] <반응식 36>

[329]

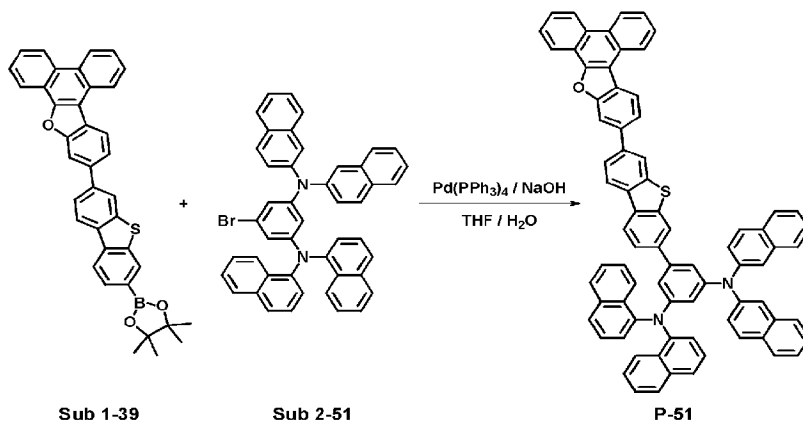


[330] 상기 Sub 1-35 (12.90 g, 23.35 mmol)에 Sub 2-47 (16.15 g, 23.35 mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.81 g, 0.70 mmol), NaOH (2.80 g, 70.04 mmol), THF (80ml), 물 (40ml)을 첨가하고 상기 P-1 합성법을 사용하여 생성물 11.87 g (수율: 49%)을 얻었다.

[331] **7. P-51 합성에**

[332] <반응식 37>

[333]

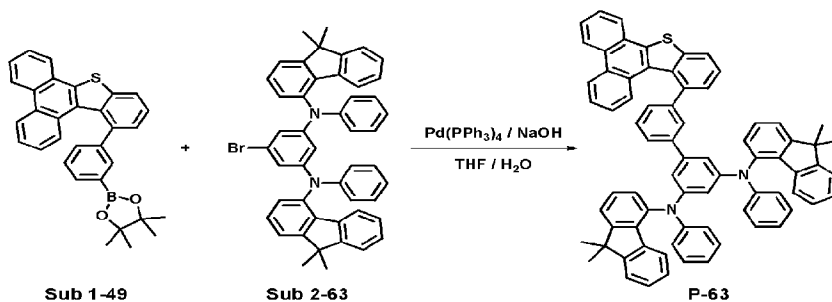


[334] 상기 Sub 1-39 (11.77 g, 20.41 mmol)에 Sub 2-51 (14.12 g, 20.41 mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.71 g, 0.61 mmol), NaOH (2.45 g, 61.25 mmol), THF (70ml), 물 (35ml)을 첨가하고 상기 P-1 합성법을 사용하여 생성물 9.75 g (수율: 45%)을 얻었다.

[335] **8. P-63 합성예**

[336] <반응식 38>

[337]

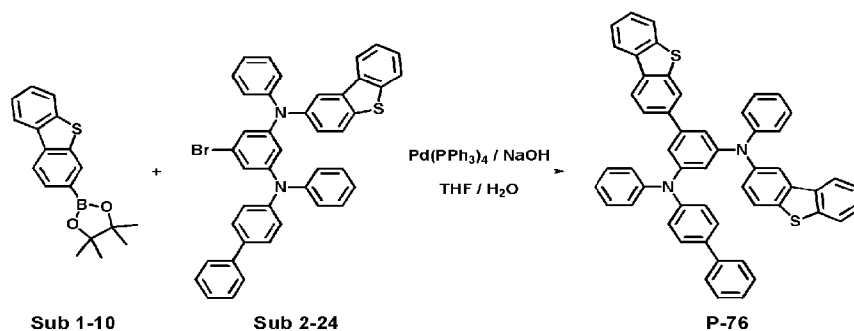


[338] 상기 Sub 1-49 (9.33 g, 19.18 mmol)에 Sub 2-63 (13.88 g, 19.18 mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.66 g, 0.58 mmol), NaOH (2.30 g, 57.54 mmol), THF (60ml), 물 (30ml)을 첨가하고 상기 P-1 합성법을 사용하여 생성물 13.09 g (수율: 68%)을 얻었다.

[339] **9. P-76 합성예**

[340] <반응식 39>

[341]

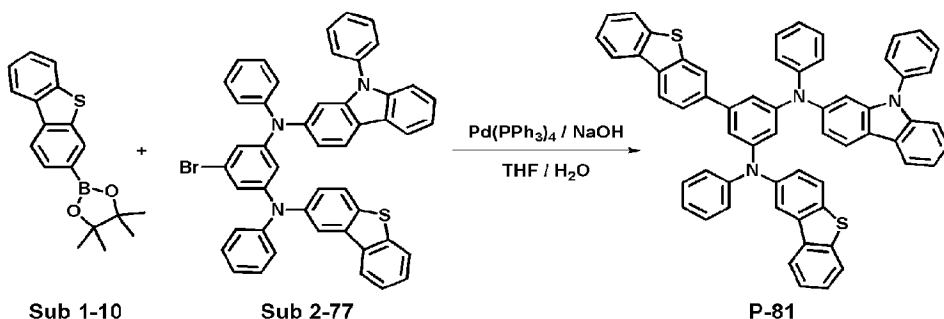


[342] 상기 Sub 1-10 (7.05 g, 22.73 mmol)에 Sub 2-24 (15.31 g, 22.73 mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.79 g, 0.68 mmol), NaOH (2.73 g, 68.18 mmol), THF (80ml), 물 (40ml)을 첨가하고 상기 P-1 합성법을 사용하여 생성물 12.71 g (수율: 72%)을 얻었다.

[343] **10. P-81 합성예**

[344] <반응식 40>

[345]

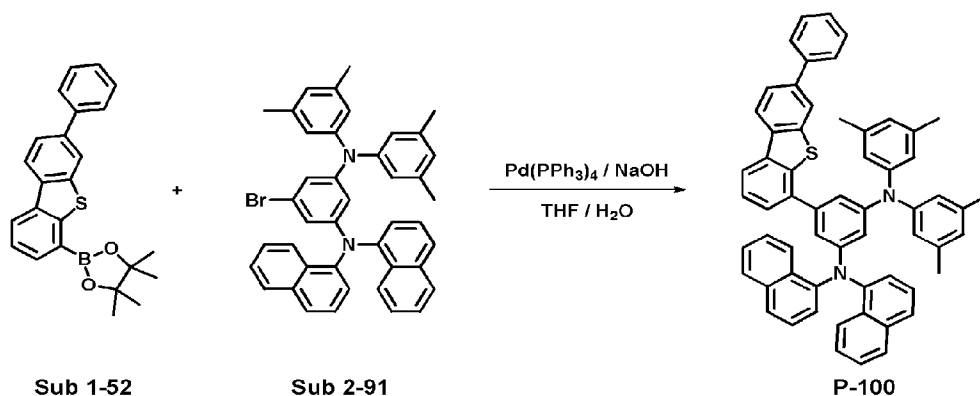


[346] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-10 (8.40 g, 27.08 mmol)에 Sub 2-77 (20.65 g, 27.08 mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.94 g, 0.81 mmol), NaOH (3.25 g, 81.23 mmol), THF (90ml), 물 (45ml)을 첨가하고 상기 P-1 합성법을 사용하여 생성물 16.42 g (수율: 70%)을 얻었다.

[347] **11. P-100 합성예**

[348] <반응식 41>

[349]

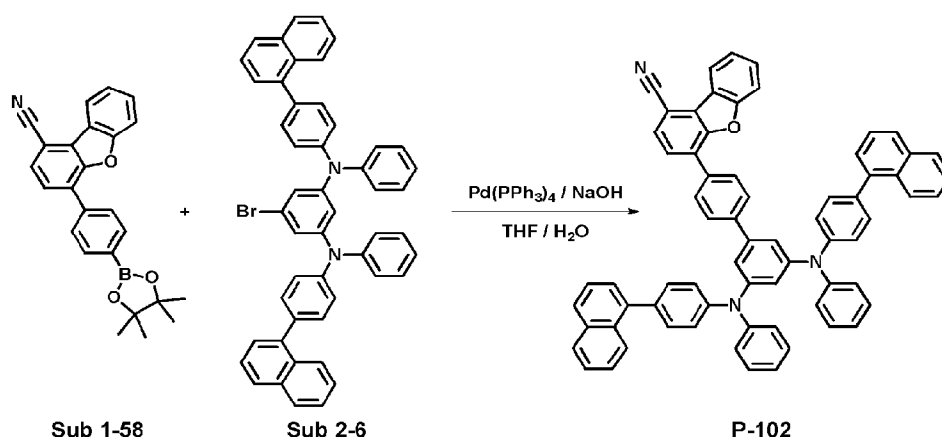


[350] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-52 (8.18 g, 21.17 mmol)에 Sub 2-91 (13.71 g, 21.17 mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.73 g, 0.64 mmol), NaOH (2.54 g, 63.52 mmol), THF (70ml), 물 (35ml)을 첨가하고 상기 P-1 합성법을 사용하여 생성물 11.38 g (수율: 65%)을 얻었다.

[351] **12. P-102 합성예**

[352] <반응식 42>

[353]

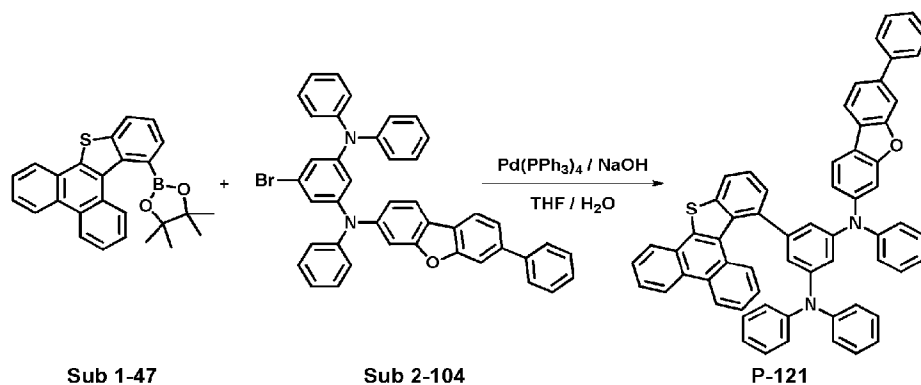


[354] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-58 (8.50 g, 21.50 mmol)에 Sub 2-6 (15.99 g, 21.50 mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.75 g, 0.65 mmol), NaOH (2.58 g, 64.51 mmol), THF (70ml), 물 (35ml)을 첨가하고 상기 P-1 합성법을 사용하여 생성물 11.63 g (수율: 58%)을 얻었다.

[355] **13. P-121 합성예**

[356] <반응식 43>

[357]



[358] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-47 (10.00 g, 24.37 mmol)에 Sub 2-104 (16.03 g, 24.37 mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.84 g, 0.73 mmol), NaOH (2.92 g, 73.11 mmol), THF (80ml), 물 (40ml)을 첨가하고 상기 P-1 합성법을 사용하여 생성물 13.64 g (수율: 65%)을 얻었다.

[359] 한편, 상기와 같은 합성예에 따라 제조된 본 발명의 화합물 P-1 내지 P-96의 FD-MS 값은 하기 표 3과 같다.

[360] [표 3]

[361]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
P-1	m/z=578.24(C ₄₂ H ₃₀ N ₂ O=578.70)	P-2	m/z=882.36(C ₆₆ H ₄₆ N ₂ O=883.08)
P-3	m/z=794.28(C ₅₈ H ₃₈ N ₂ S=795.00)	P-4	m/z=926.37(C ₆₈ H ₅₀ N ₂ S=927.20)
P-5	m/z=1134.45(C ₈₆ H ₅₈ N ₂ O=1135.39)	P-6	m/z=906.36(C ₆₈ H ₄₆ N ₂ O=907.11)
P-7	m/z=922.34(C ₆₈ H ₄₆ N ₂ S=923.17)	P-8	m/z=796.29(C ₅₈ H ₄₀ N ₂ S=797.02)
P-9	m/z=916.26(C ₆₄ H ₄₀ N ₂ OS ₂ =917.15)	P-10	m/z=926.30(C ₆₆ H ₄₂ N ₂ O ₂ S=927.12)
P-11	m/z=906.36(C ₆₈ H ₄₆ N ₂ O=907.11)	P-12	m/z=989.39(C ₇₃ H ₄₃ D ₅ N ₂ S=990.27)
P-13	m/z=778.30(C ₅₈ H ₃₈ N ₂ O=778.94)	P-14	m/z=654.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ O=654.80)
P-15	m/z=850.25(C ₆₀ H ₃₈ N ₂ S ₂ =851.09)	P-16	m/z=704.31(C ₅₀ H ₂₄ D ₁₀ N ₂ S=704.94)
P-17	m/z=746.28(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ S=746.96)	P-18	m/z=866.24(C ₆₀ H ₃₈ N ₂ OS ₂ =867.09)
P-19	m/z=834.29(C ₆₀ H ₃₈ N ₂ O ₃ =834.96)	P-20	m/z=770.28(C ₅₆ H ₃₈ N ₂ S=770.98)
P-21	m/z=628.25(C ₄₆ H ₃₂ N ₂ O=628.76)	P-22	m/z=694.24(C ₅₀ H ₃₄ N ₂ S=694.88)
P-23	m/z=848.30(C ₆₀ H ₄₀ N ₄ S=849.05)	P-24	m/z=760.25(C ₅₄ H ₃₆ N ₂ OS=760.94)
P-25	m/z=671.24(C ₄₇ H ₃₃ N ₃ S=671.85)	P-26	m/z=942.27(C ₆₆ H ₄₂ N ₂ OS ₂ =943.18)
P-27	m/z=822.31(C ₆₀ H ₄₂ N ₂ S=823.05)	P-28	m/z=908.38(C ₆₈ H ₄₈ N ₂ O=909.12)
P-29	m/z=1052.20(C ₇₀ H ₄₀ N ₂ OS ₄ =1053.34)	P-30	m/z=694.24(C ₅₀ H ₃₄ N ₂ S=694.88)
P-31	m/z=814.38(C ₆₀ H ₃₀ D ₁₀ N ₂ O=815.03)	P-32	m/z=1034.37(C ₇₇ H ₅₀ N ₂ S=1035.30)
P-33	m/z=934.37(C ₆₈ H ₄₆ N ₄ O=935.12)	P-34	m/z=896.32(C ₆₆ H ₄₄ N ₂ S=897.13)
P-35	m/z=796.29(C ₅₈ H ₄₀ N ₂ S=797.02)	P-36	m/z=972.41(C ₇₃ H ₅₂ N ₂ O=973.21)
P-37	m/z=722.28(C ₅₂ H ₃₈ N ₂ S=722.94)	P-38	m/z=804.31(C ₆₀ H ₄₀ N ₂ O=804.97)
P-39	m/z=772.27(C ₅₄ H ₃₆ N ₄ S=772.96)	P-40	m/z=1022.42(C ₇₇ H ₅₄ N ₂ O=1023.27)
P-41	m/z=744.31(C ₅₅ H ₄₀ N ₂ O=744.92)	P-42	m/z=768.26(C ₅₆ H ₃₆ N ₂ S=768.96)
P-43	m/z=755.29(C ₅₅ H ₃₇ N ₃ O=755.90)	P-44	m/z=920.32(C ₆₈ H ₄₄ N ₂ S=921.16)
P-45	m/z=948.35(C ₇₀ H ₄₈ N ₂ S=949.21)	P-46	m/z=810.27(C ₅₈ H ₃₈ N ₂ OS=811.00)
P-47	m/z=1036.39(C ₇₇ H ₅₂ N ₂ S=1037.32)	P-48	m/z=884.38(C ₆₆ H ₄₈ N ₂ O=885.10)
P-49	m/z=874.27(C ₆₂ H ₃₈ N ₂ O ₂ S=875.04)	P-50	m/z=952.33(C ₆₈ H ₄₈ N ₂ Si=953.27)
P-51	m/z=1060.35(C ₇₈ H ₄₈ N ₂ OS=1061.29)	P-52	m/z=1234.53(C ₉₂ H ₇₀ N ₂ S=1235.62)
P-53	m/z=918.36(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ O=919.12)	P-54	m/z=796.29(C ₅₈ H ₄₀ N ₂ S=797.02)
P-55	m/z=887.30(C ₆₃ H ₄₁ N ₃ OS=888.08)	P-56	m/z=948.35(C ₇₀ H ₄₈ N ₂ S=949.21)
P-57	m/z=764.27(C ₅₀ H ₄₀ N ₂ O ₄ S=764.93)	P-58	m/z=656.28(C ₄₈ H ₃₆ N ₂ O=656.81)
P-59	m/z=912.32(C ₆₆ H ₄₄ N ₂ OS=913.13)	P-60	m/z=836.29(C ₆₀ H ₄₀ N ₂ OS=837.04)
P-61	m/z=696.23(C ₄₈ H ₃₂ N ₄ S=696.86)	P-62	m/z=930.36(C ₇₀ H ₄₆ N ₂ O=931.13)
P-63	m/z=1002.40(C ₇₄ H ₅₄ N ₂ S=1003.30)	P-64	m/z=1011.42(C ₇₆ H ₄₅ D ₅ N ₂ O=1012.25)
P-65	m/z=630.27(C ₄₆ H ₃₄ N ₂ O=630.77)	P-66	m/z=934.39(C ₇₀ H ₅₀ N ₂ O=935.16)
P-67	m/z=704.25(C ₄₈ H ₃₆ N ₂ O ₂ S=704.88)	P-68	m/z=840.32(C ₆₀ H ₄₄ N ₂ OS=841.07)
P-69	m/z=820.29(C ₆₀ H ₄₀ N ₂ S=821.04)	P-70	m/z=966.33(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ O ₂ S=967.18)

[362]

P-71	m/z=694.24(C ₅₀ H ₃₄ N ₂ S=694.88)	P-72	m/z=846.31(C ₆₂ H ₄₂ N ₂ S=847.08)
P-73	m/z=746.28(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ S=746.96)	P-74	m/z=898.34(C ₆₆ H ₄₆ N ₂ S=899.15)
P-75	m/z=700.20(C ₄₈ H ₃₂ N ₂ S ₂ =700.91)	P-76	m/z=776.23(C ₅₄ H ₃₆ N ₂ S ₂ =777.01)
P-77	m/z=776.23(C ₅₄ H ₃₆ N ₂ S ₂ =777.01)	P-78	m/z=806.19(C ₅₄ H ₃₄ N ₂ S ₃ =807.06)
P-79	m/z=806.19(C ₅₄ H ₃₄ N ₂ S ₃ =807.06)	P-80	m/z=806.19(C ₅₄ H ₃₄ N ₂ S ₃ =807.06)
P-81	m/z=865.26(C ₆₀ H ₃₉ N ₃ S ₂ =866.10)	P-82	m/z=924.33(C ₆₆ H ₄₄ N ₄ S=925.15)
P-83	m/z=759.27(C ₅₄ H ₃₇ N ₃ S=759.96)	P-84	m/z=835.30(C ₆₀ H ₄₁ N ₃ S=836.05)
P-85	m/z=935.33(C ₆₈ H ₄₅ N ₃ S=936.17)	P-86	m/z=899.30(C ₆₄ H ₄₁ N ₃ OS=900.09)
P-87	m/z=886.30(C ₆₄ H ₄₂ N ₂ OS=887.10)	P-88	m/z=860.29(C ₆₂ H ₄₀ N ₂ OS=861.06)
P-89	m/z=730.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ O=730.89)	P-90	m/z=760.25(C ₅₄ H ₃₆ N ₂ OS=760.94)
P-91	m/z=890.24(C ₆₂ H ₃₈ N ₂ OS ₂ =891.11)	P-92	m/z=860.34(C ₆₃ H ₄₄ N ₂ O ₂ =861.04)
P-93	m/z=926.30(C ₆₆ H ₄₂ N ₂ O ₂ S=927.12)	P-94	m/z=895.36(C ₆₆ H ₄₅ N ₃ O=896.08)
P-95	m/z=866.33(C ₆₅ H ₄₂ N ₂ O=867.04)	P-96	m/z=949.31(C ₆₈ H ₄₃ N ₃ OS=950.15)
P-97	m/z=754.30(C ₅₆ H ₃₈ N ₂ O=754.91)	P-98	m/z=886.39(C ₆₆ H ₄₂ D ₄ N ₂ O=887.11)
P-99	m/z=850.34(C ₆₂ H ₄₆ N ₂ S=851.11)	P-100	m/z=826.34(C ₆₀ H ₄₆ N ₂ S=827.09)
P-101	m/z=1178.48(C ₈₈ H ₆₂ N ₂ O ₂ =1179.45)	P-102	m/z=931.36(C ₆₉ H ₄₅ N ₃ O=932.12)
P-103	m/z=927.37(C ₆₈ H ₄₁ D ₅ N ₂ S=928.20)	P-104	m/z=868.35(C ₆₂ H ₄₈ N ₂ OS=869.12)
P-105	m/z=1006.39(C ₇₆ H ₅₀ N ₂ O=1007.22)	P-106	m/z=734.33(C ₅₄ H ₄₂ N ₂ O=734.92)
P-107	m/z=900.26(C ₆₄ H ₄₀ N ₂ S ₂ =901.15)	P-108	m/z=718.32(C ₅₁ H ₂₆ D ₁₀ N ₂ S=718.97)
P-109	m/z=930.34(C ₆₅ H ₄₆ N ₄ OS=931.15)	P-110	m/z=1170.37(C ₈₄ H ₅₄ N ₂ OS ₂ =1171.47)
P-111	m/z=898.34(C ₆₆ H ₄₆ N ₂ S=899.15)	P-112	m/z=926.37(C ₆₈ H ₄₇ FN ₂ O=927.11)
P-113	m/z=780.31(C ₅₈ H ₄₀ N ₂ O=780.95)	P-114	m/z=1064.42(C ₇₉ H ₅₆ N ₂ S=1065.37)
P-115	m/z=899.37(C ₆₁ H ₅₃ N ₃ OS ₂ =900.26)	P-116	m/z=942.36(C ₆₈ H ₅₀ N ₂ OS=943.20)
P-117	m/z=747.27(C ₅₃ H ₃₇ N ₃ S=747.95)	P-118	m/z=930.36(C ₇₀ H ₄₆ N ₂ O=931.13)
P-119	m/z=942.27(C ₆₆ H ₄₂ N ₂ OS ₂ =943.18)	P-120	m/z=901.31(C ₆₄ H ₄₃ N ₃ OS=902.11)
P-121	m/z=860.29(C ₆₂ H ₄₀ N ₂ OS=861.06)	P-122	m/z=1182.45(C ₉₀ H ₅₈ N ₂ O=1183.44)
P-123	m/z=1043.33(C ₇₇ H ₄₅ N ₃ S=1044.27)	P-124	m/z=1076.43(C ₈₀ H ₅₆ N ₂ O ₂ =1077.31)

[363] 한편, 상기에서는 화학식 1로 표시되는 본 발명의 예시적 합성예를 설명하였지만, 이들은 모두 Suzuki cross-coupling 반응, Miyaura boration 반응, Intramolecular acid-induced cyclization 반응 (*J. mater. Chem.* 1999, **9**, 2095.), Pd(II)-catalyzed oxidative cyclization 반응 (*Org. Lett.* 2011, **13**, 5504) 및 Buchwald-Hartwig cross coupling 반응 등에 기초한 것으로 구체적 합성예에 명시된 치환기 이외에 화학식 1에 정의된 다른 치환기(X, R¹ 내지 R⁷, Ar¹ 내지 Ar⁴, L¹ 내지 L⁵ 등의 치환기)가 결합되더라도 상기 반응이 진행된다는 것을 당업자라면 쉽게 이해할 수 있을 것이다.

[364] 예컨대, 반응식 1에서 Sub 1과 Sub 2 → Final Products 반응 및 반응식 3에서 Sub 1-I → Sub 1 반응은 Suzuki cross-coupling 반응에 기초한 것이고, 반응식 2에서 Sub 1-I → Sub 1 반응은 Miyaura boration 반응에 기초한 것이며, 반응식 4에서

출발물질 -> Sub 1-I 반응은 Intramolecular acid-induced cyclization 반응에 기초한 것이다. 이어서, 반응식 5에서 출발물질 -> Sub 1-I 반응은 Pd(II)-catalyzed oxidative cyclization 반응에 기초한 것이고, 반응식 18에서 출발물질 -> Sub 2-I 반응 및 Sub 2-I -> Sub 2 반응은 Buchwald-Hartwig cross coupling 반응에 기초한 것이다. 이들에 구체적으로 명시되지 않은 치환기가 결합되더라도 상기 반응들은 진행할 것이다.

[365]

[366] 유기전기소자의 제조평가[367] [실시예 I-1] 그린유기전기발광소자 (정공수송층)

[368] 본 발명의 화합물을 정공수송층 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기발광소자를 제작하였다. 먼저, 유기 기판에 형성된 ITO층(양극) 상에 4,4',4"-Tris[2-naphthyl(phenyl)amino]triphenylamine (이하 "2-TNATA"로 약기함)을 60 nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공주입층 상에 본 발명의 화합물 P-1을 60 nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상에 4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl (이하, "CBP"로 약기함)을 호스트 물질로, tris(2-phenylpyridine)-iridium (이하, "Ir(ppy)₃"으로 약기함)을 도판트 물질로 사용하여 90:10 중량비로 도핑함으로써 30nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서 상기 발광층 상에 (1,1'-비스페닐)-4-올레이토)비스(2-메틸-8-퀴놀린올레이토)알루미늄 (이하 "BAIq"로 약기함)을 10 nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 트리스(8-퀴놀리놀)알루미늄 (이하 "Alq₃"로 약기함)을 40 nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 이후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[369] [실시예 I-2] 내지 [실시예 I-58] 그린유기전기발광소자 (정공수송층)

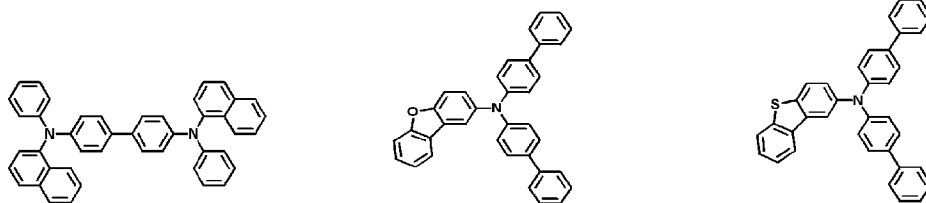
[370] 정공수송층 물질로 본 발명의 화합물 P-1 대신 하기 표 4에 기재된 본 발명의 화합물 P-2 내지 P-96를 사용한 점을 제외하고는 실시예 I-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[371] [비교예 I-1] 내지 [비교예 I-5]

[372] 정공수송층 물질로 본 발명의 화합물 P-1 대신 하기 표 4에 기재된 하기 비교화합물 1 내지 비교화합물 5를 각각 사용한 점을 제외하고는 상기 실시예 I-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

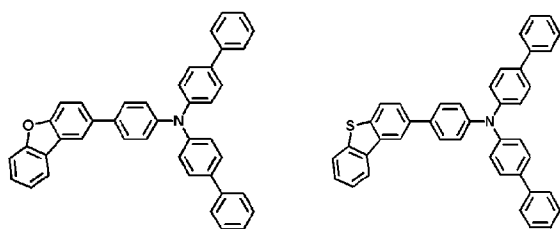
[373] <비교화합물 1> <비교화합물 2> <비교화합물 3>

[374]



[375] <비교화합물 4> <비교화합물 5>

[376]



[377] 본 발명의 실시예 I-1 내지 실시예 I-58 및 비교예 I-1 내지 비교예 I-5에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 그 측정 결과 5000cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였으며, 그 측정 결과는 하기 표 4와 같다.

[378] [표 4]

[379]

	화합물	Voltage (V)	Current Density (mA/cm ²)	Brightness (cd/m ²)	Efficiency (cd/A)	Lifetime T(95)	CIE	
							x	y
비교예(I-1)	비교화합물 1	6.0	21.5	5000	23.3	57.2	0.32	0.61
비교예(I-2)	비교화합물 2	5.9	18.2	5000	27.5	74.5	0.32	0.62
비교예(I-3)	비교화합물 3	5.8	17.3	5000	29.0	78.6	0.33	0.61
비교예(I-4)	비교화합물 4	5.8	17.9	5000	27.9	76.5	0.33	0.62
비교예(I-5)	비교화합물 5	5.8	16.8	5000	29.8	79.2	0.33	0.61
실시예(I-1)	화합물(P-1)	5.7	14.0	5000	35.8	130.2	0.33	0.61
실시예(I-2)	화합물(P-2)	5.5	13.9	5000	36.1	130.5	0.33	0.61
실시예(I-3)	화합물(P-3)	5.7	14.2	5000	35.1	124.0	0.33	0.61
실시예(I-4)	화합물(P-4)	5.6	13.8	5000	36.3	125.9	0.33	0.62
실시예(I-5)	화합물(P-5)	5.7	14.3	5000	35.0	131.1	0.33	0.62
실시예(I-6)	화합물(P-6)	5.7	14.0	5000	35.8	130.5	0.33	0.61
실시예(I-7)	화합물(P-7)	5.7	14.0	5000	35.6	131.2	0.33	0.61
실시예(I-8)	화합물(P-8)	5.6	14.0	5000	35.6	130.6	0.33	0.61
실시예(I-9)	화합물(P-11)	5.7	14.9	5000	33.6	120.8	0.33	0.62
실시예(I-10)	화합물(P-12)	5.7	14.3	5000	34.9	112.6	0.33	0.61
실시예(I-11)	화합물(P-13)	5.6	12.9	5000	38.7	142.8	0.33	0.62
실시예(I-12)	화합물(P-14)	5.5	13.4	5000	37.4	137.1	0.33	0.61
실시예(I-13)	화합물(P-16)	5.6	13.5	5000	37.0	124.7	0.33	0.61
실시예(I-14)	화합물(P-17)	5.6	13.1	5000	38.3	138.1	0.33	0.62
실시예(I-15)	화합물(P-18)	5.7	14.0	5000	35.6	129.9	0.33	0.61
실시예(I-16)	화합물(P-19)	5.5	12.8	5000	39.2	136.2	0.33	0.62
실시예(I-17)	화합물(P-20)	5.5	13.7	5000	36.6	123.3	0.33	0.62
실시예(I-18)	화합물(P-21)	5.7	14.2	5000	35.3	129.1	0.33	0.61
실시예(I-19)	화합물(P-22)	5.7	14.1	5000	35.5	121.3	0.33	0.62
실시예(I-20)	화합물(P-24)	5.7	14.5	5000	34.6	119.3	0.33	0.62
실시예(I-21)	화합물(P-27)	5.7	14.2	5000	35.2	131.2	0.33	0.62
실시예(I-22)	화합물(P-28)	5.6	14.6	5000	34.3	114.5	0.33	0.62
실시예(I-23)	화합물(P-30)	5.7	16.1	5000	31.0	112.9	0.33	0.62
실시예(I-24)	화합물(P-31)	5.7	15.9	5000	31.4	116.8	0.33	0.62
실시예(I-25)	화합물(P-32)	5.7	16.4	5000	30.6	108.4	0.33	0.61
실시예(I-26)	화합물(P-34)	5.7	16.1	5000	31.1	108.5	0.33	0.61
실시예(I-27)	화합물(P-35)	5.6	16.1	5000	31.0	114.4	0.33	0.61

[380]

실시예(I-28)	화합물(P-36)	5.7	16.2	5000	30.9	106.8	0.33	0.61
실시예(I-29)	화합물(P-37)	5.7	16.3	5000	30.7	108.2	0.33	0.61
실시예(I-30)	화합물(P-38)	5.7	16.1	5000	31.0	114.9	0.33	0.61
실시예(I-31)	화합물(P-40)	5.7	16.1	5000	31.0	115.3	0.33	0.62
실시예(I-32)	화합물(P-41)	5.7	14.7	5000	34.1	121.2	0.33	0.61
실시예(I-33)	화합물(P-42)	5.7	15.1	5000	33.2	110.6	0.33	0.61
실시예(I-34)	화합물(P-44)	5.7	15.3	5000	32.7	113.6	0.33	0.61
실시예(I-35)	화합물(P-45)	5.7	14.9	5000	33.6	114.3	0.33	0.61
실시예(I-36)	화합물(P-46)	5.6	15.1	5000	33.2	119.7	0.33	0.61
실시예(I-37)	화합물(P-47)	5.6	15.5	5000	32.2	112.8	0.33	0.62
실시예(I-38)	화합물(P-51)	5.6	15.6	5000	32.1	120.9	0.33	0.62
실시예(I-39)	화합물(P-53)	5.6	15.7	5000	31.8	114.1	0.33	0.61
실시예(I-40)	화합물(P-56)	5.7	16.3	5000	30.7	114.2	0.33	0.61
실시예(I-41)	화합물(P-60)	5.7	16.3	5000	30.6	115.5	0.33	0.62
실시예(I-42)	화합물(P-62)	5.6	16.1	5000	31.0	116.8	0.33	0.61
실시예(I-43)	화합물(P-63)	5.6	16.3	5000	30.6	110.4	0.33	0.61
실시예(I-44)	화합물(P-69)	5.7	14.9	5000	33.4	116.7	0.33	0.62
실시예(I-45)	화합물(P-71)	5.6	13.5	5000	37.1	130.7	0.33	0.61
실시예(I-46)	화합물(P-72)	5.5	13.2	5000	37.9	133.0	0.33	0.62
실시예(I-47)	화합물(P-73)	5.6	12.9	5000	38.6	138.1	0.33	0.61
실시예(I-48)	화합물(P-74)	5.5	13.1	5000	38.1	134.5	0.33	0.62
실시예(I-49)	화합물(P-75)	5.5	13.6	5000	36.8	125.7	0.33	0.62
실시예(I-50)	화합물(P-82)	5.5	13.8	5000	36.1	126.3	0.33	0.62
실시예(I-51)	화합물(P-83)	5.5	13.2	5000	37.8	134.0	0.33	0.61
실시예(I-52)	화합물(P-84)	5.6	13.3	5000	37.7	130.6	0.33	0.62
실시예(I-53)	화합물(P-85)	5.6	14.5	5000	34.4	114.2	0.33	0.62
실시예(I-54)	화합물(P-89)	5.5	13.0	5000	38.5	142.9	0.33	0.62
실시예(I-55)	화합물(P-90)	5.6	13.7	5000	36.5	130.2	0.33	0.62
실시예(I-56)	화합물(P-94)	5.7	14.3	5000	35.1	130.5	0.33	0.62
실시예(I-57)	화합물(P-95)	5.5	13.2	5000	37.8	136.1	0.33	0.62
실시예(I-58)	화합물(P-96)	5.6	14.3	5000	35.1	130.1	0.33	0.62

[381] 상기 표 4의 결과로부터, 본 발명의 화합물을 정공수송층의 재료로 사용한 유기전기발광소자는 발광효율과 수명이 향상된다는 것을 확인할 수 있다.

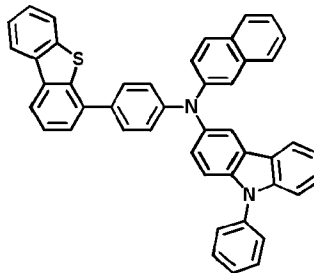
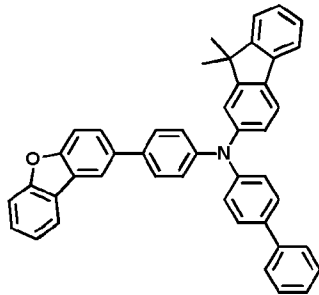
[382] 특히, 일반적으로 널리 정공수송층으로 사용하는 NPB인 비교화합물 1 보다 다이벤조퓨란 또는 다이벤조티오펜 코어에 1개의 아민기가 연결기(직접결합 포함)로 결합되어 있는 구조인 비교화합물 2 내지 비교화합물 5가 발광효율 면에서 더 높은 결과를 나타내었고, 다이벤조퓨란 또는 다이벤조티오펜 코어에 2개의 아민기가 연결기로 결합되어 있는 구조인 본 발명의 화합물이 비교화합물 1 내지 비교화합물 5 보다 높은 발광효율 및 높은 수명을 나타내었다.

- [383] 헤테로 고리(다이벤조퓨란 또는 다이벤조티오펜) 코어에 2개의 아민기가 연결기로 결합되어 있는 구조인 본 발명의 화합물의 경우, 소자 증착 시 헤테로 고리 코어에 1개의 아민기가 연결기(직접결합 포함)로 결합되어 있는 구조인 비교화합물 2 내지 비교화합물 5 보다는 패킹밀도(Packing density)가 높으며, 이로 인해 과전압으로 발생하는 주울열(Joule heating)이 적게 일어나 열적 안정성을 갖는다고 판단되며, 비교적 높은 T1 값으로 인해 과잉의 전자가 발광층에서 정공수송층으로 넘어오는 것을 막아 결과적으로 색순도 증가 및 정공수송층 계면에서의 발광으로 인한 열적 데미지를 감소시켜 수명이 늘어나는 것을 확인할 수 있다.
- [384] 또한 정공수송층의 경우에는 발광층(호스트)과의 상호관계를 파악해야 하는바, 유사한 코어를 사용하더라도 본 발명에 따른 화합물이 사용된 정공수송층에서 나타내는 특징을 유추하는 것은 통상의 기술자라 하더라도 매우 어려울 것이다.
- [385] [실시예 II-1] 그린유기전기발광소자 (발광보조층)
- [386] 본 발명의 화합물을 발광보조층 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기발광소자를 제작하였다. 먼저 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 상에 2-TNATA를 60 nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공주입층 상에 N,N'-Bis(1-naphthalenyl)-N,N'-bis-phenyl-(1,1'-biphenyl)-4,4'-diamine (이하 “NPB”로 약기함)를 60 nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상에 본 발명의 화합물 P-1을 20 nm의 두께로 진공증착하여 발광보조층을 형성한 후, 상기 발광보조층 상에 CBP를 호스트 물질로, Ir(ppy)₃을 도판트 물질로 사용하고 90:10 중량비로 도핑하여 30 nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 BAlq를 10 nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 Alq₃를 40 nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 이후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.
- [387] [실시예 II-2] 내지 [실시예 II-62] 그린유기전기발광소자 (발광보조층)
- [388] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 P-1 대신 하기 표 5에 기재된 본 발명의 화합물 P-2 내지 P-96을 사용한 점을 제외하고는 실시예 II-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.
- [389] [비교예 II-1] 내지 [비교예 II-6]
- [390] 비교예 II-1은 발광보조층을 형성하지 않은 점을 제외하고는 상기 실시예 II-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였고, 비교예 II-2 내지 II-6은 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 P-1 대신 각각 하기 표 5에 기재된 상기 비교화합물 4, 상기 비교화합물 5, 하기 비교화합물 6, 하기 비교화합물 7, 비교화합물 8을 사용한 점을 제외하고 상기 실시예 II-1과 동일한 방법으로

유기전기발광소자를 제작하였다.

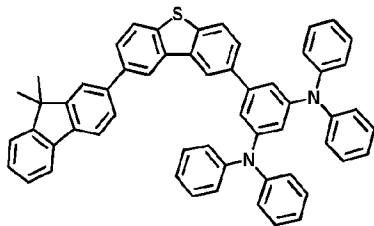
[391] <비교화합물 6> <비교화합물 7>

[392]



[393] <비교화합물 8>

[394]



[395] 본 발명의 실시예 II-1 내지 실시예 II-62 및 비교예 II-1 내지 비교예 II-6에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 그 측정 결과 5000cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였으며, 그 측정 결과는 하기 표 5와 같다.

[396] [표 5]

[397]

	화합물	Voltage (V)	Current Density (mA/cm ²)	Brightness (cd/m ²)	Efficiency (cd/A)	Lifetime T(95)	CIE	
							x	y
비교예(II-1)	-	6.0	21.5	5000	23.3	57.2	0.32	0.61
비교예(II-2)	비교화합물4	6.4	13.6	5000	36.6	101.4	0.33	0.61
비교예(II-3)	비교화합물5	6.5	13.5	5000	37.0	100.9	0.33	0.61
비교예(II-4)	비교화합물6	6.5	15.4	5000	32.4	91.8	0.33	0.61
비교예(II-5)	비교화합물7	6.5	16.7	5000	30.0	88.9	0.33	0.61
비교예(II-6)	비교화합물8	6.5	12.5	5000	40.0	105.8	0.33	0.61
실시예(II-1)	화합물(P-1)	6.4	10.7	5000	46.7	144.6	0.33	0.61
실시예(II-2)	화합물(P-2)	6.3	10.5	5000	47.7	147.6	0.33	0.61
실시예(II-3)	화합물(P-3)	6.3	10.6	5000	47.0	157.0	0.33	0.61
실시예(II-4)	화합물(P-6)	6.3	11.0	5000	45.3	142.4	0.33	0.61
실시예(II-5)	화합물(P-7)	6.4	10.8	5000	46.3	144.2	0.33	0.61
실시예(II-6)	화합물(P-8)	6.3	10.7	5000	46.6	144.7	0.33	0.61
실시예(II-7)	화합물(P-9)	6.4	11.3	5000	44.3	142.2	0.33	0.61
실시예(II-8)	화합물(P-12)	6.3	10.9	5000	46.0	146.9	0.33	0.61
실시예(II-9)	화합물(P-13)	6.3	10.6	5000	47.3	152.9	0.33	0.61
실시예(II-10)	화합물(P-14)	6.2	10.3	5000	48.4	158.8	0.33	0.61
실시예(II-11)	화합물(P-15)	6.3	10.1	5000	49.6	170.5	0.33	0.61
실시예(II-12)	화합물(P-16)	6.2	10.2	5000	49.2	164.2	0.33	0.61
실시예(II-13)	화합물(P-17)	6.2	10.3	5000	48.7	155.2	0.33	0.61
실시예(II-14)	화합물(P-18)	6.3	10.4	5000	48.0	164.2	0.33	0.62
실시예(II-15)	화합물(P-19)	6.4	10.8	5000	46.5	145.1	0.33	0.62
실시예(II-16)	화합물(P-20)	6.4	10.8	5000	46.4	143.6	0.33	0.62
실시예(II-17)	화합물(P-21)	6.4	10.8	5000	46.1	144.9	0.33	0.62
실시예(II-18)	화합물(P-22)	6.3	10.5	5000	47.8	154.8	0.33	0.62
실시예(II-19)	화합물(P-24)	6.4	10.4	5000	48.2	150.9	0.33	0.62
실시예(II-20)	화합물(P-25)	6.4	10.7	5000	46.8	157.3	0.33	0.61
실시예(II-21)	화합물(P-26)	6.4	10.7	5000	46.7	140.5	0.33	0.61
실시예(II-22)	화합물(P-27)	6.3	10.7	5000	46.6	147.3	0.33	0.61
실시예(II-23)	화합물(P-29)	6.4	10.9	5000	45.9	141.4	0.33	0.61
실시예(II-24)	화합물(P-30)	6.3	10.7	5000	46.9	148.5	0.33	0.62
실시예(II-25)	화합물(P-34)	6.3	10.7	5000	46.7	152.8	0.33	0.62
실시예(II-26)	화합물(P-35)	6.4	10.9	5000	45.7	145.4	0.33	0.62
실시예(II-27)	화합물(P-37)	6.4	10.7	5000	46.6	151.8	0.33	0.61
실시예(II-28)	화합물(P-38)	6.3	10.9	5000	45.9	143.7	0.33	0.62

[398]

실시예(II-29)	화합물(P-41)	6.4	10.8	5000	46.5	154.5	0.33	0.61
실시예(II-30)	화합물(P-42)	6.3	10.4	5000	48.1	153.1	0.33	0.61
실시예(II-31)	화합물(P-44)	6.4	10.9	5000	46.0	140.8	0.33	0.61
실시예(II-32)	화합물(P-45)	6.3	10.5	5000	47.8	157.2	0.33	0.62
실시예(II-33)	화합물(P-46)	6.2	10.6	5000	47.1	153.9	0.33	0.62
실시예(II-34)	화합물(P-49)	6.3	10.8	5000	46.5	157.2	0.33	0.61
실시예(II-35)	화합물(P-62)	6.4	11.0	5000	45.6	146.3	0.33	0.61
실시예(II-36)	화합물(P-69)	6.3	10.5	5000	47.4	148.0	0.33	0.62
실시예(II-37)	화합물(P-71)	6.3	10.2	5000	49.1	155.8	0.33	0.62
실시예(II-38)	화합물(P-72)	6.2	10.2	5000	48.8	161.4	0.33	0.62
실시예(II-39)	화합물(P-73)	6.2	10.0	5000	50.1	171.6	0.33	0.61
실시예(II-40)	화합물(P-74)	6.2	10.0	5000	50.0	170.5	0.33	0.62
실시예(II-41)	화합물(P-75)	6.2	9.9	5000	50.6	173.3	0.33	0.62
실시예(II-42)	화합물(P-76)	6.3	9.8	5000	51.0	173.3	0.33	0.61
실시예(II-43)	화합물(P-77)	6.3	9.8	5000	51.0	174.1	0.33	0.62
실시예(II-44)	화합물(P-78)	6.3	10.2	5000	49.2	157.6	0.33	0.62
실시예(II-45)	화합물(P-79)	6.2	10.0	5000	49.9	167.2	0.33	0.61
실시예(II-46)	화합물(P-80)	6.3	10.0	5000	50.1	168.1	0.33	0.61
실시예(II-47)	화합물(P-81)	6.2	10.2	5000	49.2	171.3	0.33	0.62
실시예(II-48)	화합물(P-82)	6.2	10.3	5000	48.7	157.8	0.33	0.62
실시예(II-49)	화합물(P-83)	6.3	10.0	5000	50.0	170.0	0.33	0.61
실시예(II-50)	화합물(P-84)	6.3	10.0	5000	49.9	170.9	0.33	0.62
실시예(II-51)	화합물(P-85)	6.3	10.4	5000	48.0	151.9	0.33	0.62
실시예(II-52)	화합물(P-86)	6.3	10.4	5000	47.9	156.9	0.33	0.62
실시예(II-53)	화합물(P-87)	6.2	10.3	5000	48.4	159.5	0.33	0.61
실시예(II-54)	화합물(P-88)	6.2	10.2	5000	49.1	156.5	0.33	0.62
실시예(II-55)	화합물(P-89)	6.3	10.3	5000	48.4	162.6	0.33	0.61
실시예(II-56)	화합물(P-90)	6.2	10.2	5000	48.9	167.0	0.33	0.62
실시예(II-57)	화합물(P-91)	6.2	10.6	5000	47.2	152.4	0.33	0.61
실시예(II-58)	화합물(P-92)	6.3	10.6	5000	47.2	155.2	0.33	0.61
실시예(II-59)	화합물(P-93)	6.3	10.3	5000	48.6	164.1	0.33	0.62
실시예(II-60)	화합물(P-94)	6.3	10.4	5000	48.2	164.8	0.33	0.62
실시예(II-61)	화합물(P-95)	6.3	10.5	5000	47.5	157.4	0.33	0.62
실시예(II-62)	화합물(P-96)	6.3	10.6	5000	47.2	153.7	0.33	0.62

[399]

[실시예 III-1] 레드유기 전기발광소자 (발광보조층)

[400]

본 발명의 화합물을 발광보조층 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기발광소자를 제작하였다. 먼저 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 상에 2-TNATA를 60 nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공주입층 상에 NPB를 60 nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상에 본 발명의 화합물 P-1을 20 nm의 두께로

진공증착하여 발광보조층을 형성한 후, 상기 발광보조층 상에 CBP를 호스트 물질로, bis-(1-phenylisoquinolyl)iridium(III)acetylacetonate (이하 "(piq)₂Ir(acac)"로 약기함)을 도판트 물질로 사용하고 95:5 중량비로 도핑하여 30 nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 BAlq를 10 nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 Alq₃를 40 nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 이후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[401] [실시예 III-2] 내지 [실시예 III-48] 레드유기전기발광소자 (발광보조층)

[402] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 P-1 대신 하기 표 6에 기재된 본 발명의 화합물 P-2 내지 P-96을 사용한 점을 제외하고는 실시예 III-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[403] [비교예 III-1] 내지 [비교예 III-6]

[404] 비교예 III-1은 발광보조층을 형성하지 않은 점을 제외하고는 상기 실시예 III-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였고, 비교예 III-2 내지 비교예 III-6은 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 P-1 대신 각각 하기 표 6에 기재된 상기 비교화합물 4, 상기 비교화합물 5, 상기 비교화합물 6, 상기 비교화합물 7, 비교화합물 8을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 III-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[405] 본 발명의 실시예 III-1 내지 실시예 III-48, 비교예 III-1 및 비교예 III-6에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresarch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 그 측정 결과 2500cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였으며, 그 측정 결과는 하기 표 6과 같다.

[406] [표 6]

[407]

	화합물	Voltage (V)	Current Density (mA/cm ²)	Brightness (cd/m ²)	Efficiency (cd/A)	Lifetime T(95)	CIE	
							x	y
비교예(III-1)	-	6.5	33.8	2500	7.4	63.8	0.66	0.32
비교예(III-2)	비교화합물4	6.9	25.4	2500	9.8	95.5	0.66	0.33
비교예(III-3)	비교화합물5	6.8	25.3	2500	9.9	96.7	0.66	0.33
비교예(III-4)	비교화합물6	6.9	26.6	2500	9.4	91.0	0.66	0.32
비교예(III-5)	비교화합물7	6.9	27.7	2500	9.0	88.5	0.66	0.33
비교예(III-6)	비교화합물8	6.8	23.0	2500	10.9	95.7	0.66	0.33
실시예(III-1)	화합물(P-1)	6.7	20.7	2500	12.1	133.0	0.66	0.33
실시예(III-2)	화합물(P-2)	6.7	19.9	2500	12.6	136.5	0.66	0.33
실시예(III-3)	화합물(P-3)	6.7	18.4	2500	13.6	136.1	0.66	0.33
실시예(III-4)	화합물(P-6)	6.8	20.8	2500	12.0	128.2	0.66	0.32
실시예(III-5)	화합물(P-14)	6.8	18.4	2500	13.6	145.0	0.66	0.32
실시예(III-6)	화합물(P-15)	6.7	15.8	2500	15.8	159.3	0.66	0.32
실시예(III-7)	화합물(P-16)	6.6	17.0	2500	14.7	156.3	0.66	0.32
실시예(III-8)	화합물(P-17)	6.6	17.3	2500	14.4	152.8	0.66	0.32
실시예(III-9)	화합물(P-18)	6.7	16.8	2500	14.9	154.9	0.66	0.32
실시예(III-10)	화합물(P-19)	6.7	20.2	2500	12.4	126.7	0.66	0.32
실시예(III-11)	화합물(P-20)	6.7	20.4	2500	12.3	134.0	0.66	0.32
실시예(III-12)	화합물(P-21)	6.8	20.4	2500	12.2	127.0	0.66	0.33
실시예(III-13)	화합물(P-22)	6.8	19.1	2500	13.1	140.0	0.66	0.32
실시예(III-14)	화합물(P-24)	6.8	17.7	2500	14.1	147.8	0.66	0.33
실시예(III-15)	화합물(P-30)	6.8	19.6	2500	12.8	137.5	0.66	0.32
실시예(III-16)	화합물(P-31)	6.8	21.2	2500	11.8	128.2	0.66	0.33
실시예(III-17)	화합물(P-34)	6.7	19.9	2500	12.6	137.0	0.66	0.32
실시예(III-18)	화합물(P-45)	6.7	17.4	2500	14.4	147.1	0.66	0.33
실시예(III-19)	화합물(P-46)	6.8	18.6	2500	13.5	138.7	0.66	0.32
실시예(III-20)	화합물(P-49)	6.7	18.3	2500	13.6	138.2	0.66	0.32
실시예(III-21)	화합물(P-69)	6.8	18.0	2500	13.9	139.2	0.66	0.32
실시예(III-22)	화합물(P-70)	6.7	19.2	2500	13.0	142.4	0.66	0.32
실시예(III-23)	화합물(P-71)	6.6	17.3	2500	14.4	151.6	0.66	0.33
실시예(III-24)	화합물(P-72)	6.6	17.2	2500	14.5	152.2	0.66	0.32
실시예(III-25)	화합물(P-73)	6.7	17.1	2500	14.6	150.5	0.66	0.33
실시예(III-26)	화합물(P-74)	6.6	17.1	2500	14.6	155.2	0.66	0.32
실시예(III-27)	화합물(P-75)	6.6	15.5	2500	16.1	165.4	0.66	0.32
실시예(III-28)	화합물(P-76)	6.6	14.8	2500	16.9	169.7	0.66	0.32

[408]

실시예(III-29)	화합물(P-77)	6.6	15.2	2500	16.5	168.8	0.66	0.32
실시예(III-30)	화합물(P-78)	6.6	16.6	2500	15.1	156.9	0.66	0.32
실시예(III-31)	화합물(P-79)	6.6	15.8	2500	15.8	157.0	0.66	0.32
실시예(III-32)	화합물(P-80)	6.6	15.9	2500	15.7	163.1	0.66	0.33
실시예(III-33)	화합물(P-81)	6.7	15.8	2500	15.8	160.6	0.66	0.32
실시예(III-34)	화합물(P-82)	6.6	16.4	2500	15.2	151.2	0.66	0.32
실시예(III-35)	화합물(P-83)	6.7	15.9	2500	15.7	161.8	0.66	0.33
실시예(III-36)	화합물(P-84)	6.7	16.1	2500	15.5	159.0	0.66	0.32
실시예(III-37)	화합물(P-85)	6.8	17.7	2500	14.1	148.9	0.66	0.33
실시예(III-38)	화합물(P-86)	6.8	17.4	2500	14.3	144.0	0.66	0.32
실시예(III-39)	화합물(P-87)	6.7	16.9	2500	14.8	152.3	0.66	0.33
실시예(III-40)	화합물(P-88)	6.6	16.8	2500	14.9	149.3	0.66	0.33
실시예(III-41)	화합물(P-89)	6.7	18.0	2500	13.9	146.1	0.66	0.33
실시예(III-42)	화합물(P-90)	6.6	16.5	2500	15.2	151.8	0.66	0.32
실시예(III-43)	화합물(P-91)	6.8	17.6	2500	14.2	144.3	0.66	0.32
실시예(III-44)	화합물(P-92)	6.8	17.5	2500	14.3	145.5	0.66	0.32
실시예(III-45)	화합물(P-93)	6.6	17.1	2500	14.6	151.2	0.66	0.33
실시예(III-46)	화합물(P-94)	6.6	16.7	2500	15.0	150.5	0.66	0.32
실시예(III-47)	화합물(P-95)	6.7	18.1	2500	13.8	142.2	0.66	0.33
실시예(III-48)	화합물(P-96)	6.8	17.8	2500	14.0	147.5	0.66	0.33

[409] 상기 표 5 및 표 6의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 화합물을 발광보조층의 재료로 사용한 유기전기발광소자는 비교예 II-1 내지 비교예 III-5의 유기전기발광소자에 비해 발광효율이 향상되고 수명이 현저히 개선되었다.

[410] 이와 같은 결과는 발광보조층을 형성하지 않은 소자보다 비교화합물 4 내지 비교화합물 8 및 본 발명의 화합물을 발광보조층으로 사용한 소자가 발광효율 및 수명이 향상된 것을 확인할 수 있으며, 그 중에서도 본 발명의 화합물이 발광효율과 수명 면에서 월등히 높은 결과를 나타내는 것을 확인할 수 있다. 이는 헥테로 고리 (다이벤조퓨란 또는 다이벤조티오펜) 코어와 2개의 아민기가 연결기로 결합되어 있는 구조가 정공수송층 뿐만 아니라 발광보조층(녹색 인광, 적색 인광)에서도 소자의 성능향상에 주요인자로 작용하여 전하 균형(charge balance)을 이루고 효과적인 전자 저지(blocking) 역할을 수행하기 때문인 것으로 판단된다.

[411] 발광보조층 재료로 사용한 본 발명의 화합물은 깊은 HOMO 에너지 레벨을 가지면서 정공이 발광층으로 원활하게 수송되고 결과적으로 양성 폴라론(Polaron)이 발광층 계면에 쌓이게 되는 것을 방지하여 계면열화를 줄이는 동시에 발광층 내 전하균형(Charge Balance)을 증가시키게 되어 이로 인해 발광효율과 수명이 향상되는 것을 확인할 수 있다.

[412] 앞에서 설명한 특성인 높은 열적 안정성, 높은 T1 값, 깊은 HOMO 에너지 레벨

등을 종합해보면 헤테로 고리 코어 및 연결기에 치환되는 아민기의 도입 개수에 따라 밴드 갭, 전기적 특성, 계면 특성 등이 크게 변화될 수 있다는 것을 보여주며 이는 소자의 성능향상에 주요 인자로 작용한다는 것을 확인할 수 있다.

[413] 아울러, 전술한 소자 제작의 평가 결과에서는 본 발명의 화합물을 정공수송층 및 발광보조층 중 한 층에만 적용한 소자 특성을 설명하였으나, 본 발명의 화합물을 정공수송층과 발광보조층 모두 적용하여 사용될 수 있다.

[414] 이상의 설명은 본 발명을 예시적으로 설명한 것에 불과한 것으로, 본 발명에 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가지는 자라면 본 발명의 본질적인 특성에서 벗어나지 않는 범위에서 다양한 변형이 가능할 것이다. 따라서, 본 명세서에 개시된 실시예들은 본 발명을 한정하기 위한 것이 아니라 설명하기 위한 것이고, 이러한 실시예에 의하여 본 발명의 사상과 범위가 한정되는 것은 아니다. 본 발명의 보호범위는 청구범위에 의하여 해석되어야 하며, 그와 동등한 범위내에 있는 모든 기술은 본 발명의 권리범위에 포함하는 것으로 해석되어야 한다.

[415] **CROSS-REFERENCE TO RELATED APPLICATION**

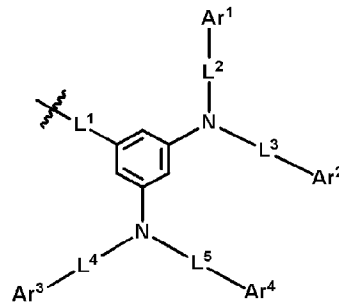
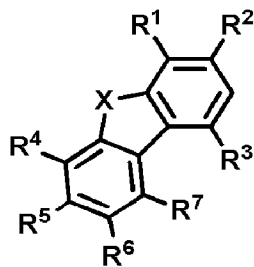
[416] 본 특허출원은 2015년 3월 16일 한국에 출원한 특허출원번호 제10-2015-0036231호에 대해 미국 특허법 119(a)조 (35 U.S.C § 119(a))에 따라 우선권을 주장하며, 그 모든 내용은 참고문헌으로 본 특허출원에 병합된다.

[417] 아울러, 본 특허출원은 미국 이외에 국가에 대해서도 위와 동일한 이유로 우선권을 주장하면 그 모든 내용은 참고문헌으로 본 특허출원에 병합된다.

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

<화학식 1> <화학식 2>



상기 화학식 1에서,

X는 O 또는 S이며,

R¹ 내지 R³는 서로 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로젠; 시아노기; 나이트로기; C₆-C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁-C₅₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₁-C₃₀의 알콕실기; C₆-C₃₀의 아릴옥시기; 및 화학식 2로 이루어진 군에서 선택되고, 단 R¹ 내지 R³ 중 적어도 하나는 화학식 2이며,

R⁴ 내지 R⁷은 서로 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로젠; 시아노기; 나이트로기; C₆-C₆₀의 아릴기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁-C₅₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₁-C₃₀의 알콕실기; 및 C₆-C₃₀의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택되고, R⁴ 내지 R⁷는 선택적으로 이웃한 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있으며, 단 R⁴ 내지 R⁷에서 다이벤조퓨릴기 및 다이벤조싸이엔일기는 제외되며,

상기 화학식 2에서,

Ar¹ 내지 Ar⁴는 서로 독립적으로 C₆-C₆₀의 아릴기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기; 플루오렌일기; C₆-C₆₀의 방향족고리와 C₃-C₆₀의 지방족고리의 융합고리기; C₁-C₅₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₁-C₃₀의 알콕실기; 및 C₆-C₃₀의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택되고,

L¹ 내지 L⁵는 서로 독립적으로 단일결합; C₆-C₆₀의 아릴렌기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기; 플루오렌일렌기; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의

방향족고리의 융합고리기; 및 C_1-C_{60} 의 지방족 탄화수소기로 이루어진 군에서 선택되며, 이들 각각은(단일 결합 제외) 중수소; 할로젠; 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; C_1-C_{20} 의 알킬싸이오기; C_1-C_{20} 의 알콕실기; C_1-C_{20} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_6-C_{20} 의 아릴기; 중수소로 치환된 C_6-C_{20} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{20} 의 헤테로고리기; C_3-C_{20} 의 시클로알킬기; C_7-C_{20} 의 아릴알킬기; 및 C_8-C_{20} 의 아릴알켄일기;로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있으며,

상기 R^1 내지 R^3 , 및 Ar^1 내지 Ar^4 가 아릴기, 플루오렌일기, 헤테로고리기, 융합고리기, 알킬기, 알켄일기, 알킨일기, 알콕시기, 아릴옥시기인 경우, 이들 각각은 중수소; 할로젠; C_1-C_{20} 의 알킬기 또는 C_6-C_{20} 의 아릴기로 치환 또는 비치환된 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; C_1-C_{20} 의 알킬싸이오기; C_1-C_{20} 의 알콕실기; C_1-C_{20} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_6-C_{20} 의 아릴기; 중수소로 치환된 C_6-C_{20} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{20} 의 헤테로고리기; C_3-C_{20} 의 시클로알킬기; C_7-C_{20} 의 아릴알킬기; 및 C_8-C_{20} 의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더욱 치환될 수 있으며, 이들 각 치환기가 인접한 경우 이들은 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

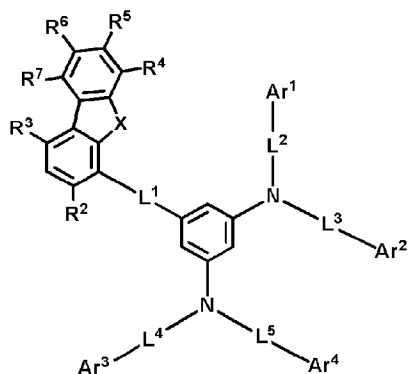
상기 R^4 내지 R^7 가 아릴기, 헤테로고리기, 융합고리기, 알킬기, 알켄일기, 알킨일기, 알콕시기, 또는 아릴옥시기인 경우, 이들 각각은 중수소; 할로젠; C_1-C_{20} 의 알킬기 또는 C_6-C_{20} 의 아릴기로 치환 또는 비치환된 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; C_1-C_{20} 의 알킬싸이오기; C_1-C_{20} 의 알콕실기; C_1-C_{20} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_6-C_{20} 의 아릴기; 중수소로 치환된 C_6-C_{20} 의 아릴기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{20} 의 헤테로고리기(단, 다이벤조퓨릴기 및 다이벤조싸이엔일기는 제외함); C_3-C_{20} 의 시클로알킬기; C_7-C_{20} 의 아릴알킬기; 및 C_8-C_{20} 의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다

[청구항 2]

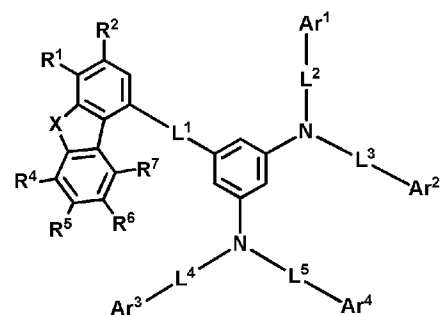
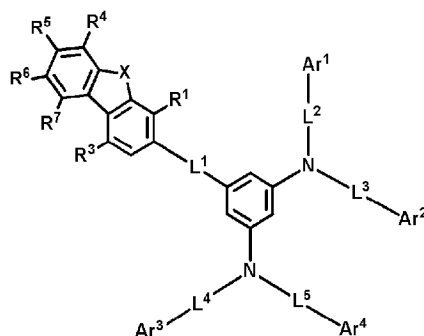
제 1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 3 내지 화학식 5 중 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물:

<화학식 3> <화학식 4>



<화학식 5>



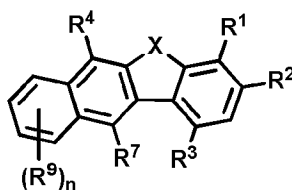
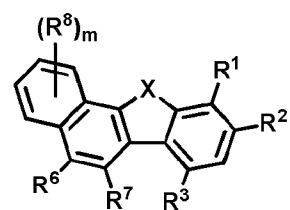
상기 화학식 3 내지 화학식 5에서, X, R¹ 내지 R⁷, Ar¹ 내지 Ar⁴, 및 L¹ 내지 L⁵는 제 1항에서 정의된 것과 동일하다.

[청구항 3]

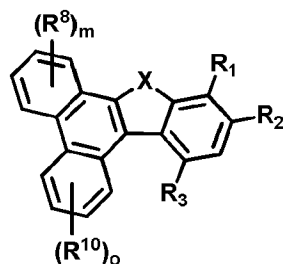
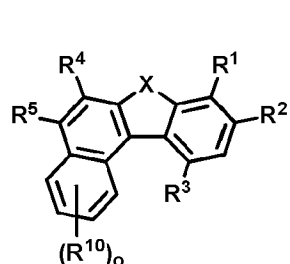
제 1항에 있어서,

상기 화학식 1의 R⁴와 R⁵, R⁵와 R⁶, 및 R⁶와 R⁷ 중 적어도 한쌍이 서로 결합하여 고리를 형성하는 경우, 상기 화학식 1은 하기 화학식 6 내지 화학식 9 중 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물:

<화학식 6> <화학식 7>



<화학식 8> <화학식 9>



상기 화학식 6 내지 화학식 9에서,

X, R¹ 내지 R⁷은 제 1항에서 정의된 것과 동일하며,

R⁸ 내지 R¹⁰은 서로 독립적으로 중수소; 삼중수소; 할로젠; 시아노기;

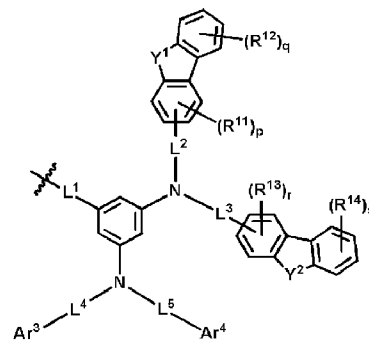
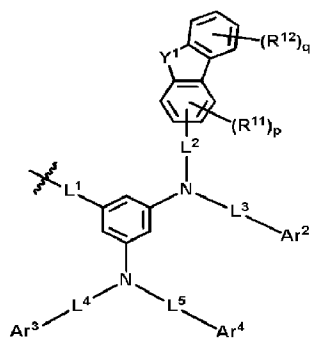
나이트로기; C₆-C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리; C₁-C₅₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₁-C₃₀의 알콕실기; 및 C₆-C₃₀의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택될 수 있으며, m, n 및 o는 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, 이들 각각이 2 이상의 정수인 경우 R⁸ 내지 R¹⁰은 각각 서로 동일하거나 상이하다.

[청구항 4]

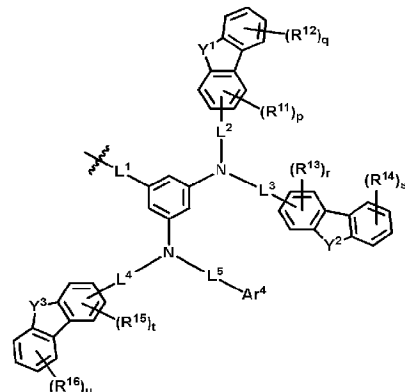
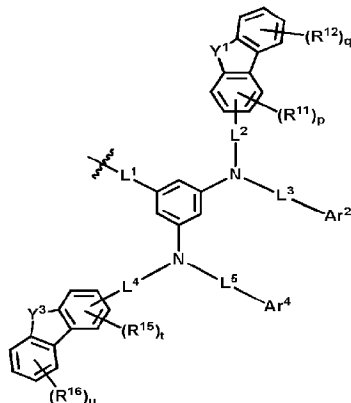
제 1항에 있어서,

상기 화학식 2는 하기 화학식 10 내지 화학식 14 중 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물:

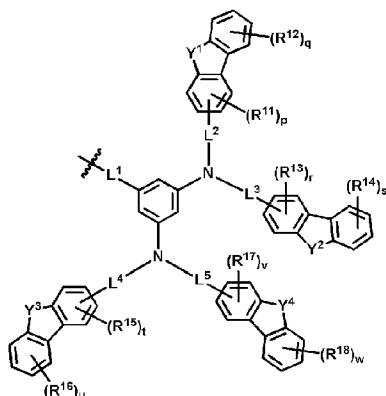
<화학식 10> <화학식 11>



<화학식 12> <화학식 13>



<화학식 14>



상기 화학식 10 내지 화학식 14에서,

Ar^2 내지 Ar^4 , L^1 내지 L^5 는 제 1항에서 정의된 것과 동일하며,

Y^1 내지 Y^4 는 서로 독립적으로 S, O, C(R^a)(R^b) 또는 N(R^c)이며, 여기서 R^a 내지 R^c 는 서로 독립적으로 C_6-C_{60} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; 및 C_6-C_{30} 의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택되며, 선택적으로 R^a 및 R^b 는 서로 결합하여 이들이 결합된 탄소와 함께 스파이로 화합물을 형성할 수 있고,

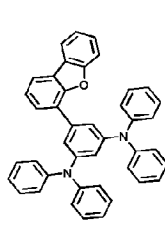
R^{11} 내지 R^{18} 은 서로 독립적으로 중수소; 삼중수소; 할로젠; 시아노기; 나이트로기; C_6-C_{60} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; 및 C_6-C_{30} 의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택되고, 복수의 R^{11} 내지 R^{18} 이 존재할 경우 서로 독립적으로 이웃한 R^{11} 끼리, R^{12} 끼리, R^{13} 끼리, R^{14} 끼리, R^{15} 끼리, R^{16} 끼리, R^{17} 끼리 및 R^{18} 끼리 중 적어도 한쌍이 결합하여 고리를 형성할 수 있으며,

p , r , t 및 v 는 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수이며, 이들 각각이 2 이상의 정수인 경우, R^{11} , R^{13} , R^{15} 및 R^{17} 은 각각 서로 동일하거나 상이하며,

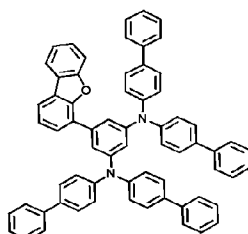
q , s , u 및 w 는 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, 이들 각각이 2 이상의 정수인 경우, R^{12} , R^{14} , R^{16} 및 R^{18} 은 각각 서로 동일하거나 상이하다.

[청구항 5] 제 1항에 있어서

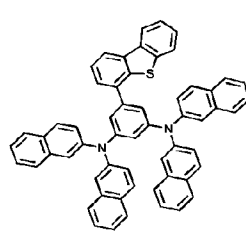
상기 화학식 1은 하기 화합물 중 하나인 것을 특징으로 하는 화합물:



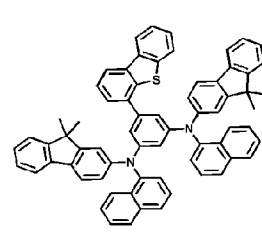
P-1



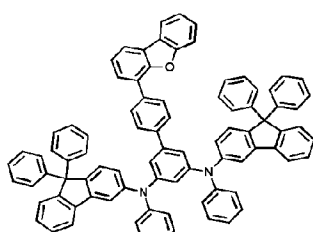
P-2



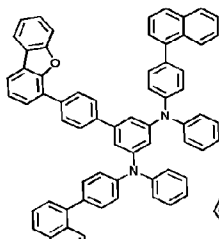
P-3



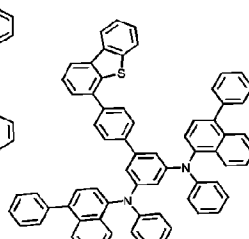
P-4



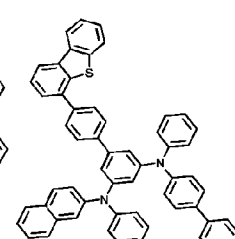
P-5



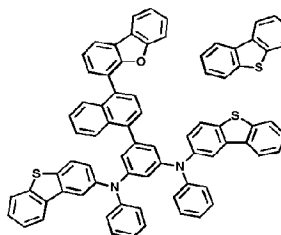
P-6



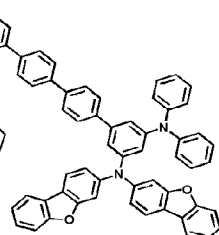
P-7



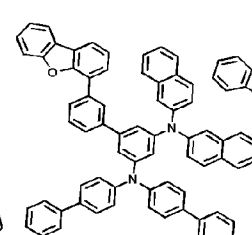
P-8



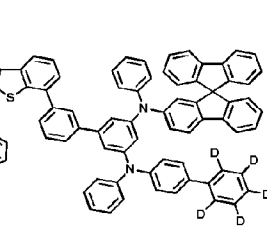
P-9



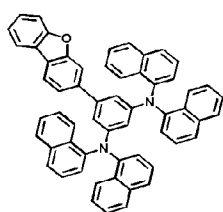
P-10



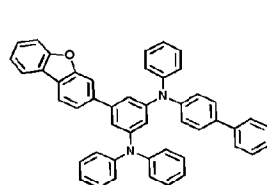
P-11



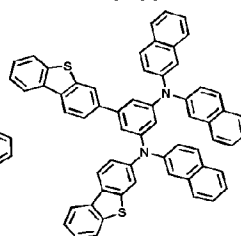
P-12



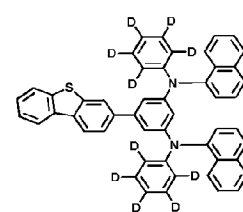
P-13



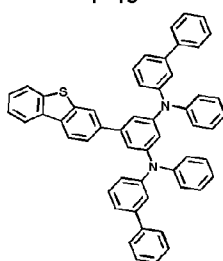
P-14



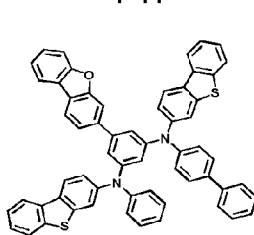
P-15



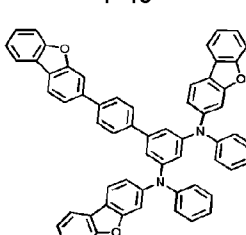
P-16



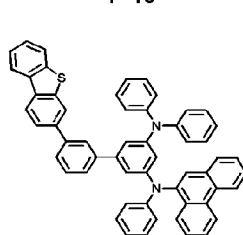
P-17



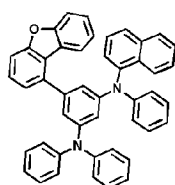
P-18



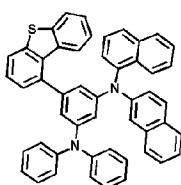
P-19



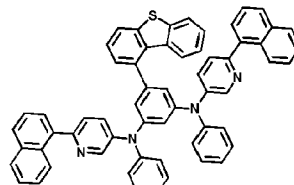
P-20



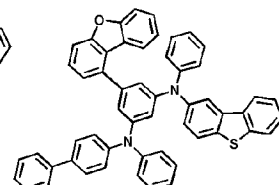
P-21



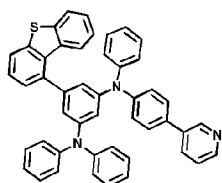
P-22



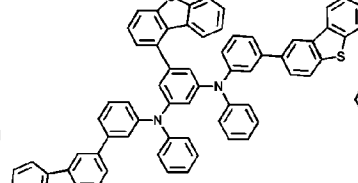
P-23



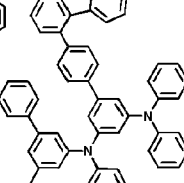
P-24



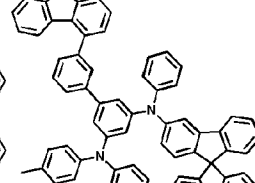
P-25



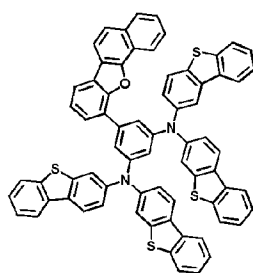
P-26



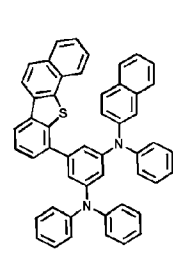
P-27



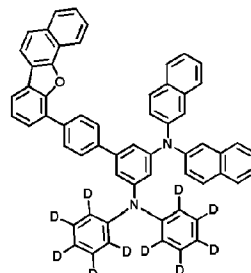
P-28



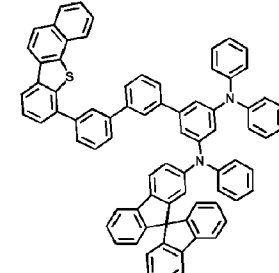
P-29



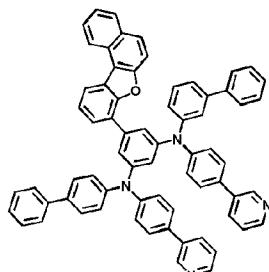
P-30



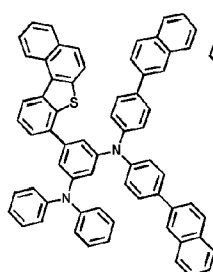
P-31



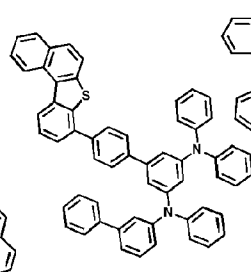
P-32



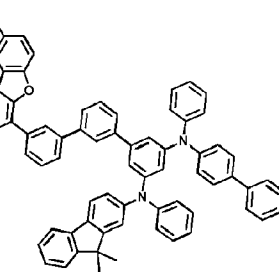
P-33



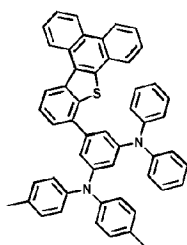
P-34



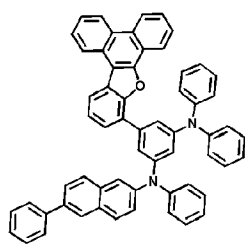
P-35



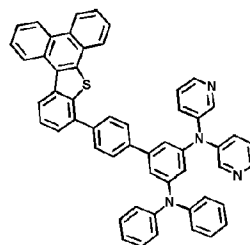
P-36



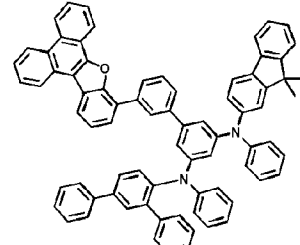
P-37



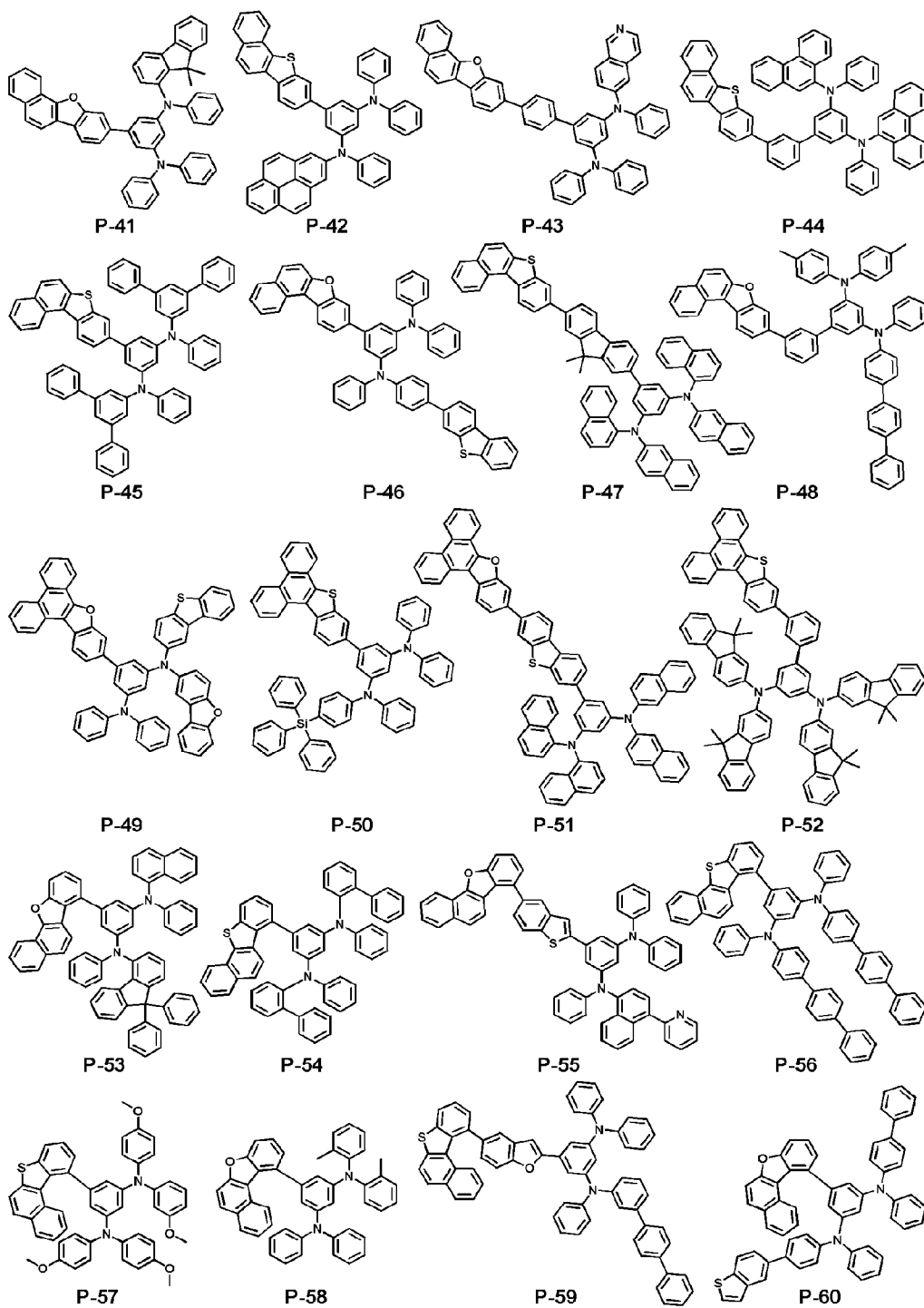
P-38

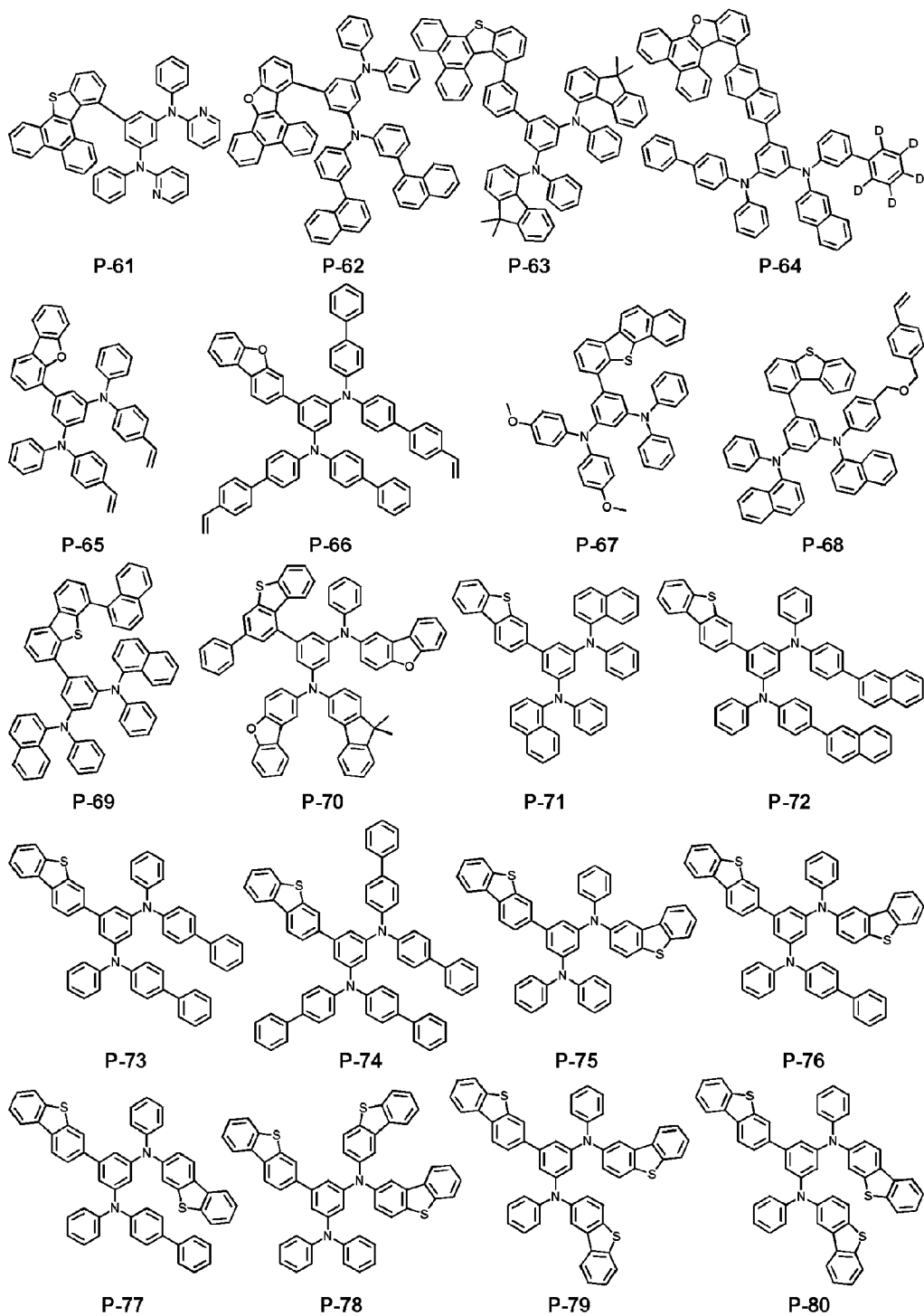


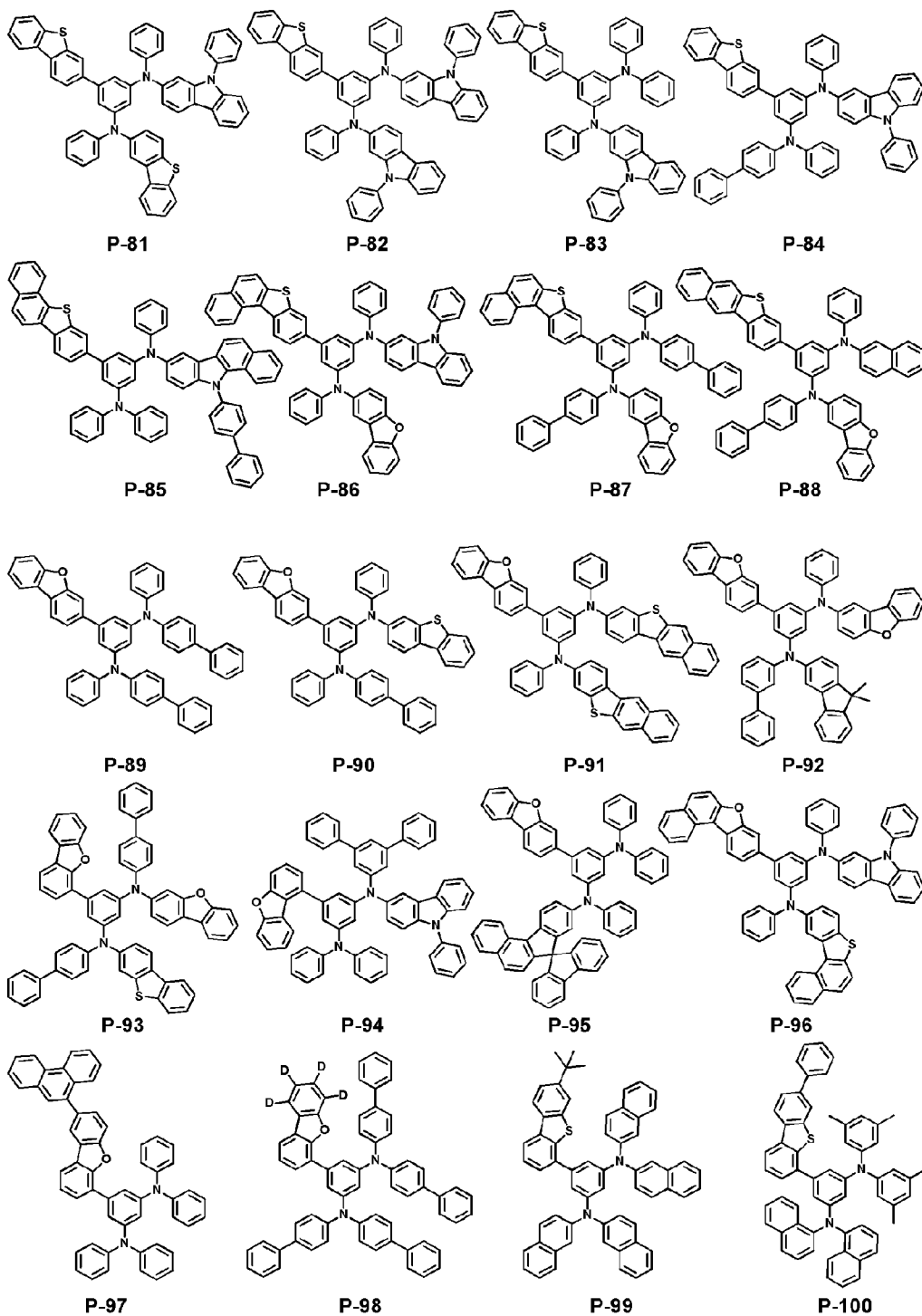
P-39

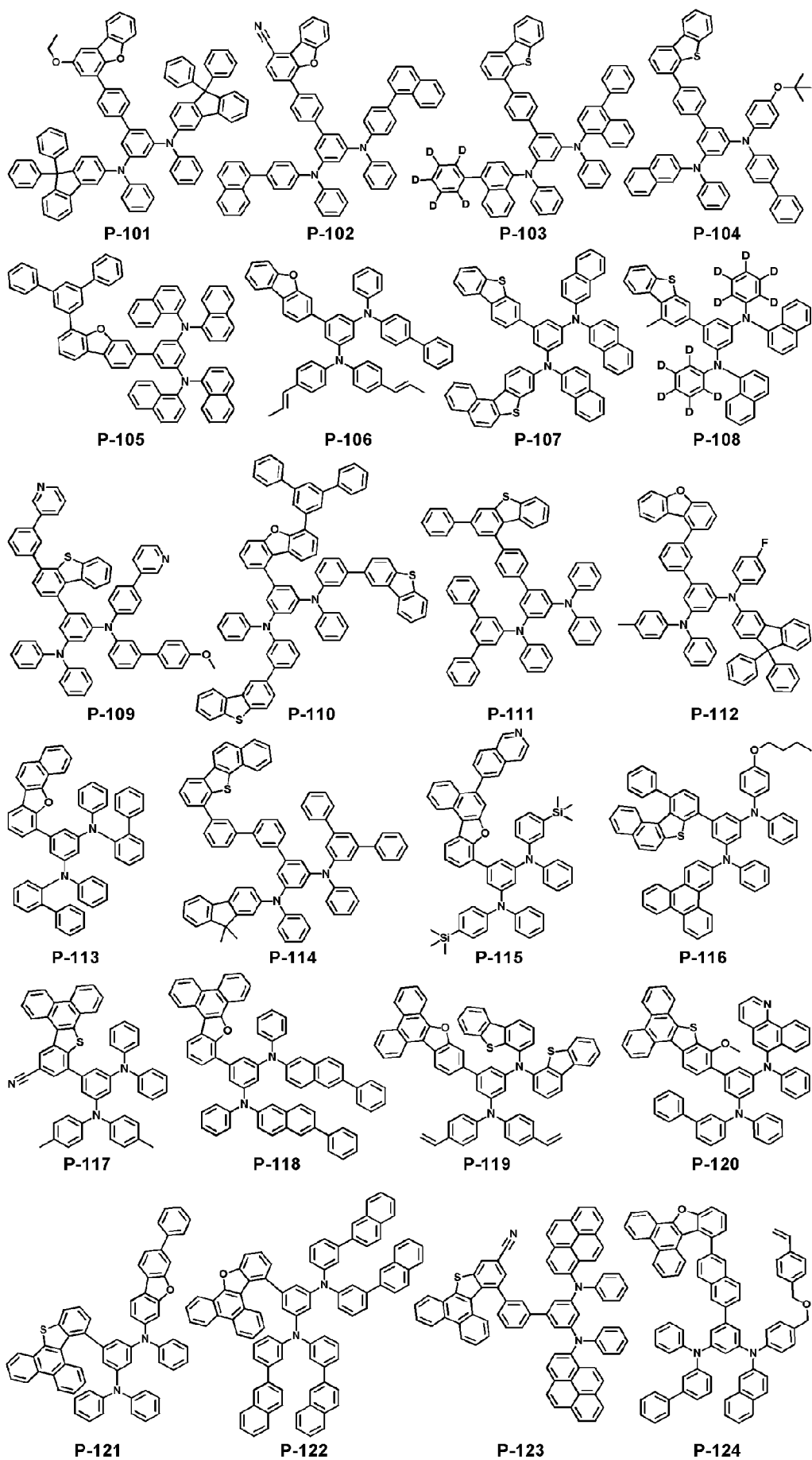


P-40









- [청구항 6] 제 1전극; 제 2전극; 및 상기 제 1전극과 제 2전극 사이에 형성된 유기물층;을 포함하는 유기전기소자에 있어서,
상기 유기물층은 제 1항의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.
- [청구항 7] 제 6항에 있어서,
상기 화합물은 상기 유기물층의 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송보조층, 전자수송층 및 전자주입층 중 적어도 하나의 층에 포함되며, 상기 화합물은 1종 단독 화합물 또는 2종 이상의 혼합물인 것을 특징으로 하는 유기전기소자.
- [청구항 8] 제 6항에 있어서,
상기 유기물층은 스핀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정 또는 롤투롤 공정에 의해 형성되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.
- [청구항 9] 제 6항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및
상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부;를 포함하는 전자장치.
- [청구항 10] 제 9항에 있어서,
상기 유기전기소자는 유기전기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체, 유기트랜지스터, 및 단색 또는 백색 조명용 소자 중 하나인 것을 특징으로 하는 전자장치.

[도1]

100